

第1回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
～ポストペタスケールコンピューティングへの学際計算科学の展開～
（「先端学際計算科学共同研究拠点」キックオフ・シンポジウム）
@ 筑波大学・計算科学研究センター



筑波大学

University of Tsukuba

計算科学が推進する学際融合 ～素粒子・原子核・宇宙分野の取り組み

橋本省二（高エネルギー加速器研究機構）

2010年5月6日



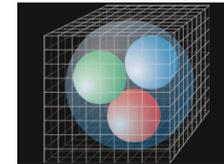


ペタ(10^{15})とかエクサ(10^{18})とか言うけど

▶ まだ全然足りない

▶ 陽子の輪切り

- ▶ まだせいぜい一辺を30等分しただけ。時空は連続。



▶ 陽子・中性子のおだんご

- ▶ ちゃんと計算できるのは4個とか5個。ウランでは238個。



▶ 水とか空気とか

- ▶ グラム単位で集めると中には 10^{23} 個の原子。



▶ 星の数ほど...

- ▶ 銀河に含まれる星は1000億個。宇宙にある銀河は1000億個。
- ▶ 137億年にわたって進化。





きっとまだ始まったばかり

- ▶ だからこそ「研究分野」に分かれている
 - ▶ 自然界の階層を反映: 素粒子、原子核、物性、生命...、宇宙
 - ▶ でもそれが今後もずっと必要かどうかはわからない。
- ▶ 「そんなにあって使えるの？」はありえない
 - ▶ まだ全然足りないので、逆にどう使うかが難しい。
- ▶ アイデアが試される 
 - ▶ 既存の知識・技術 + 使える計算資源 を最大限活用。





もくじ

1. 素粒子・原子核・天文宇宙分野の紹介
 - ▶ 何を狙っているのか
 - ▶ シミュレーションの役割
 - ▶ どこまで来たのか（+ちょっと我田引水）
2. 学際融合のとりくみ
 - ▶ 新学術領域研究
 - ▶ 次世代スパコン戦略分野として
3. ポスト・ペタスケールへ向けて
 - ▶ まとめにかえて



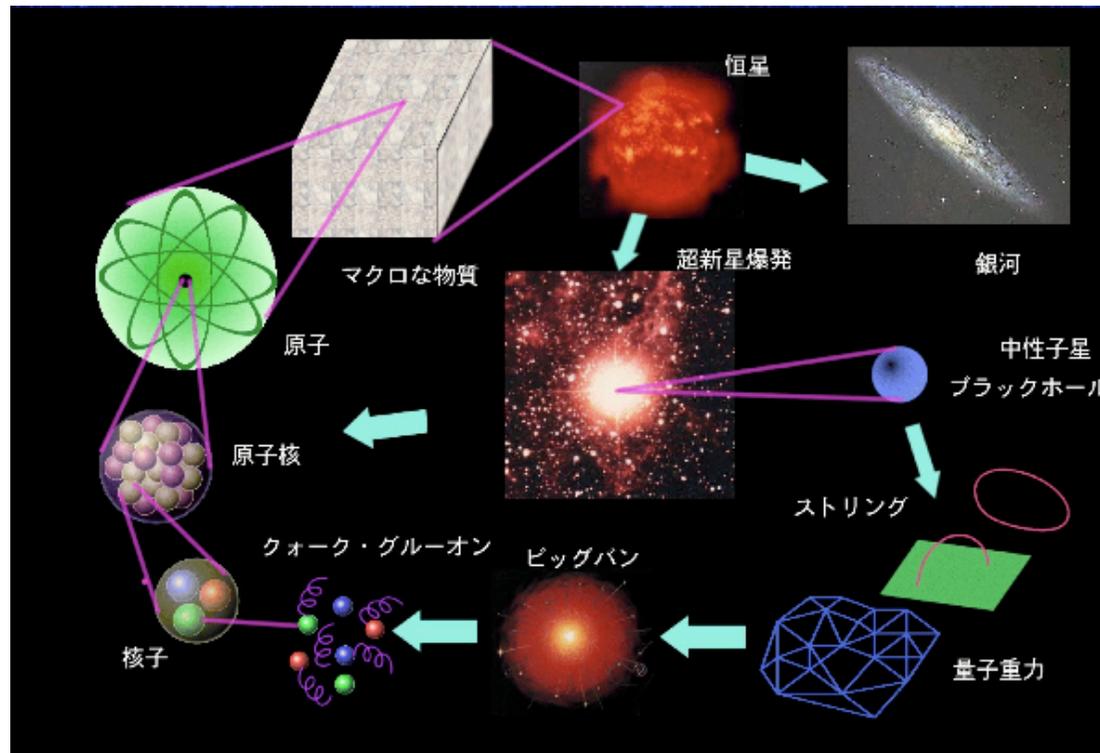
1

素粒子・原子核・天文宇宙分野の紹介



宇宙の生い立ち、私たちの生い立ち

- ▶ すべてを理解したい。



宇宙はなぜこうなっているのか？

物質はどのように作られてきたのか？

物質は何からできているのか？

宇宙はなぜ、どのように生まれたのか？

哲学や禅問答ではなく、科学的に答が得られる(かもしれない)時代





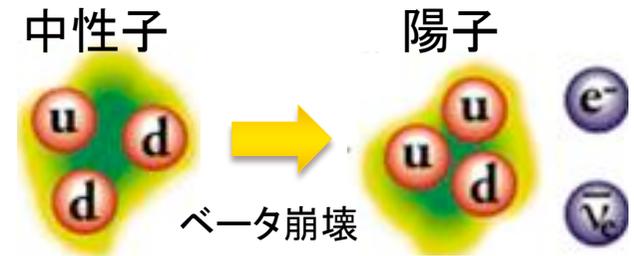
宇宙は単純ではない (例1)

▶ 陽子と中性子の質量

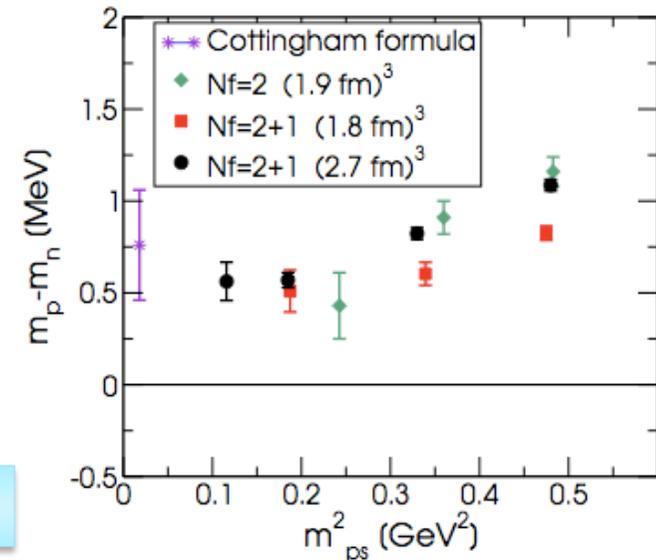
- ▶ $p < n$: 陽子は中性子よりちょっとだけ軽い (-1.3 MeV) → ベータ崩壊
 - ▶ $p > n$: 電荷による自己エネルギーの分だけ陽子の方が重いはず ~ (+1 MeV)
 - ▶ $p < n$: クォークの質量はダウンのほうがアップより少し重い ~ (-2 MeV)

▶ 両者がうまく相殺している。

- ▶ 0.1% のつりあい。
- ▶ 中性子が重すぎると原子核は不安定。
- ▶ 陽子のほうが重いと宇宙は中性子だけ！



Blum et al. (2009)



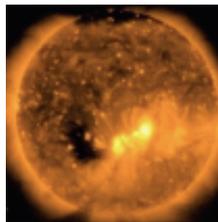
なぜそうなのか？ 一部は格子QCDで理解できるはず。





宇宙は単純ではない (例2)

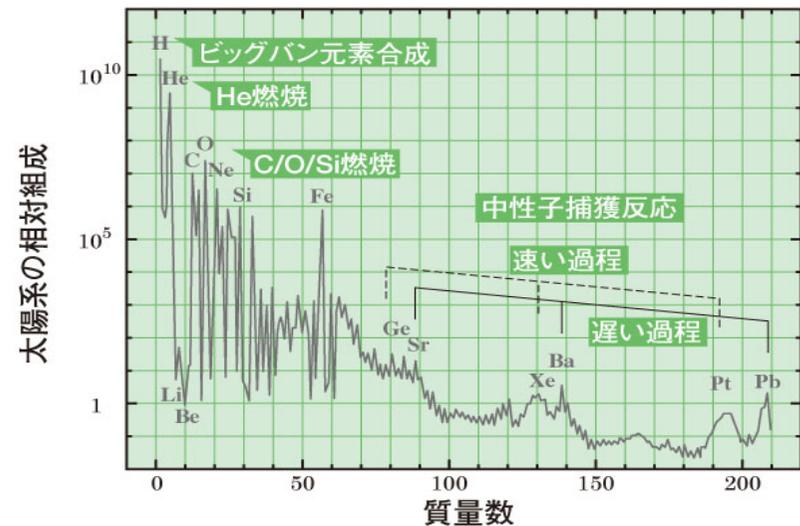
- ▶ 元素はどこでできたか？
 - ▶ すべてはビッグバンで始まった。
 - ▶ でもそれだけでは様々な元素(つまり原子核)があることは理解できない。
 - ▶ その後に起こったこと...



