



# PACS-CSにおける素粒子物理学研究

筑波大学 計算科学研究センター  
理化学研究所 計算科学研究機構

藏増 嘉伸



## 内容

- §0. 共同研究体制
- §1. 格子QCDとは
- §2. PACS-CSを用いた研究成果
  - クラスタマシンに対応したアルゴリズム改良
  - 物理点計算
- §3. 現在と今後の課題
- §4. まとめ



## メンバー一覧

筑波大 : 青木慎也, 石塚成人, 宇川彰, 金谷和至,  
藏増嘉伸, 谷口裕介, 吉江友照,  
浮田尚哉, 滑川裕介, Nguyen Oanh Hoanh,  
山崎剛(→名大), 加堂大輔(→理研・和光),  
中村宜文(→理研・AICS)

広島大 : 大川正典, 石川健一

BNL : 出淵卓



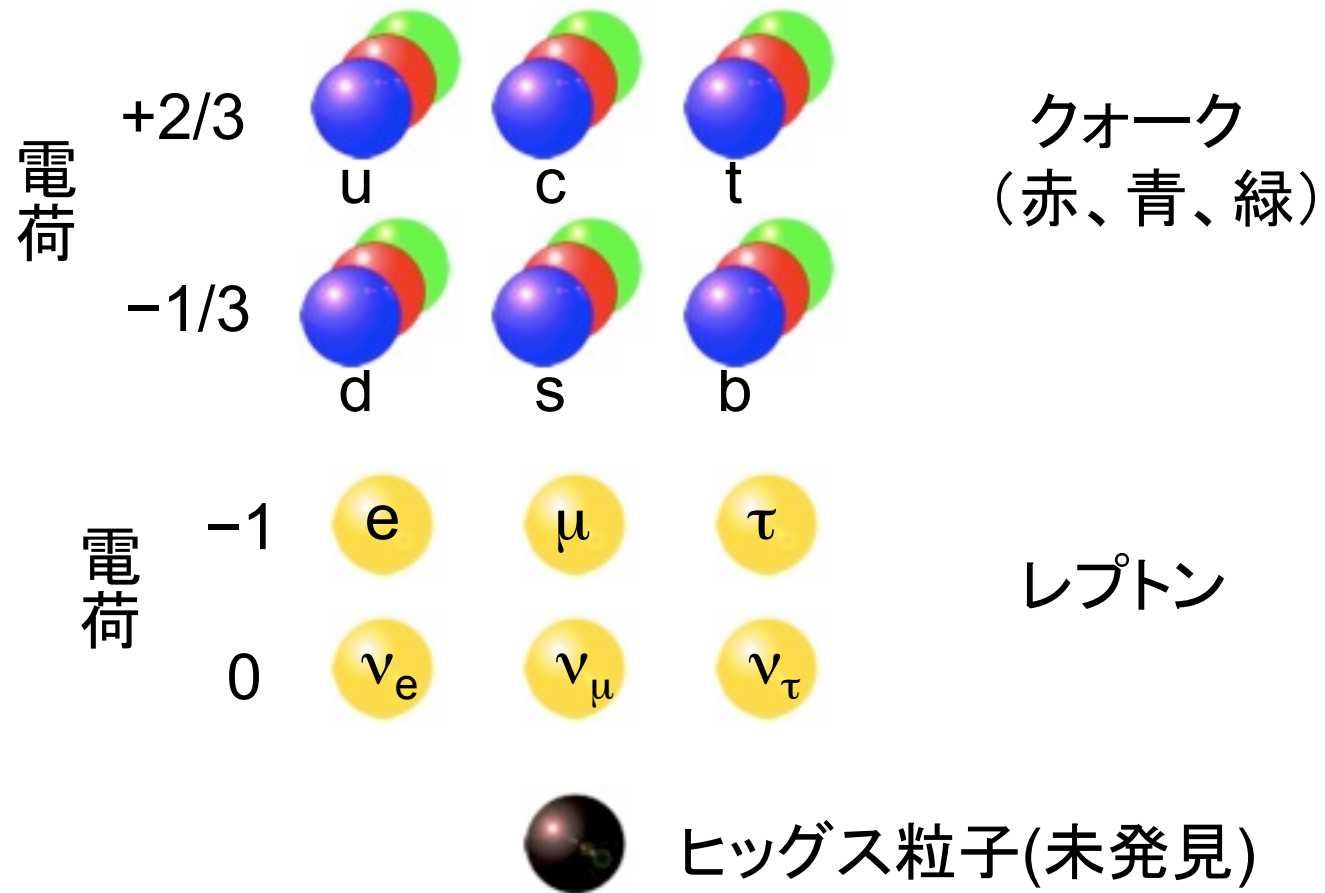
# 素粒子物理学とは？

## 人類の有史以来の素朴な疑問

- 物質の最小構成単位(素粒子)は何か？
