

課題名 (タイトル) :

格子 QCD

利用者氏名 :

出渕 卓*

所属 :

*和光研究所 仁科加速器研究センター 素粒子物性研究部門 理研 BNL 研究センター
理論研究グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本研究課題は、この自然界を形作っている基本構造を素粒子の立場から理解することです。原子核を作っている陽子や中性子 (ハドロン) のビルディングブロックである素粒子 クォークとグルーオン場の間に働く強い相互作用を、現在までに知られている限り第一原理である量子色力学 (QCD; Quantum ChromoDynamics) を用いて詳しく調べます。この研究によって、例えば何故、陽子は中性子より軽いのか (陽子の安定性→化学的な世界が出来る必要条件)、そもそも何故ものには質量があるのかなどの問題に光を当てることができます。

格子 QCD は 4 次元の時空間を飛び飛びの格子の形で離散化することにより 連続自由度の量子ゆらぎに起因する量子発散を処理 (繰り込み) し、並列計算機を使うことでクォークとグルーオン場の力学を統計的に解く (モンテカルロ計算) ことが出来る、数多くある現代の科学技術計算の中で最も計算資源を必要とする課題のひとつです。

理研の仁科加速器センターの理論研究部門の一つである理研 BNL 研究センターでは格子 QCD を推進しており国内外の大学・研究機関とも共同研究を実施しています。RICC で行う計算は、RICC 以外の計算資源で作成した QCD 真空の統計サンプルの上で、理研で強力に進められている原子核の実験と関係の深い核子の理論計算やそのビルディングブロックであるクォークの基本的な性質 (例えば質量) の決定、またクォークの混合に関する小林-益川理論の精密検証に欠かせない物理量などを計算します。

2. 具体的な利用内容、計算方法

来年度の一般利用に向けてのソフトウェアのチューニングのため、簡易利用を申請しました。来年度大規模に走らせたい格子 QCD のプログラムを効率よく走らせるための準備をしています。

我々のソフトウェアは ソースファイル数が約 1,000 総行数にして 26 万行に及ぶ 理研、ブルックヘブン研究所、コロンビア大学、エジンバラ大学で共同開発している CPS++ というコードセットです。

最も計算時間が掛かるのは ディラック方程式と呼ばれる、相対論的に正しい、クォークの運動方程式をグルーオン場の背景中で解く部分で、4 次元格子時空中での差分方程式を共役交配法などの反復法によって解くことに帰着します。差分方程式のカーネル (係数行列) はグルーオン場 (ゲージ場、接続) を含み、格子点当たり 1320/2 回の浮動小数点演算が必要で、これを如何に効率よく計算するかがチューニングの重要な点の一つです。

典型的な問題では格子のサイズは $32^3 \times 64$ で、我々の使っているドメインウォール型の格子クォークの場合には さらに 16 倍の自由度 (5 次元目) が必要になります。これは一つのノードで実行するには大きすぎる計算量なので、コアやノード外に跨る並列計算を実行することが必要です。

上記のホットスポットは全ての物理計算の基本となるクォークの時空間の量子的伝搬を表す伝搬関数の計算で、この伝搬関数を組み合わせることにより陽子、中性子あるいは中間子などのハドロンの質量や構造などを調べます。

3. 結果

今年度は1ヶ月以内の使用時間であったため来年度の申請に向けたコードのチューニングに専念しました。

RICC の コンパイラ、実行環境を調べることが出来ました。また、複数あるコンパイラ(富士通, Intel, GCC)と並列実行(富士通 MPI, OpenMPI, OpenMP)の内どれが一番走らせたかったコードを効率よく走らせられるのかの目処を付けつつあるところです。SIMD 命令(SSE*)で上記のホットスポットを書き換えた結果、現在の所、我々のコードでは超並列 PC クラスタ 1 コア当たりでは約 3.5GFlops (倍精度)が出ています。これは理論的なピーク性能約 30%で、他のコード /CPU /プラットフォームに比べても良い性能で、来年度の大規模計算に大きな期待をしています。

並列性能も OpenMP で 4 core までは落ちず、それ以上は MPI で分割する予定です。対象とする問題サイズ($32^3 \times 64$ 格子、5次元方向が16)の場合、実測でMPIの通信は計算に比べて大きくなく並列によるペナルティは問題ないという結論です。通信専用のスレッドを作り、計算と通信を平行して行うモードも検討しています。

4. ま と め

今年度は使用時間が1ヶ月未満であるため、物理結果は出せませんでした。我々のコード(1,000ファイル 26万行)のコードを RICC のコンパイル・実行環境に合わせてチューニングすることが出来ました。

現在のところ、目的とする問題サイズ($32^3 \times 64$ 格子、5次元方向が16)で、coreあたり 3.5 GFLOPS 理論ピーク性能の約 30% が出ています。この問題サイズで大規模に格子 QCD の計算を行うことが出来れば、素粒子・原子核の理論研究にとって大きな進展をもたらすことが期待できます。

5. 今後の計画・展望

2010年度の申請では、理研の物理分野で力を入れている 原子核の物理を中心に格子 QCD の計算を大規模に行う計画です。具体的には

- 素粒子・原子核の標準模型の最も基本パラメータである up, down, strange クォーク質量の決定。
- 電磁気力と QCD の力、両方がある場合のシミュレーション、中性中間子の崩壊過程
- 原子核内部の構造の研究
- 小林益川理論の精密検証、B 中間子の崩壊過程
- 精密な質量、崩壊定数決定のために不可欠な量子繰り込み計算 (シュレディンガー法) を考えています。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

現在までに RICC でのコード CPS++のチューニングはほぼ目処が立ちました。2010年度は上記の計算を行う予定です。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

アカウントが使えるようになったのが2月で、試用期間が一月に満たなかったため、直接の研究成果はありません。コードのチューニングには大いに役に立ちました。また、情報基盤センターの適切なサポートにも大変助けていただき心より感謝します。