- ▶ 私たちは星の燃えかす
 - ▶ 元素の起源を知るには宇宙の始まり、星の燃焼・爆発の様子を知る必要がある。

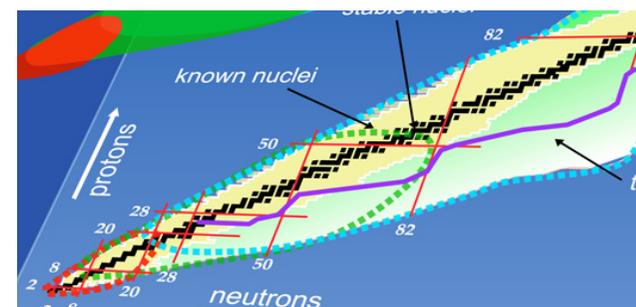
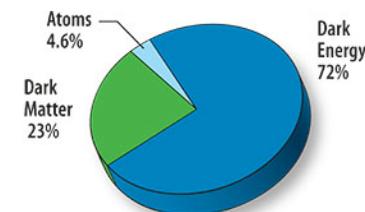
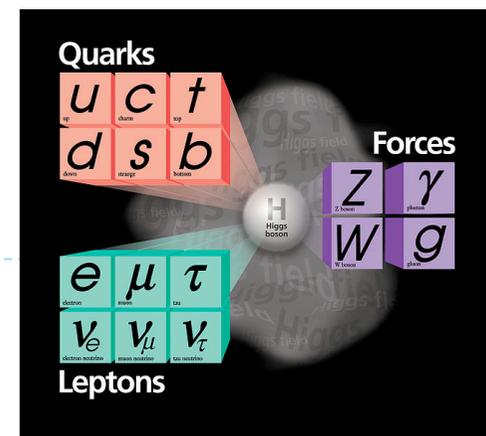
元素の周期表

	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8	1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0		
1	H															He		
2	Li	Be									B	C	N	O	F	Ne		
3	Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	L	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	A															
	L	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
	A	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		



答えるべき疑問(の一部)

- ▶ 究極の理論へ向けて
 - ▶ なぜ素粒子は3世代あるのか？
 - ▶ 暗黒物質、暗黒エネルギーとは何か？
 - ▶ なぜ反粒子は消えたのか？
- ▶ 物質の多様性
 - ▶ 元素はどうやってできたのか？
 - ▶ 原子核反応を制御することは可能か？
- ▶ 宇宙で起こっていること
 - ▶ 星の中では何が起きているのか？
 - ▶ 天体高エネルギー現象(ガンマ線バーストなど)は理解できるか？





シミュレーションの役割

- ▶ 基礎となる物理法則に基づいて現象を理解する

素粒子標準模型

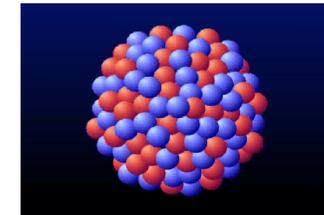


実験



Belle @ KEK

- ▶ 基礎理論に関する情報を読み取る
- ▶ あまりに複雑な系を何とかして理解する
 - ▶ 解析的に手におえるのは2体問題まで



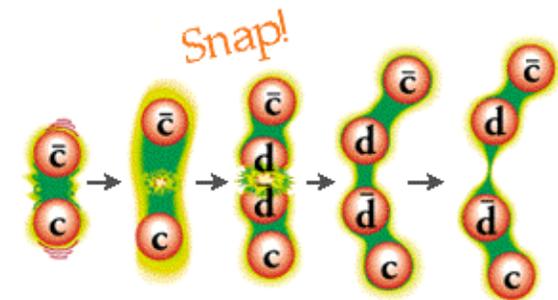
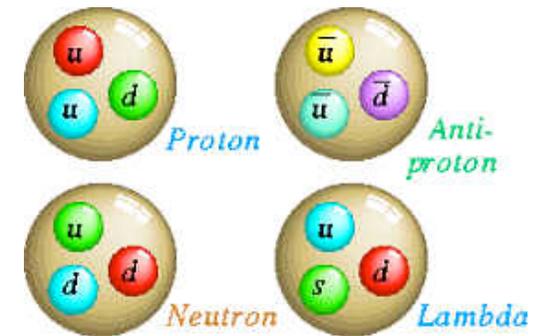
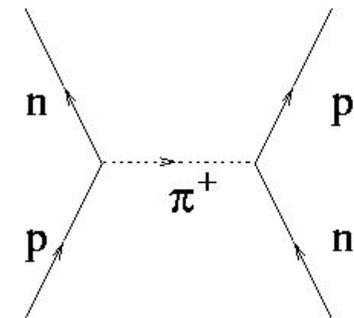
- ▶ 実験では手に届かない現象を調べる
 - ▶ 星の中心部、超新星爆発...
 - ▶ ビッグバン！





例として：強い力の理論

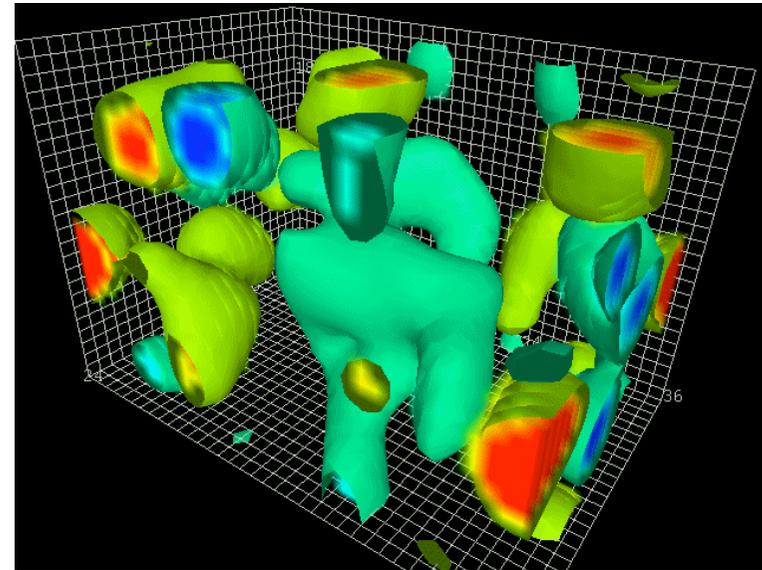
- ▶ 素粒子標準理論のなかで、理論的に最も難しい部分＝強い力（核力）
 - ▶ 湯川秀樹による発見：パイ中間子の交換による相互作用。
 - ▶ その後、多くの新粒子発見。複雑なダイナミクスを示唆。混乱の50～60年代。
- ▶ 量子色力学(QCD)
 - ▶ 70年代になって、下部構造が見つかった(＝クォーク)
 - ▶ 「色」の自由度をもつクォーク
 - ▶ 漸近自由性(低エネルギーで非摂動的)
 - ▶ クォークのとじこめ





低エネルギーでのQCDはややこしい…

- ▶ 真空がこんな様子だから。
 - ▶ 単純な“波”ではない。完全にランダムなわけでもない。
 - ▶ この中をハドロン(陽子・中性子、中間子など)が泳いでいる。何が起こるのか？
- ▶ 格子QCDが唯一の定量的な計算手法
 - ▶ 数値計算が可能。大規模でお金もかかるけど…。