- 最も基本的な相互作用は何か？



# 現在まで知られている素粒子





## 自然界の4つの相互作用

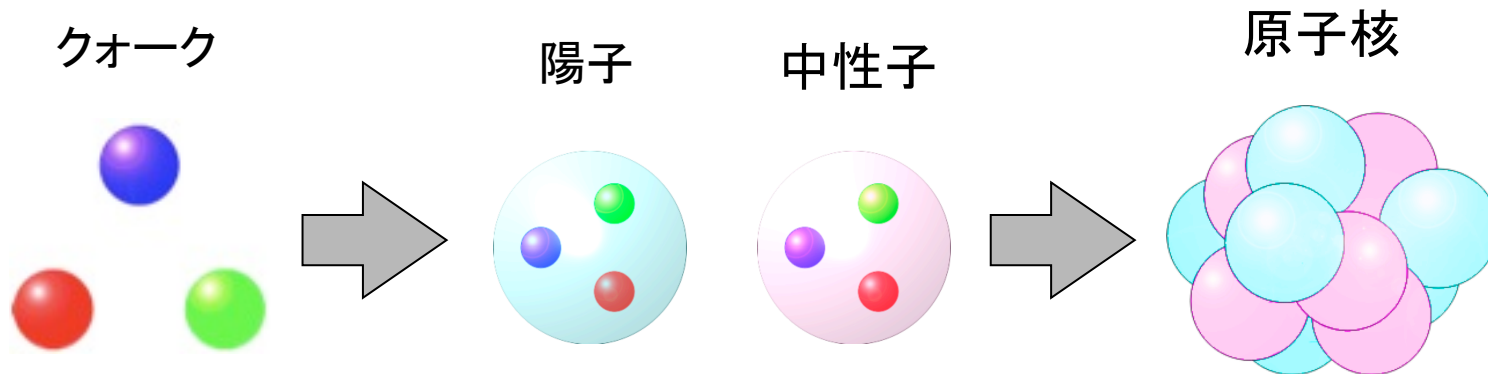
力の種類	大きさ(相対)	媒介粒子	理論
強い力	1	グルーオン	QCD(量子色力学)
電磁気力	0.01	光子	QED(量子電磁力学)
弱い力	0.00001	弱ボソン	Weinberg-Salam
重力	$10^{-40}$	重力子	超弦理論(?)

強い相互作用とは？

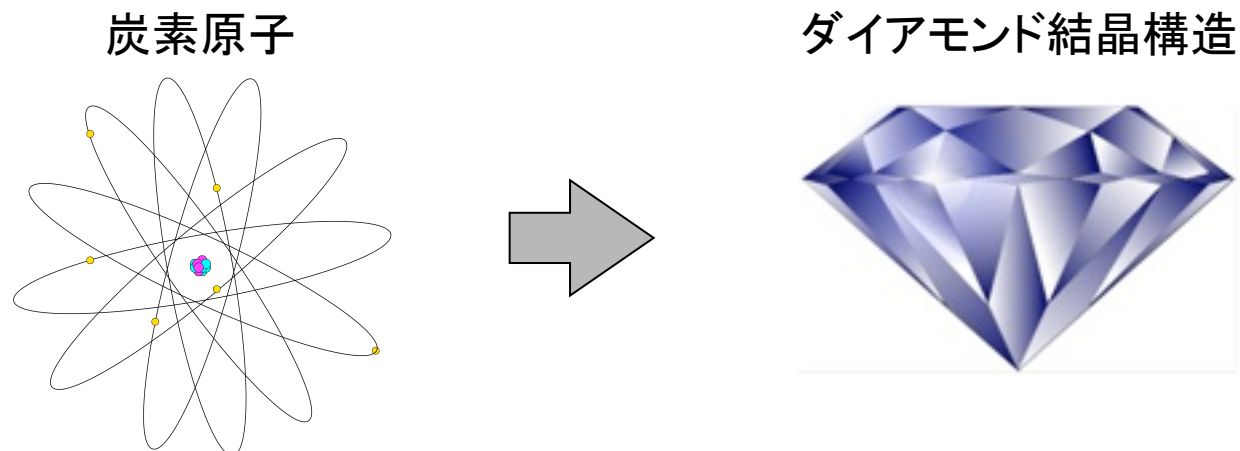


# 強い相互作用

クォークを基本自由度とする階層構造



電磁気力による化学結合

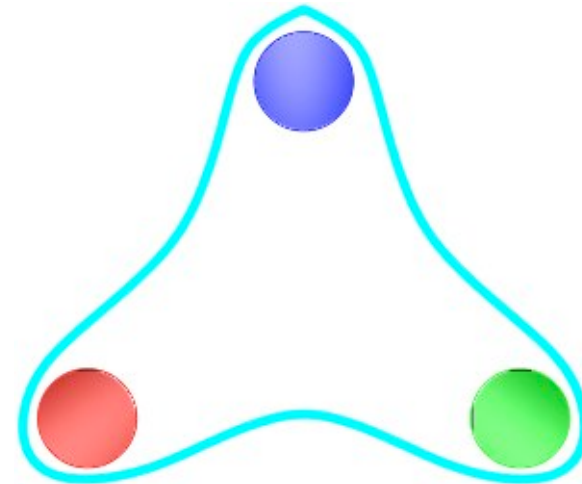
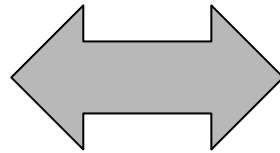




