

解説



最前線の科学技術とスーパーコンピューティング

 2. 高エネルギー物理学における
スーパーコンピューティング†

小柳 義夫†

1. はじめに

高エネルギー物理学におけるハイパフォーマンスコンピューティングの現状をいくつかの分野を例として紹介する。最初の実用的電子式計算機ENIACが稼働を始めると、物理学者たちはただちに、核分裂液滴モデル、圧縮性流体の境界層、衝撃波の反射と屈折、気体の熱力学、気象計算などそれまでは解けなかった問題に競って取り組んだ。現在のノートパソコンよりはるかに能力の低い機械で、このような大問題を解こうとしたことは驚異に値する。その後、計算機の能力の飛躍的な増大にともない、より複雑な、より大規模な計算が可能になり、物理学にも多大な寄与を与えた。計算機の歴史は計算物理学の歴史でもある。

高エネルギー物理学の分野でも、計算機の初期のころから、それぞれの時代の先進的な技術を活用するのみでなく、計算機自体の発展の牽引力の役割を果たしてきた。高エネルギー物理学とは、高いエネルギー(粒子当り GeV 程度以上)の現象を理論的・実験的に研究する物理学の一分野で、素粒子物理学とほとんど同一の内容をもつと考えてよい。なぜ素粒子に大規模な計算資源が必要なのか、なぜ紙と鉛筆だけでは不十分なのか、それは(どの分野でも同じであろうが)きわめて複雑で非線形なシステムを扱わなければならないからである。

現在の「標準理論」によれば、すべての物質粒子は、クォーク(quark)とレプトン(lepton)、およびグルーオン(gluon)や光子(photon)などのゲージ粒子から構成され、強い相互作用は量子色力学(QCD, quantum chromodynamics)により、弱

い相互作用と電磁相互作用は弱電磁統一理論(electroweak theory)により記述されると考えられている。現在実験的に接近できる、100 GeV 程度以下の領域では、この標準理論の正しさが次第に確立されつつある。

それでは標準理論が確立されてしまえば、高エネルギー物理学はやることがなくなるのかというと、そうではない。標準理論から高エネルギーでの現象を予言することができなければ、何も分かったことにならないからである。それに、標準理論を超える理論を探求するにも、標準理論でどうなるかが予言できなければならない。

まず理論的な面では、格子ゲージ理論の数値シミュレーションが一つの代表である。標準理論によれば、陽子、中性子、パイ中間子などは、クォークとグルーオンから構成され、それらの振舞いは量子色力学と呼ばれる場の理論によって完全に記述される。しかし、これを実際に解くには莫大な計算が必要になる。

高エネルギー物理学の実験では、二つの粒子を高いエネルギーで衝突させるが、衝突後に多数の粒子が束のように生成される。このような現象をジェットという。実験を解析するには、理論からの予言と比べる必要がある。これが、ジェットのイベント・シミュレーションである。

また、衝突実験では多数の粒子が生成されるので、測定器からは莫大なデータが得られる。これを解析するにも、計算機の助けが必要である。今後の高エネルギー実験で処理すべきデータの量は、LIIC (Large Hadron Collider)を例にとると、1秒当り GB にも及ぶと予想され、これが1日24時間、1年365日生産され続けるわけであるから、その処理には通常の情報処理の常識をはるかに超える技術が必要である。これについては、渡瀬・藤井の記事¹⁾に譲る。

† Supercomputing in High Energy Physics by Yoshio OYANAGI (Department of Information Science, University of Tokyo).

† 東京大学理学部情報科学科

2. 量子色力学

現象を「第一原理」から定量的に説明することは物理学の理想である。量子力学の成立期に、水素原子のスペクトルが、電磁相互作用によって説明できたことは、量子力学の正しさを示す証拠と考えられた。高エネルギー物理学でも、水素原子のラム・シフトの値が予言できたことは、くりこみ理論の正しさを印象づけた。現在では、電子や μ 粒子の異常磁気モーメントの値は、有効数字7~9桁まで計算され、実験と合致することが確かめられている。

電磁相互作用は光子をゲージ粒子とするゲージ理論である。その強さを表す結合定数は、無次元量で約 $1/137$ であり、1に比べてかなり小さい。そのため、相互作用を摂動として取り扱うことができ、高次まで展開することにより精密な予言が可能になる。これが、くりこみ理論の成功した理由の一つであった。

ところが強い相互作用の関係するハドロンの現象では事情がまったく異なっている。強い相互作用の「第一原理」である量子色力学は、電磁相互作用と同じようにゲージ理論ではあるが、ゲージ粒子(グルーオン)は8種もあり、電磁相互作用とはまったく違った振舞いを示す。最も驚くべき性質は、相互作用の強さがエネルギーが下がるほど、すなわち距離が大きくなるほど大きくなることである。電磁相互作用では、荷電粒子間の力はクーロンの逆二乗法則に表されるように、距離が大きくなると小さくなる。しかし、クォーク間の力は小さくならない。別の言葉で言えば、量子色力学はきわめて非線形な力学系だということである。電子と陽電子からなるポジトロニウムのスペクトル構造は摂動論によって精密に計算できたが、これと似ているクォークと反クォークからなる中間子のスペクトル構造は摂動論では取り扱えない。