Derek Leinweber



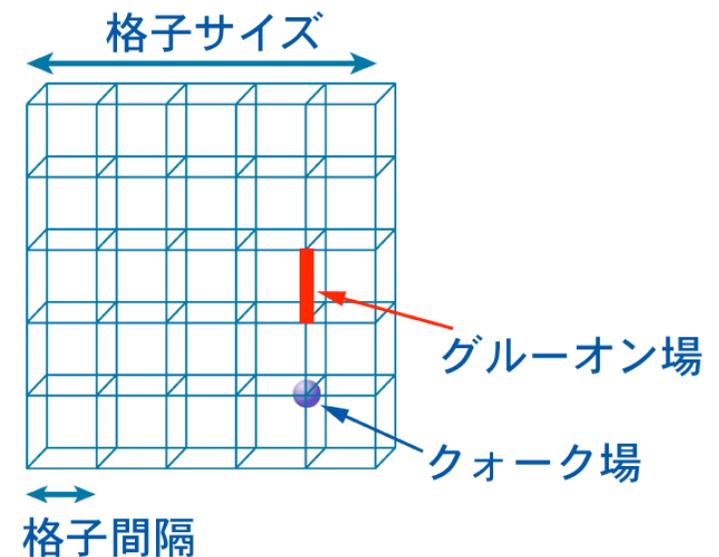


格子QCDとは …

- ▶ 場の量子論
 - ▶ 時空のすべての点に自由度が置かれている。
 - ▶ 紫外発散を正則化する必要がある。

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \frac{1}{4} G_{\mu\nu}^a G_{\mu\nu}^a + \sum_f \bar{\psi}^f (\mathcal{D} + m) \psi^f$$

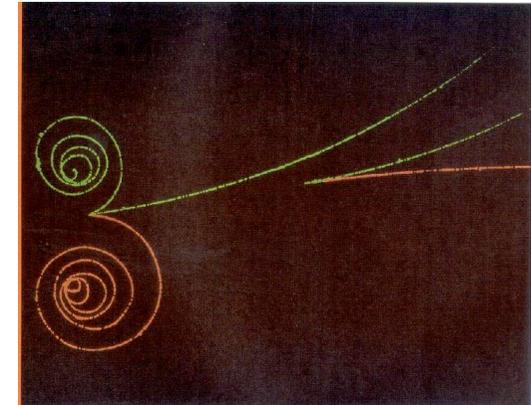
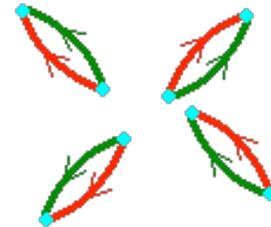
- ▶ 格子QCD = QCDを格子正則化したもの
Wilson (1974)
 - ▶ 格子点上に「場」の自由度
 - ▶ 連続理論は格子間隔 a をゼロにする極限に相当する。





クォークの対生成・対消滅

- ▶ 場の量子論では避けられない。
 - ▶ 素粒子では真空中から(物性ではフェルミ面近傍で)。
 - ▶ 大規模行列の行列式。



- ▶ どうやって計算するか？
 - ▶ フェルミオンをボソンで書き換える

$$\begin{aligned} Z &= \int [dU] \det(D[U])^2 e^{-S_g} \\ &= \int [dU][d\phi] \exp\left[-S_g - \phi^\dagger D[U]^{-2} \phi\right] \end{aligned}$$

- ▶ 逆行列の問題にすりかえ。

- 格子QCD計算では、逆行列の計算がもっとも“重い”部分。
- 行列要素の計算に格子点間の相互作用が反映。





逆行列

▶ 線形代数で一般的な問題

▶ QCDでは、大きさ $[3 \times 4 \times V]^2$ の複素疎行列。

▶ $\sim [200 M]^2$ (for $V=64^4$).

▶ 行列をかけるたびに、最近接格子点との情報やりとり。

▶ e.g. Wilson fermion

$$D_W[U]_{x,y} \equiv \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \left[(1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{y, x+\hat{\mu}} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x) \delta_{y, x-\hat{\mu}} \right]$$

▶ 反復法を使う。

▶ CG, CR, GMRES, BiCG, ...

▶ 何らかの前処理: 偶奇、領域分割、デフレーション...

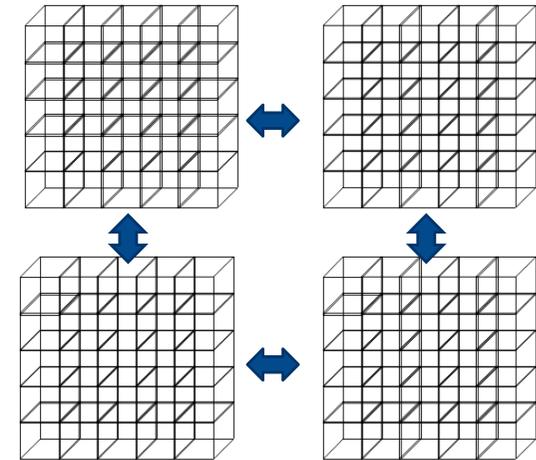
モデル自体は確立している。あとは大規模計算の問題





QCDのための計算機

- ▶ 再近接相互作用 = 基礎理論の性質
 - ▶ 並列化は比較的容易。自然にできる。
 - ▶ vector, SIMD, MIMD, massively parallel, ...
 - ▶ QCD計算のための並列計算機開発の歴史
 - ▶ Europe: APE (1988), APE100 (1993), APEmille (1999), apeNEXT (2005), QPACE (2009)
 - ▶ Japan: QCDPAX(1989), CP-PACS (1996), PACS-CS (2006)
 - ▶ US: Caltech (1980s), Columbia (1980s), GFII (1991), ACPMAPS (1995), QCDSF (1995), QCDOC (2002)





例

▶ CP-PACS (1994)

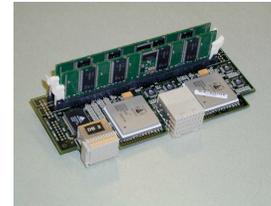
- ▶ 筑波大学



- ▶ QCDから始まった汎用機
- ▶ PA-RISC + 疑似ベクトル機構
- ▶ 2048 ノード、3次元ハイパークロスバー
- ▶ TOP500 リストで1位に
 - ▶ 614 Gflops, Nov 1996.

▶ QCDOC (2004)

- ▶ コロンビア大学



- ▶ QCD on a chip: PowerPC コア+通信を一つのチップに
- ▶ 10,000ノード、6次元トラス
- ▶ ~ 10 Tflops
- ▶ IBM Blue Gene/L はここから生まれた。





現在

▶ HPCでの主要アプリの一つ

QPACE (Regensburg)