# 強い力の不思議な性質



近距離  
相互作用弱まる  
漸近自由性



遠距離  
強い引力  
クォークの閉じ込め

バネのような力

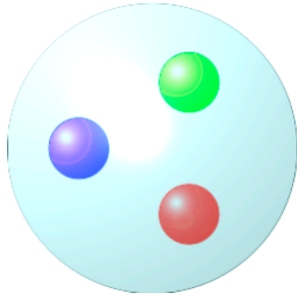




# 多種多様なハドロン

## ハドロン

### バリオン



p(陽子)、n(中性子)、  
 $\Delta$ 、 $\Lambda$ 、 $\Sigma$ 、 $\Sigma^*$ 、 $\Xi$ 、 $\Xi^*$ 、 $\Omega$ 、 $\Lambda_c$ 、 $\Xi_c$ 、 $\Lambda_c$ 、...

### メソン



$\pi$ 、K、 $K^*$ 、 $\rho$ 、 $\omega$ 、 $\eta$ 、 $\phi$ 、a、b、f、D、B、...



## 格子QCD研究の目的

QCD Lagrangian

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \sum_{q=u,d,s,c,b,t} \bar{q} [\gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - ig A_{\mu}) + m_q] q$$

結合定数 $g$ とクォーク質量 $m_q$ はパラメータ

なぜ数値計算が必要か？

強い相互作用の特徴は非摂動性(漸近自由性と閉じ込め)

力の強さが大きく摂動計算では本質がわからない

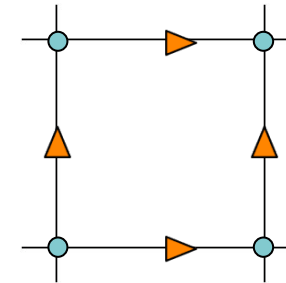
クォーク・グルーオンを自由度とした第一原理(QCD Lagrangian)計算によって  
 $10^{-15}\text{m}$ の世界の物質構造・相互作用を定量的に調べる



# 数値計算手法

空間3次元＋時間1次元を離散化(4次元格子)し、モンテカルロ法を用いて経路積分を実行

$$\langle \mathcal{O}[A_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}q \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{O}[A_\mu, q, \bar{q}] \exp \left\{ - \int d^4x \mathcal{L}[A_\mu, q, \bar{q}] \right\}$$



●クォーク ▲グルーオン

物理演算子の期待値は配位に関する平均

$$\langle \mathcal{O}[A_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}[A_\mu^{(i)}, q^{(i)}, \bar{q}^{(i)}] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

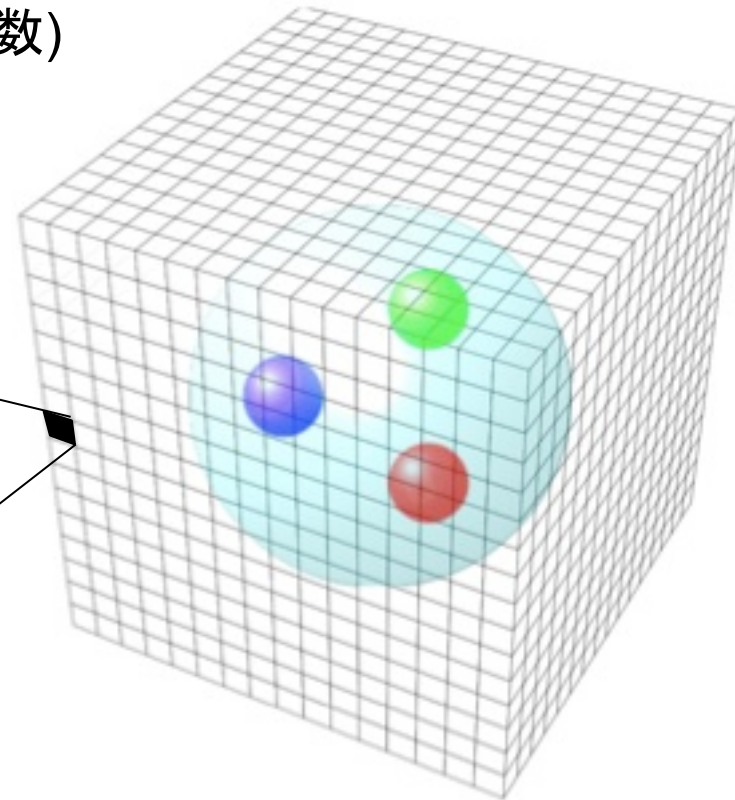
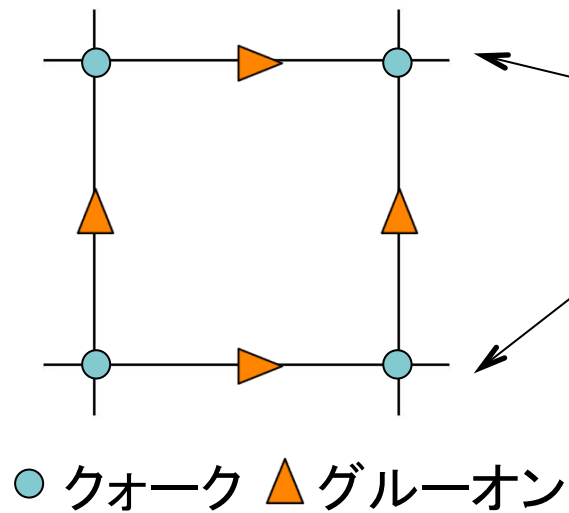
統計誤差



# 物理的パラメータ

## 数少ないパラメータ

- 4次元体積:  $V = N_X \cdot N_Y \cdot N_Z \cdot N_T$
- 格子間隔:  $a$  (結合定数  $g$  の関数)
- クォーク質量:  $m_u, m_d, m_s, \dots$



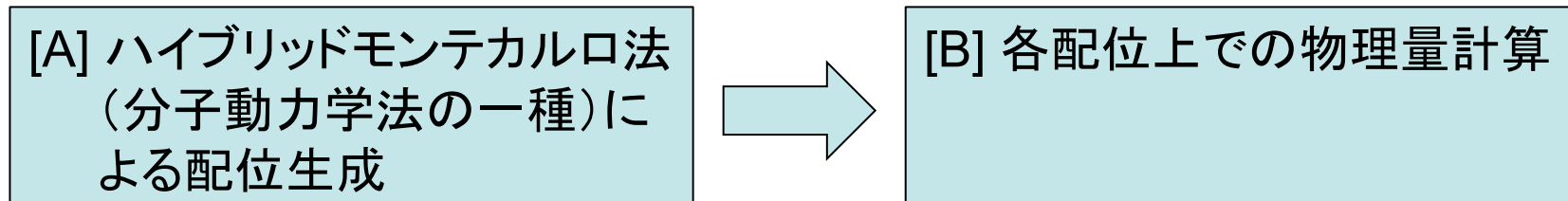


## 格子QCDにおける系統誤差

- 有限体積効果  
⇒ 体積  $V=N_X \cdot N_Y \cdot N_Z \cdot N_T$  を大きくする
- 有限格子間隔効果  
⇒ 格子間隔  $a$  を小さくする
- クエンチ近似 (真空偏極効果無視)  
⇒ 2+1 ( $m_u=m_d \neq m_s$ ) フレーバーシミュレーション  
CP-PACS/JLQCD プロジェクト 00~05
- クォーク質量に関する外挿  
⇒ 現実世界におけるクォーク質量 (物理点) でのシミュレーション  
PACS-CS プロジェクト 06~



## アルゴリズム的特徴



計算コストの主要部分 ([A]約80%, [B]ほぼ100%)

大規模疎行列に対する線形方程式を倍精度で“ひたすら”解く

$$Dx=b$$

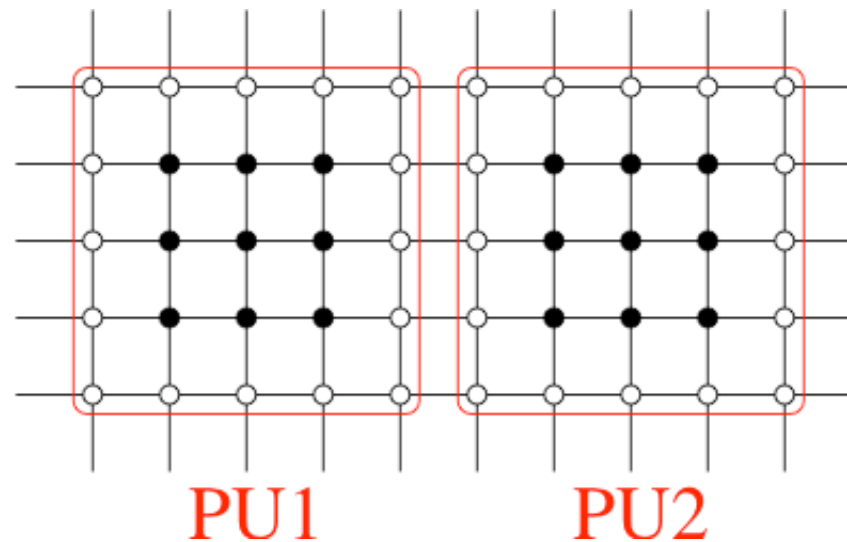
Dは $12 \cdot V$  ( $\sim 10^9$ )次元の複素非エルミート正方行列