T2K Tsukuba



Argonne BlueGene/P



Julich BlueGene/P



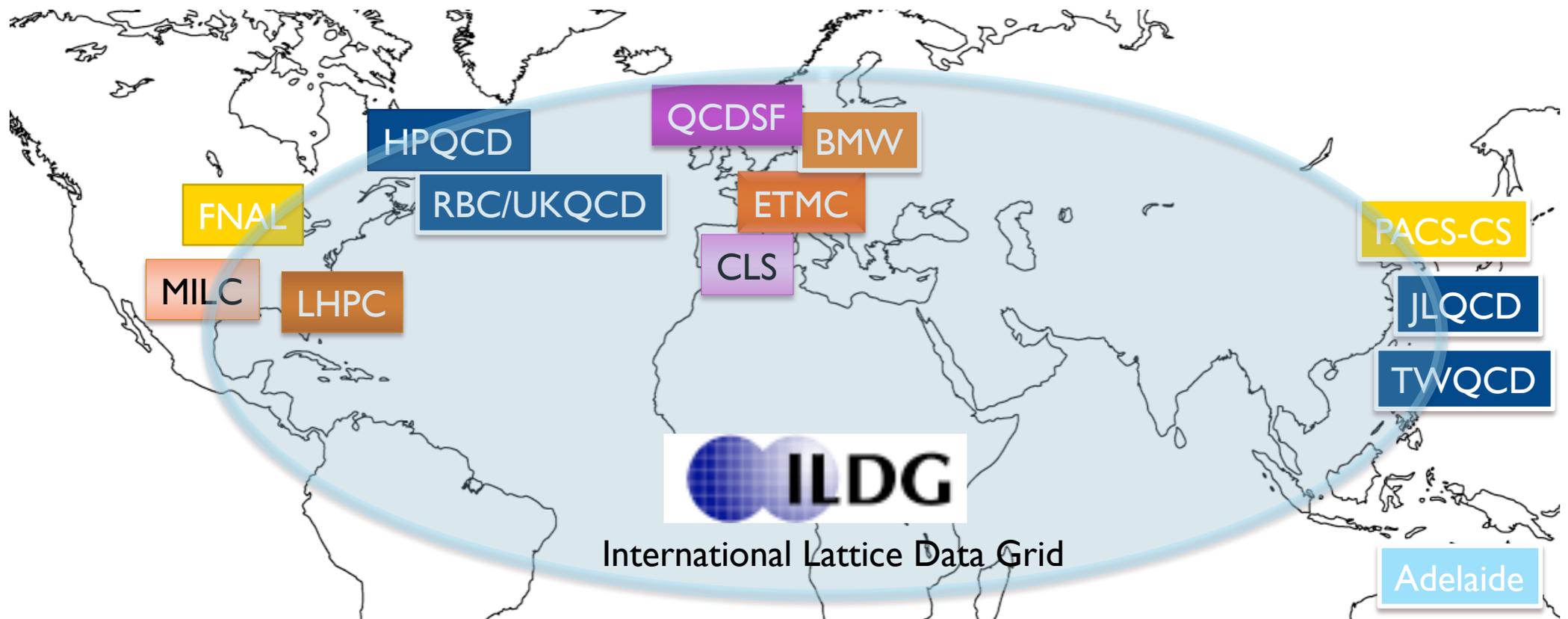
ORNL CRAY XT4





世界での競争

- ▶ それぞれに O(10) 人の研究グループ



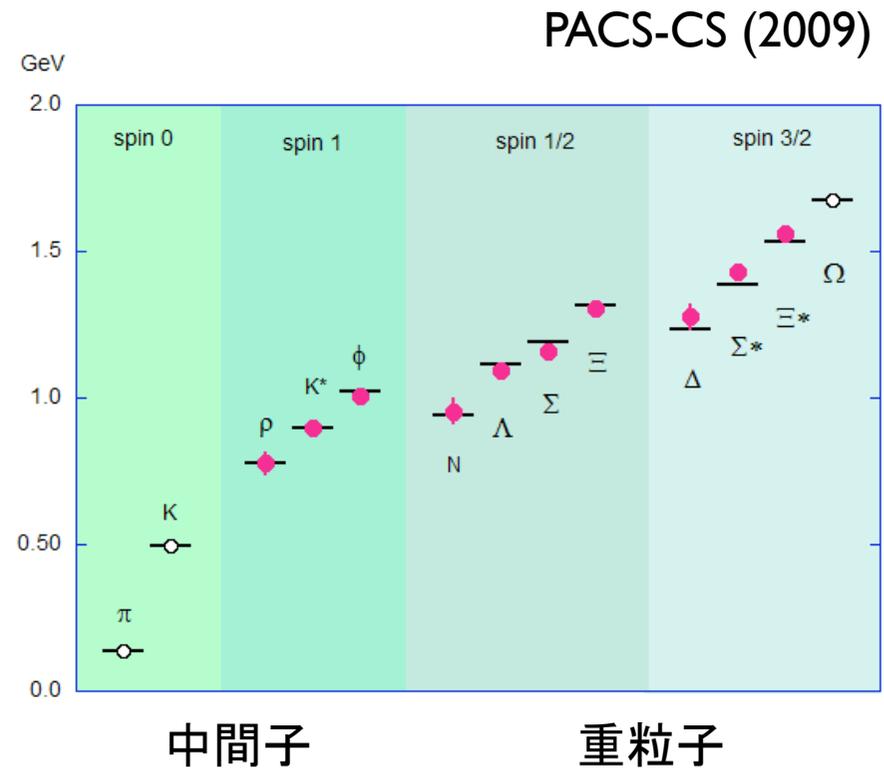


現状：手短に言うと…

- ▶ 30年以上の努力の結果、ようやくハドロン質量スペクトルを再現できるところまできた。
- ▶ 2+1 フレーバー(アップ、ダウン、ストレンジ・クォークを含む)シミュレーション



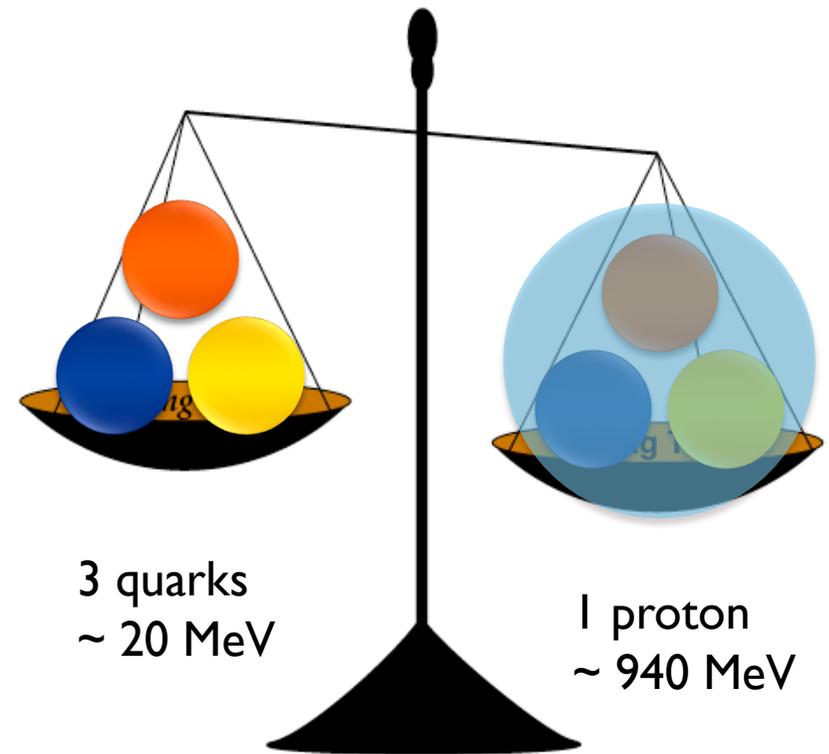
- ▶ “現実的な”QCD計算
 - ▶ QCDの理解
 - ▶ QCDからの予言





理解できること(の例)：質量の生成

- ▶ 素粒子の質量
 - ▶ クォークの質量 $\sim 5 \text{ MeV}$
 - ▶ 核子の質量 $\sim 940 \text{ MeV}$
- ▶ なぜそうなるのか？
 - ▶ 南部理論：真空中で、クォーク・反クォーク対の凝縮
 - ▶ 超伝導でのクーパー対に相当。フェルミ面付近の電子とホールに対応。
 - ▶ 自発的カイラル対称性の破れ：質量ギャップがあらわれる。



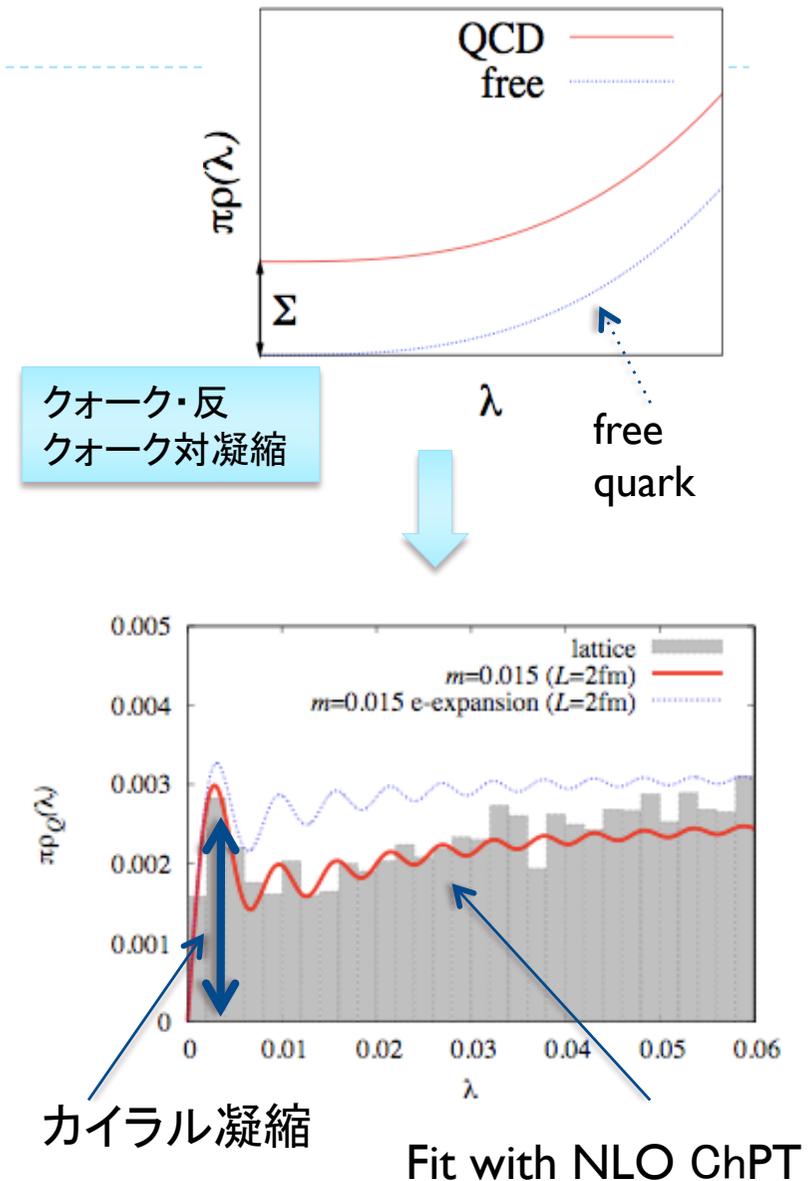
南部陽一郎





自発的対称性の破れ

- ▶ 格子QCDシミュレーション
 - ▶ ゲージ場の真空中でのクォークの固有モードスペクトル
 - ▶ 格子上でカイラル対称性を保つことが重要
- ▶ 最近の計算 JLQCD, PRL (2007, 2010)
 - ▶ オーバーラップ・フェルミオン
 - ▶ アップ、ダウン、ストレンジクォークを含む。
 - ▶ カイラル有効理論(1次補正まで含む)と一致
 - ▶ スケーリング(m, Q, V) をチェック





質量はどのように生まれるのか



講談社ブルーバックスから
4月21日発売。

素粒子物理入門から
自発的対称性の破れ、
格子QCDとスパコン、
ヒッグス粒子まで



2

学際融合の取り組み

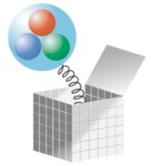


素粒子・原子核・天文学宇宙は学際か？

- ▶ 数十年前までは家族だった親戚同士(?)
 - ▶ 外から見るとほとんど同じに見える。
 - ▶ 物理だし(役に立たないし)
 - ▶ でも、実際には細分化が進む。研究手法を見ても...
 - ▶ 素粒子：場の量子論
 - ▶ 原子核：多体系の量子力学
 - ▶ 天文学宇宙：N体、流体、輻射、なんでもあり
 - ▶ それに応じて研究者のコミュニティ、マインドも分化。
- ▶ 実際の物理現象がそれですべて捉えきれないわけではない。

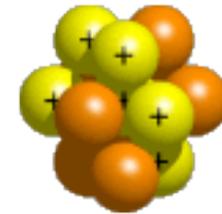
今日の標語： 物理はひとつだ！
対象や手法は異なるが、基本法則はすべてに共通。





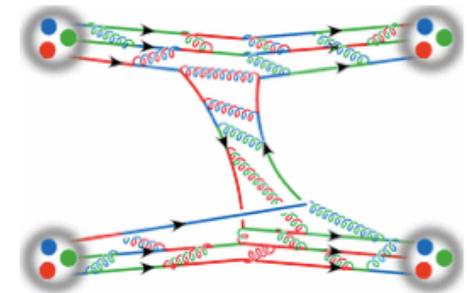
素粒子と原子核の境目

▶ 核力が陽子と中性子を結びつけて原子核を作る。

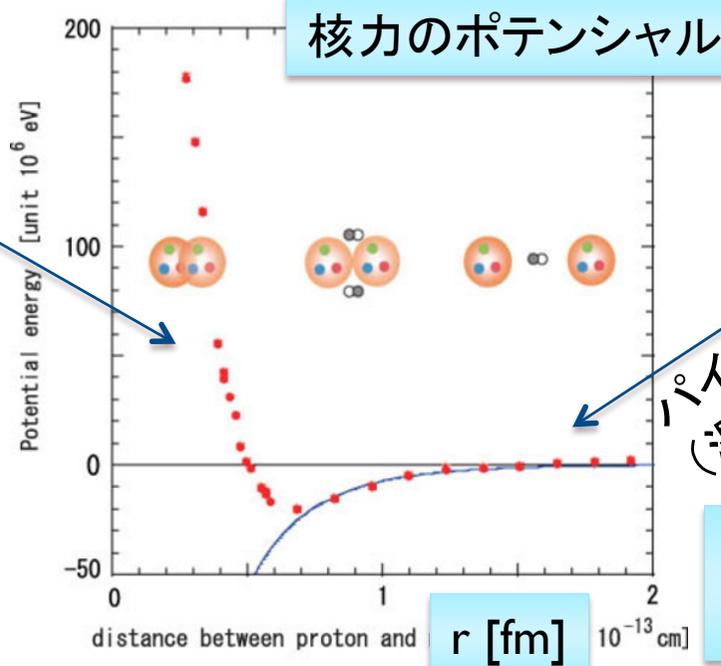
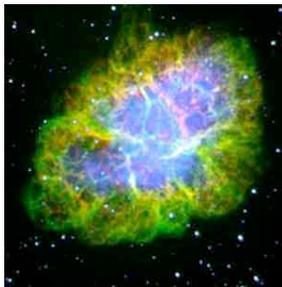


▶ 核力は単純なパイ中間子交換ではない。
ファン・デル・ワールスカのようなもの。

▶ 短距離には斥力芯



斥力芯:
中性子星がさらにつぶれないように支える。



パイ中間子交換
(湯川相互作用)

より基本的な相互作用をもとに理解できるか？

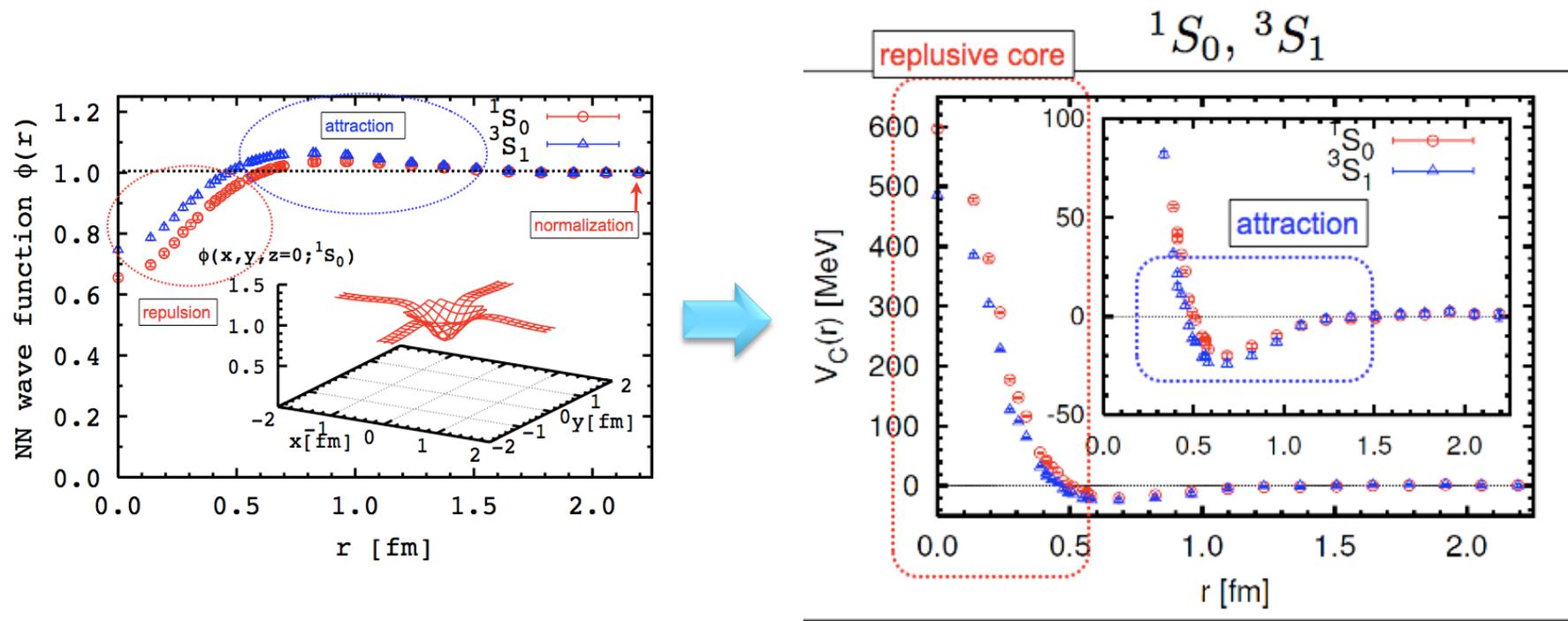




格子QCDから核力を導く

Aoki et al. (2007~)