各行には51個の非ゼロ要素しかない



# 並列化

- 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
- 近接相互作用  $\Rightarrow$  境界値の隣接通信
- 行列・ベクトル積Dx一回毎にCPU間通信が必要  
但し、通信の必要ない前処理を工夫することは可能





# クラスタマシンに対するアルゴリズム的課題

クラスタマシンの特徴:

演算性能に対するメモリバンド幅・通信性能の貧弱性

アルゴリズム的課題

- 並列化そのものは問題ではない
- 行列・ベクトル積Dxの要求B/F値は約2.1 >> 1.14(PACS-CS)
- 通信頻度を抑制したアルゴリズムの必要性





# 精度混合演算

## 単精度演算の利点

- メモリ・通信バンド幅
- キャッシュサイズの有効利用

⇒ 倍精度解を保証しつつ単精度演算を最大限活用したい

deficit correction

- 1:  $x$ :initial guess (64bit)
- 2:  $r = b - Dx$  (64bit)
- 3: convert  $r_{32} := r$  (64bit  $\rightarrow$  32bit)
- 4: solve  $\delta x_{32} = D^{-1}r_{32}$  (32bit)
- 5: convert  $\delta x := \delta x_{32}$  (32bit  $\rightarrow$  64bit)
- 6:  $r = r - D\delta x$  (64bit)
- 7:  $x = x + \delta x$  (64bit)
- 8: if  $|r|$  is small end else goto 3

前処理  $\delta x = Mr$

the relation  $r = b - Dx$  is kept in 64bit

計算時間の殆どは単精度計算に費やされる

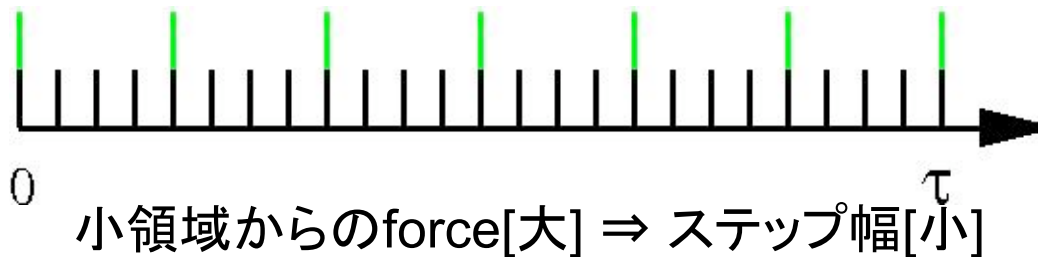


# 領域分割による通信抑制

## 領域分割ハイブリッドモンテカルロ法(DDHMC)

- 4次元格子を小領域に分割
- 階層性を持つ分子動力学法
- Multiple time step MD integrator

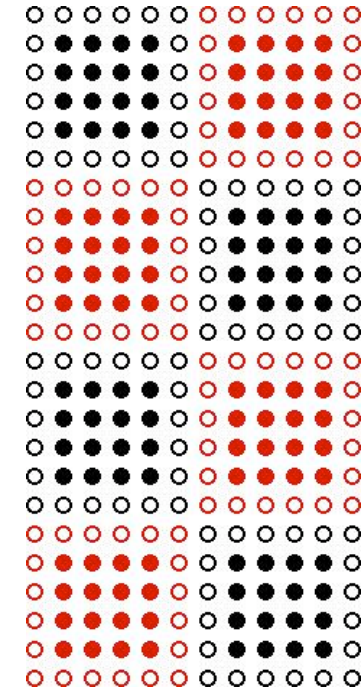
格子全体からのforce[小]  $\Rightarrow$  ステップ幅[大]