- ▶ NN 波動関数を計算してポテンシャルに読み替える。



格子QCDが原子核の理解を変える

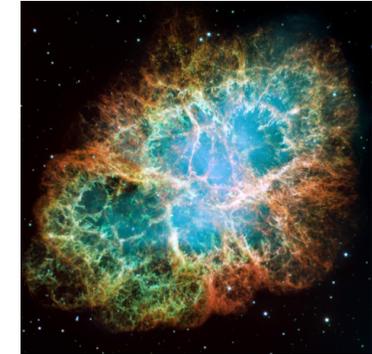
--- 現象論的相互作用から、基礎理論(QCD)に基づく計算へ



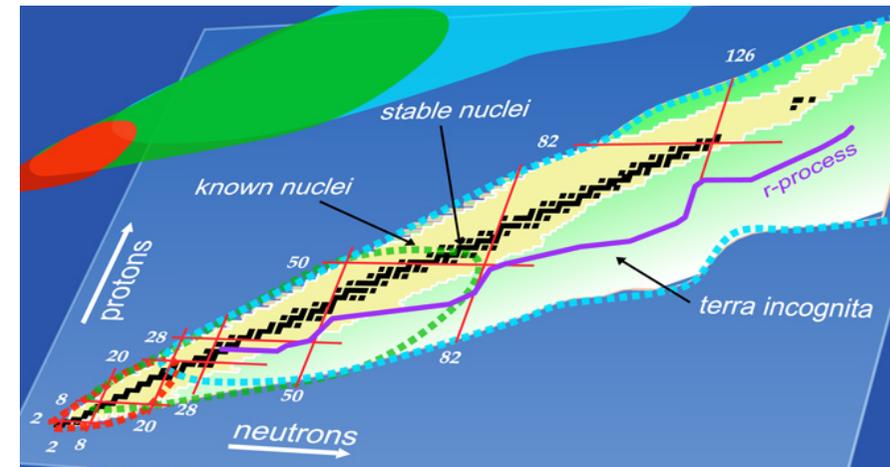


原子核と宇宙の境目

- ▶ 元素の生成は星の中で
 - ▶ ビッグバンの最中にできるのは軽い元素だけ。
 - ▶ 鉄までの元素は星の燃焼で生まれる。
 - ▶ それよりも重い元素は超新星爆発で
 - ▶ 大量に放出される中性子を吸って重い元素を生成。
 - ▶ 爆発で周囲にばらまかれる。



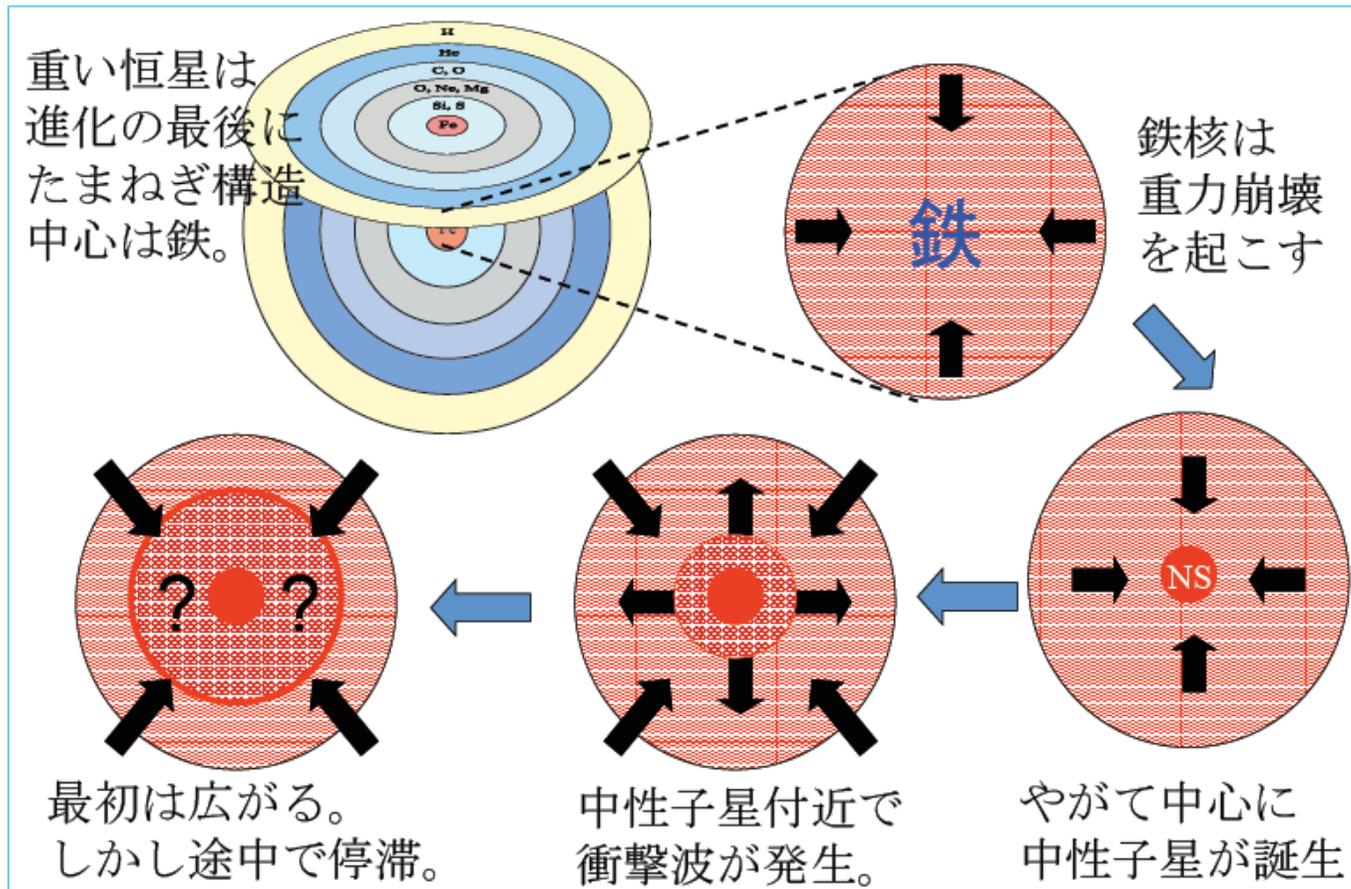
- ▶ 知るべき事
 - ▶ 原子核の反応率(原子核)
 - ▶ 超新星爆発の様子(宇宙)





超新星爆発・・・40年来の謎

重い星の末路



ニュートリノ輻射？
磁気流体？

ストーリーはあるが、シミュレーションをしても爆発しない。
つまり、まだ理解できていない。

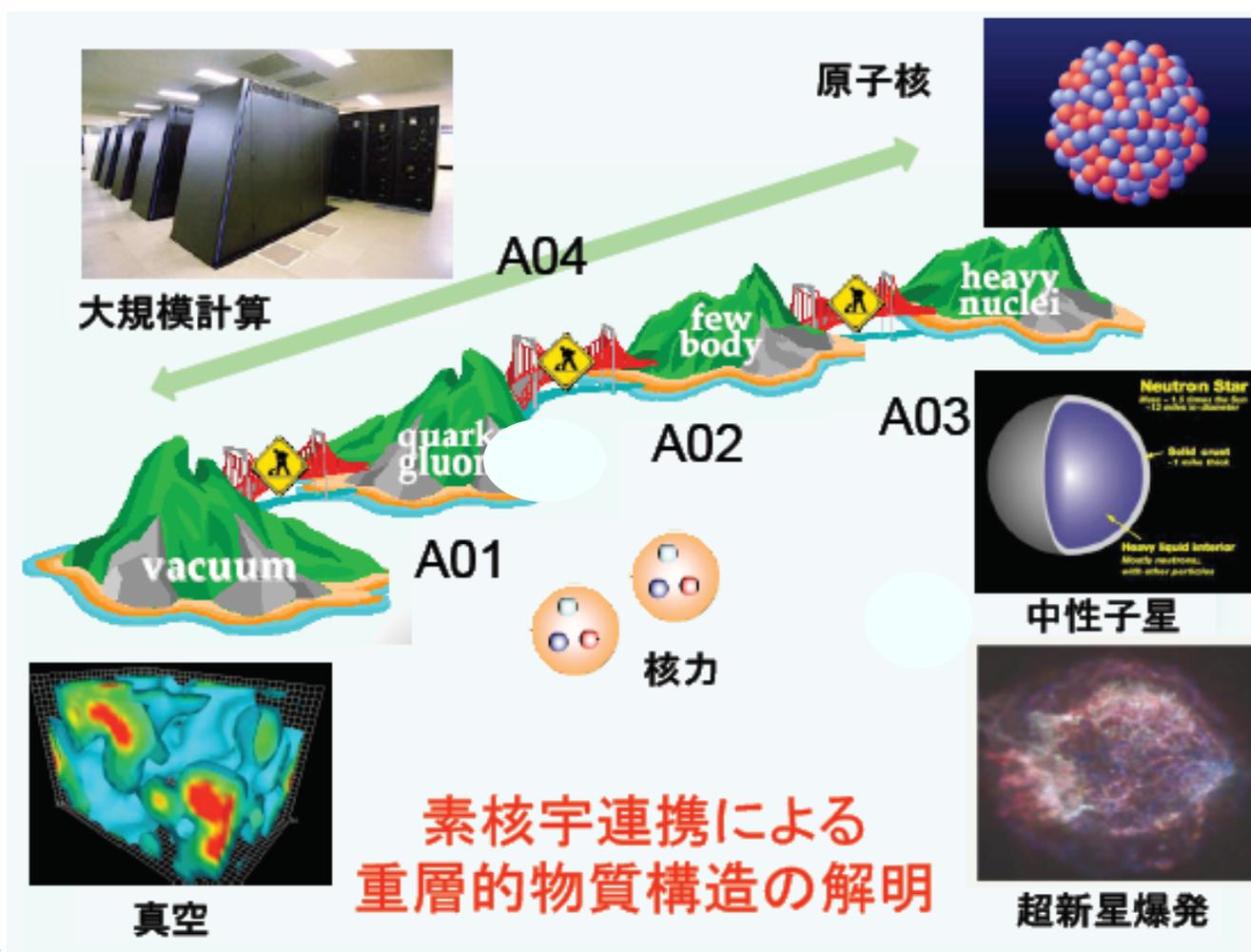




統一的に理解する取り組み

科研費・新学術領域研究(2008-2012)