小領域 : CPU内  $\Rightarrow$  通信無

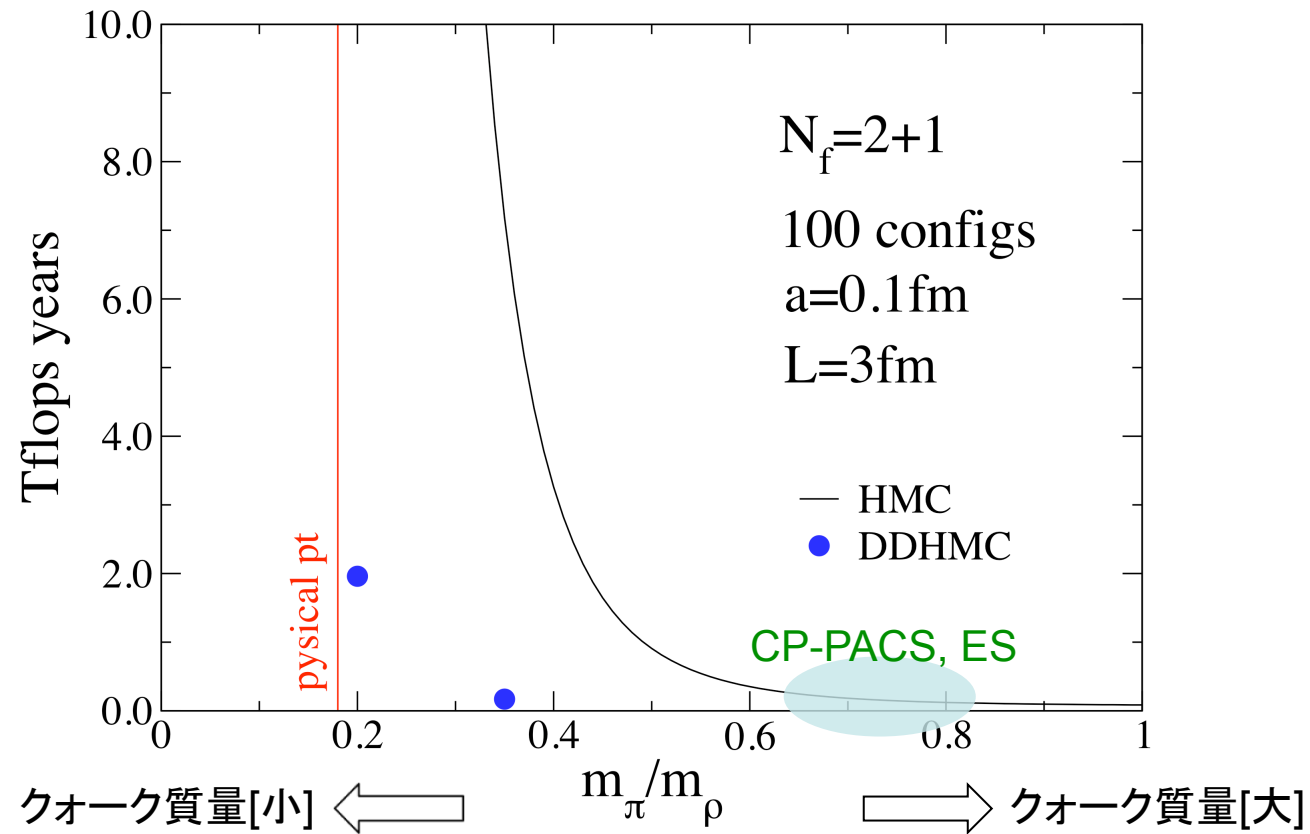
格子全体 : マルチノード  $\Rightarrow$  通信有

分割された小領域を利用して通信を抑制





## DDHMCによる計算コスト削減



⇒ 物理点計算が可能になる

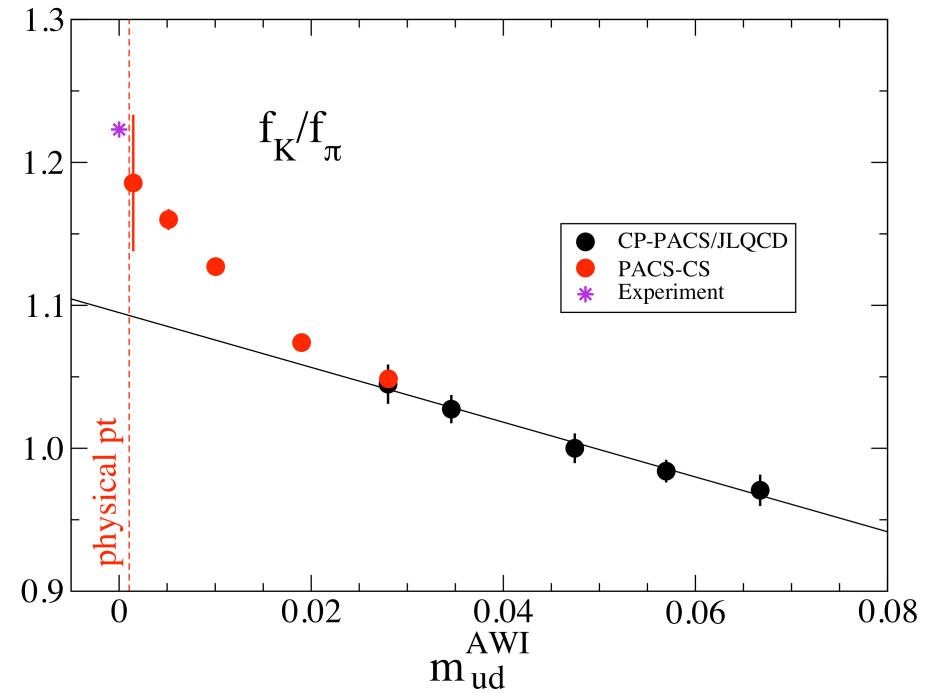
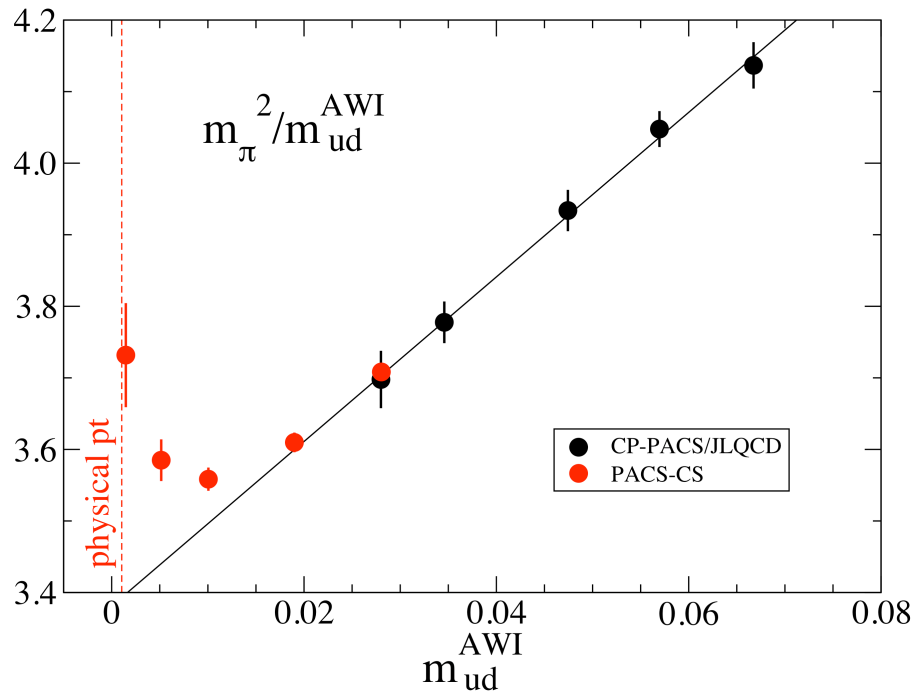