代表: 青木慎也(筑波大)

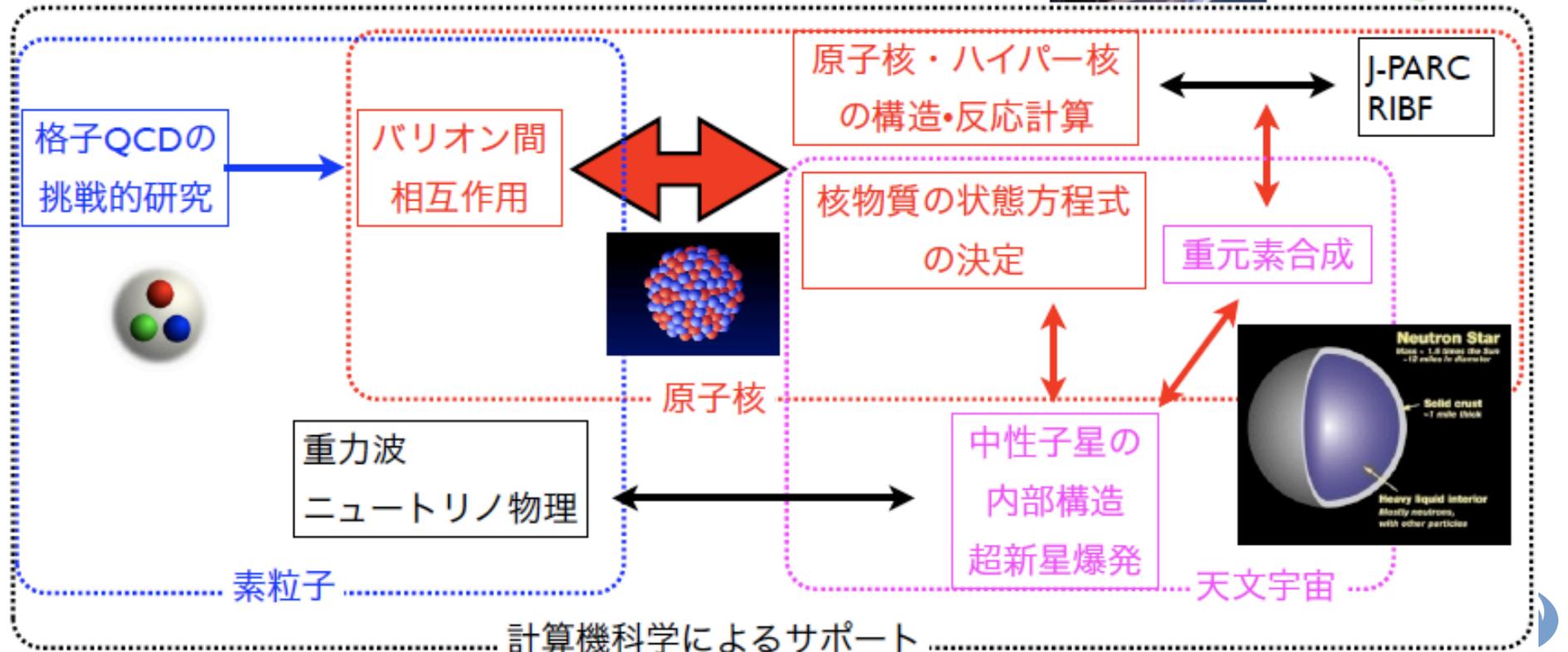
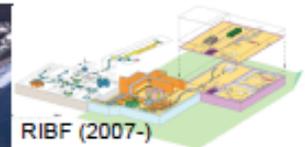




「計算」をキーワードに分野融合

「素核宇宙融合による計算基礎科学に基づいた重層的物質構造の解明」

「様々な階層での物質の性質・構造・起源を、クォークから元素合成までという流れの中で、異なった専門分野の研究者が計算科学という新しい手法を基盤に、共同で解明して行く」という新しい研究領域の構築を目指す





さらに大きな枠組みへ

▶ 次世代スパコン戦略機関

「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」
実施可能性調査(FS)実施機関

2010.1.22.決定

次世代スパコン（ピーク性能10テラフロップス）の計算資源を必要とし、かつ、社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待出来る分野（戦略分野）ごとに次世代スパコンを用いた研究開発及び我が国の計算科学技術体制の整備を行なう「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」の中心となって事業を進める戦略機関の活動に関するFSを行なう機関

分野	実施機関／統括責任者
(分野1) 予測する生命科学・医療および創薬基盤	独立行政法人 理化学研究所 柳田 敏雄（特任顧問）
(分野2) 新物質・エネルギー創成	国立大学法人 東京大学物性研究所 常行 真司（教授）
(分野3) 防災・減災に資する地球変動予測	独立行政法人 海洋研究開発機構 今脇 資郎（理事）
(分野4) 次世代ものづくり	国立大学法人 東京大学生産技術研究所 加藤 千幸（教授）
(分野5) 物質と宇宙の起源と構造	国立大学法人 筑波大学計算科学研究センター 青木 慎也（教授）



分野5の戦略目標

ビッグバンに始まる宇宙の歴史において、ミクロの素粒子から元素合成、そしてマクロの星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を統一的に理解する。

研究開発課題

物理学の基本法則に基づいて、素粒子・原子核から星・銀河に及ぶ幅広いスケールのシミュレーションを実行し、宇宙が現在の姿をもつに至った歴史を各エポックで定量的に理解する。