## 自然な疑問

非物理的な重いクォーク質量でシミュレーションを行い、  
物理点まで外挿すればよいのでは？



# クォーク質量依存性

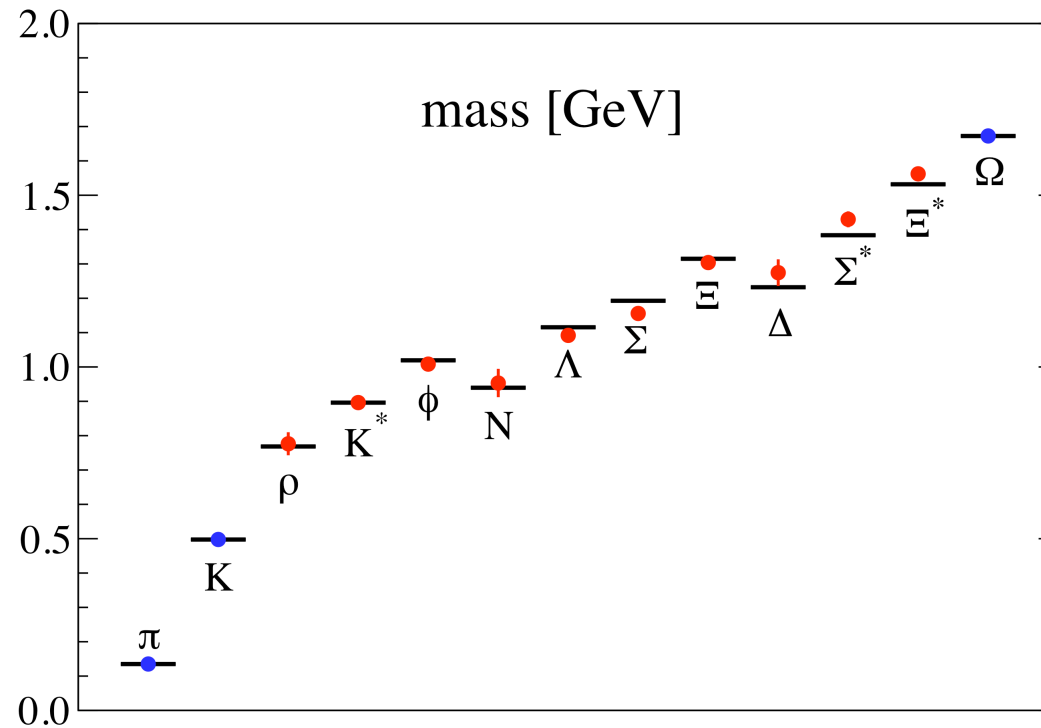


物理的クォーク質量に近づくにつれて非自明な曲率を確認  
⇒ 物理点計算の重要性



# ハドロン質量

input  $m_\pi, m_K, m_\Omega \Rightarrow m_u=m_d, m_s, a$



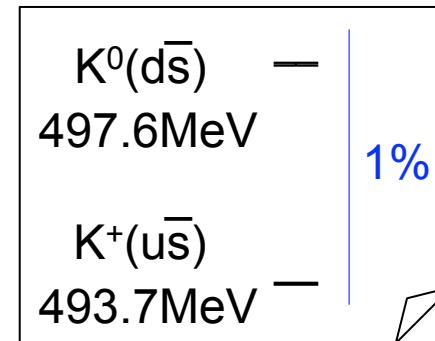
2~3%の誤差の範囲内で実験値と一致



## 現在取り組んでいる課題

- 物理点における1+1+1( $m_u \neq m_d \neq m_s$ )フレーバーQCD+QEDシミュレーション
  - 電磁相互作用の導入
  - u-dクォーク質量の差別化

更なる精密化  
マルチフィジックス



- 不安定粒子の崩壊幅計算  
ex.  $\rho \rightarrow \pi\pi$

一体問題から多体問題へ

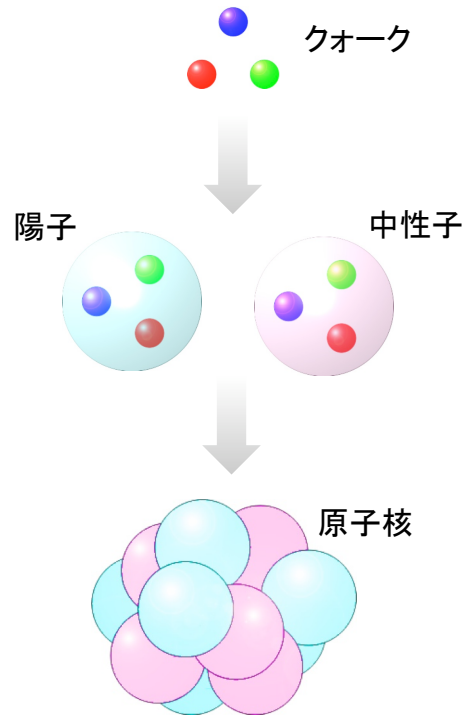
	$m_\pi$ [MeV]	崩壊幅 [MeV]
	410	$130 \pm 18$
	300	$152 \pm 28$
実験値	140	150



# 今後の挑戦的課題

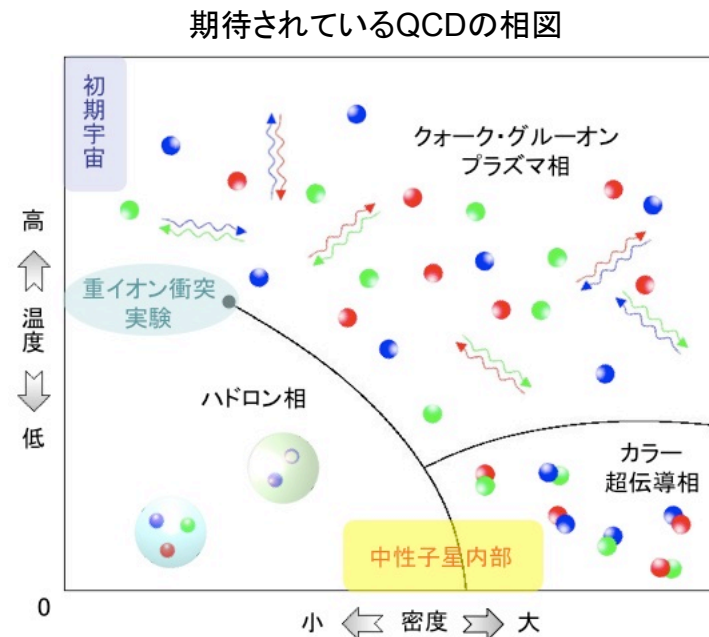
## 素粒子の世界の階層構造

格子QCDによる原子核の直接構成とその諸性質解明



## 有限温度・有限密度の物理

幅広い有限温度・有限密度領域における相構造解析  
実験不可能なことを調べる!







# まとめ

ポストペタへ向けての格子QCDの方向性

## サイエンス

自然の理解から予言への転換点

## アルゴリズム

更なるB/F減少と階層的並列構造への対応