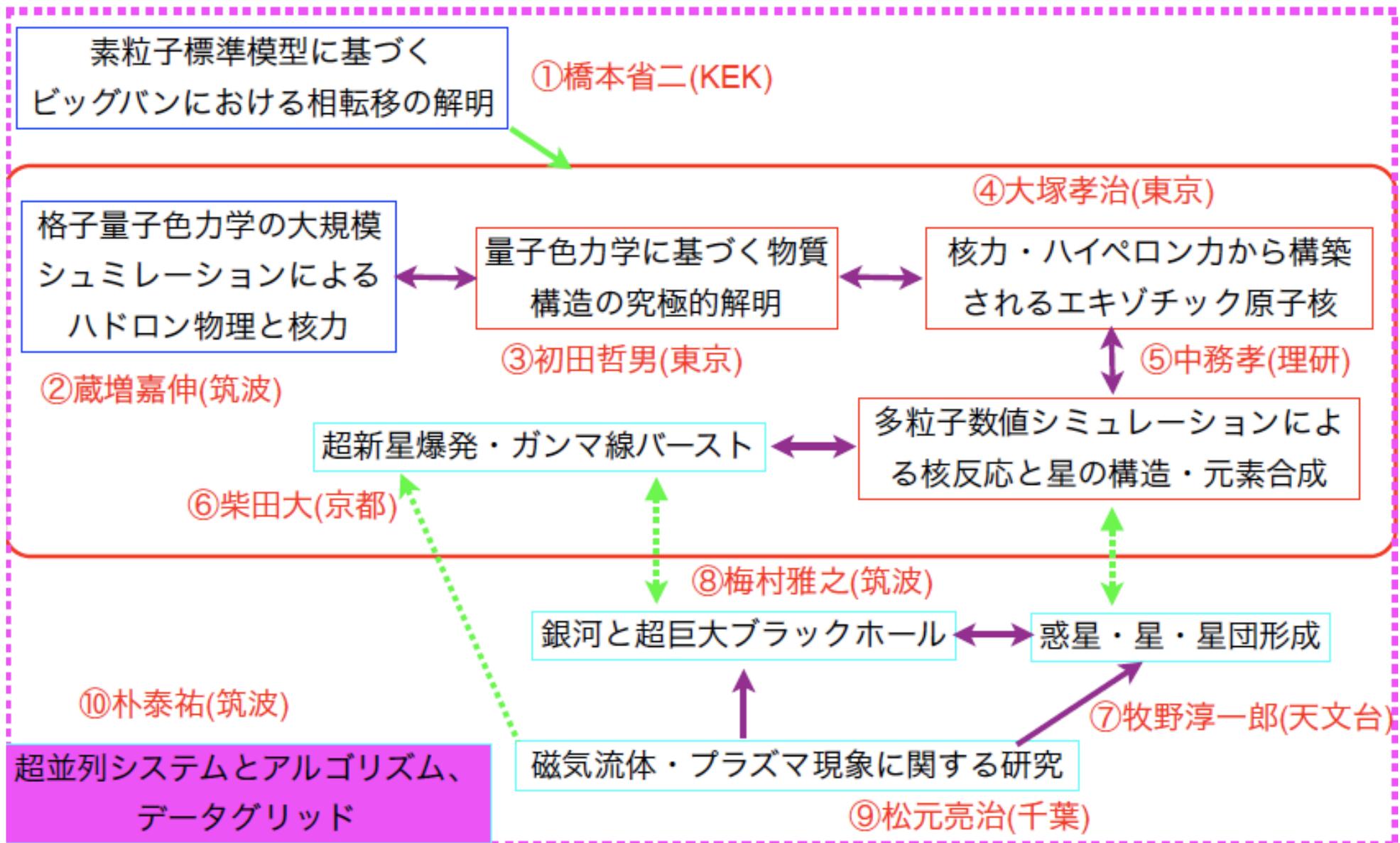
- ①素粒子標準モデルによる宇宙初期進化過程の定量的理解
- ②量子色力学に基づく原子核構造の理解
- ③超新星爆発・ガンマ線バーストと元素合成
- ④惑星から銀河までの構造形成
- ⑤磁気流体やプラズマ現象のシミュレーション など

計算科学技術推進体制構築

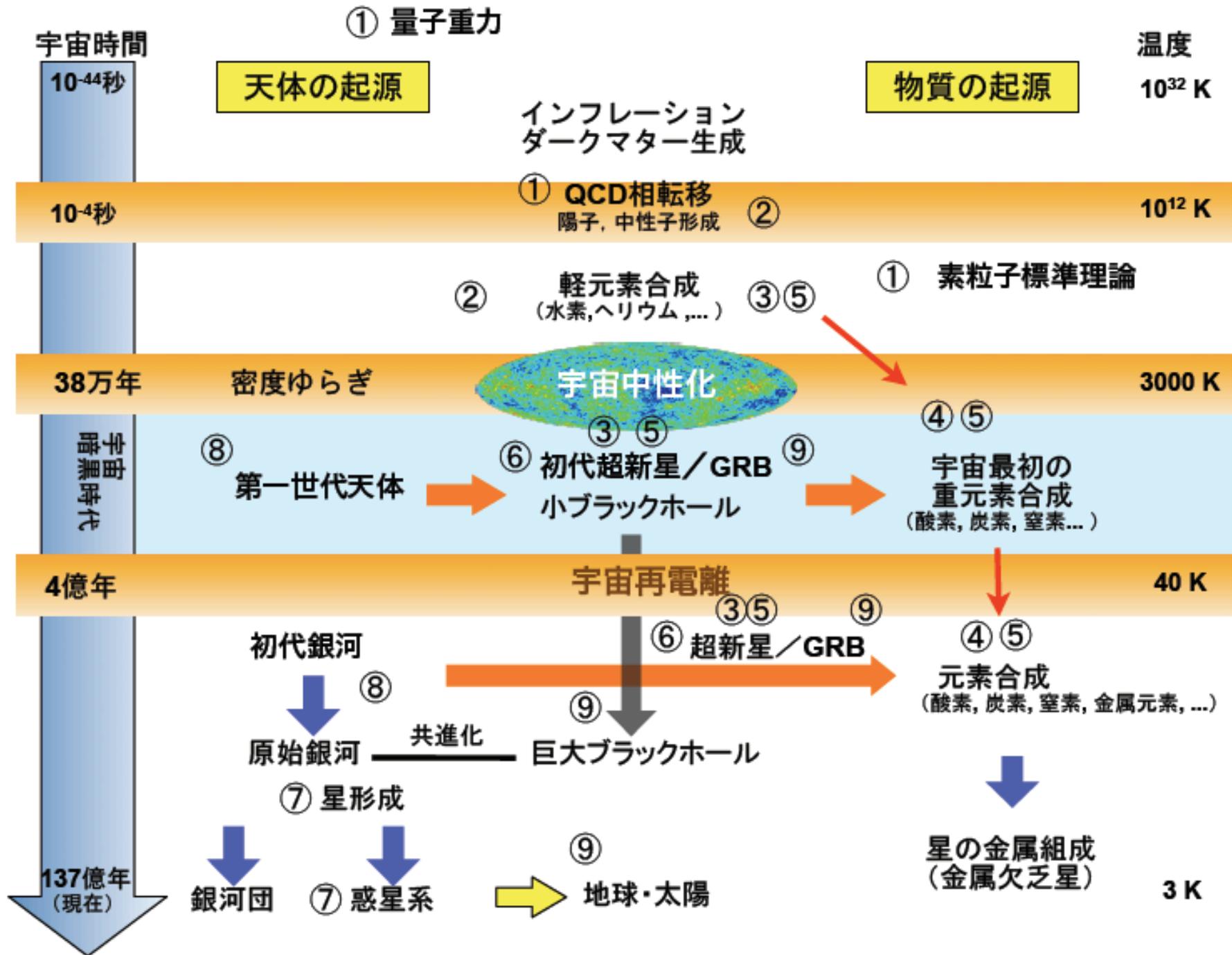
計算基礎科学における大規模計算や計算機の研究開発課題に実績のある、筑波大学計算科学研究センター、高エネルギー加速器研究機構、国立天文台で組織した**計算基礎科学連携拠点**が戦略機関として中心となり、他の機関と連携・協力して、拠点内の計算機資源の効率的な利用、人材育成、研究ネットワークの構築、分野を超えた連携などを進め、戦略目標達成のための体制を構築する。

研究開発実施体制

統括責任者の下に複数の研究開発課題責任者を置き、それぞれに必要な研究人員を重点配置する。それぞれの研究について、さらに全国の研究者が研究担当者として参加する。



宇宙誕生から現在まで / 素粒子から宇宙まで



3 (まとめにかえて)

ポスト・ペタスケールへ向けて



その先へ

- ▶ 素粒子は小さい。宇宙は広い。
 - ▶ わからないことは、まだいくらでもある。
- ▶ ペタの時代はもうすぐ。エクサへの道筋は？
 - ▶ ムーアの法則に期待して待っているだけなら研究者は不要。
 - ▶ $O(1000億)$ を超えるプロジェクトは不可能。
- ▶ 一歩先へ踏み出すためには、何かを捨てないと。例えば、
 - ▶ 汎用性：GRAPEの成功に学べ。汎用機のコストと電力の多くは、ほとんど使われない回路のために費やされているのではないか。
F1に助手席は必要か？ カーナビは必要か？ スペアタイヤは必要か？
 - ▶ メモリ：strong scaling を目指すならメモリはいらなくなる。バンド幅とかキャッシュとかも気にしなくてよい。I/Oも。



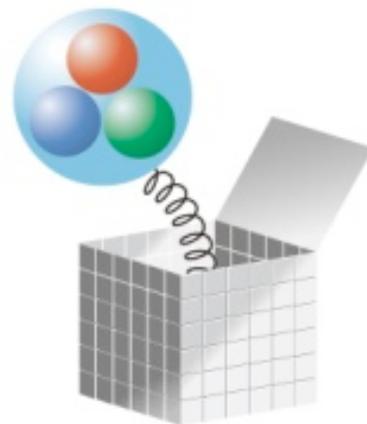


計算科学研究センターへの期待

- ▶ 計算と科学に革新を
 - ▶ 計算と(様々な分野の)科学が同居する環境を作りだした。そこから何が生まれるのかに注目。
 - ▶ 計算を軸にして異なる科学をつなぎ合わせる役割に期待。
 - ▶ 素粒子・原子核・天文宇宙はその一例
 - ▶ 物質科学や生命科学も...

- ▶ 魅力的なプロジェクトを
 - ▶ 明確な目標を定めたプロジェクトによって、エクサに向けた推進役に。





ご静聴ありがとうございました。