3. 格子ゲージシミュレーション

「第一原理」である量子色力学から、ハドロンの質量などの物理量を計算する現在のところ唯一の方法は、量子色力学を格子上で定式化した格子ゲージ理論(格子QCDともいう)を、計算機によって数値的に取り扱う格子ゲージシミュレーション

の手法である²⁾。これがなぜ多大な計算機資源を必要とするかという理由について解説しよう。

3.1 離散化

量子色力学は、連続空間・連続時間の上で定義された場の理論である。しかし、連続のままでは計算機で取り扱うことができないので、偏微分方程式の場合と同様に、「離散化」して有限個の点で時空を代表させる。格子ゲージ理論では、時空を4次元の超立方格子で離散化する。

離散化の際、二つの問題がある。格子間隔と格子サイズである。格子間隔は細かいほうがいいに決まっているが、4次元なので間隔を半分にする点の数は16倍になってしまう。幸いなことに、格子ゲージ理論では、ある程度以上細かくしても、物理的な結果が変わらない領域(スケーリング領域という)があることが知られている。したがって、スケーリング領域ぎりぎりまでシミュレーションを行えばよいのであるが、どこからスケーリング領域かは計算してみないと分からないので、実際上はいろいろ難しい。

格子サイズとは、計算に用いる格子の各辺の点の数である。本当は無限のサイズで計算したいのだが、それは不可能なので、有限のサイズで計算を実行させるをえない。サイズが小さいと境界の影響が現れる。初期のころには、物理学的な要請よりも計算機のメモリと計算能力で制限されていたので、 $8 \times 8 \times 8 \times 16$ 程度でも画期的であったが、実際には陽子1個さへはみ出す程度のサイズであった。現在では、 $32 \times 32 \times 32 \times 64$ 程度の計算が現実のものとなりつつある。

並列性の観点からは、格子ゲージ理論は幾何学的な並列性があり、しかも処理はほとんど均質であるから、並列化は比較的容易である。SORなどの反復法と同様に、多色法によって並列化を行うことができる。多色法では更新すべき変数を n 個の組(これを色と呼ぶ)に分類する。その際、一つの色の変数同士は互いに独立であるようにとれば、並列に更新できる。3次元の拡散方程式を7点差分で離散化した場合は、格子点 (i, j, k) を、 $i+j+k$ の偶奇によって赤と黒に分類すればよい。これを、red-black SORと呼ぶ。

格子ゲージ理論の場合、更新すべき変数は格子点を結ぶリンク上にあるので少し複雑になるが、各格子点から4次元の4つの正の方向に延びてい

るリンクを、方向と格子点を偶奇とで8色に分類すれば並列に更新できる。

3.2 量子性

格子ゲージシミュレーションでは、量子性をFeynmanの「経路積分法」で定式化する。これにより、量子力学の計算が、配位上の重みつき積分で表される。すなわち、 $32 \times 32 \times 32 \times 64$ の格子には約1.5億個の自由度が含まれている(クエンチ近似の場合)が、その上での格子ゲージシミュレーションとは、1.5億次元の多重積分なのである。

もちろん、このような多重積分をそのまま実行することはできない。時間を虚数にとることにより重みを正の実数にすることができるので、重みに比例した確率で配位が漸的に出現するようなマルコフ過程を数値的につくり、その上で物理量を平均することにより計算する³⁾。マルコフ過程の「時間」軸は、場の時間軸とは別であるから、いわば5次元のシミュレーションを行うことになる。精度を上げるには、多数のマルコフ過程のステップを実行する必要がある、多量の計算を必要とする。

マルコフ過程の時間軸については本質的に逐次的であるが、時空の4個の次元はまったく同等であり、時間方向にも幾何学的な並列性がある。この点では、偏微分方程式の時間積分よりも並列性が高い。

3.3 反交換性

クォークはフェルミオンであり、2点のクォーク場の積は交換すると符号が反転する。これを反交換性と呼ぶ。反交換性は、巨大な行列(格子上のDirac方程式の係数行列)の行列式を重みに掛けることによって表現される。フェルミオンの定式化にはいろいろあるが、Wilsonフェルミオンでは、 $32 \times 32 \times 32 \times 64$ 格子の場合、行列の次数は2500万となる。こんなサイズの行列式を実際に計算することはできない。

一つのやり方は、行列式を無視し定数と近似する方法である。これをクエンチ近似という。物理的には、クォーク・反クォークの対生成の効果を無視したことに相当する。初期の格子ゲージ理論の計算はすべてクエンチ近似であった。

行列式の寄与を近似なしに扱い、対生成の効果を取り入れたシミュレーションをfull QCDまた

はdynamical fermionと呼ぶ。これは究極のQCD計算である。full QCDの計算手法も近年急速に進歩している。詳細は省くが、シミュレーションの1ステップごとに、上記のフェルミオン行列を係数とする巨大な連立一次方程式を1回ないし2回解く必要がある。フェルミオン行列は、偏微分方程式を差分法で離散化した場合と同様に隣接点の間だけに結合をもち、きわめて疎な行列であるから、反復解法が有効である。full QCDの計算では、80~90%の計算時間はこの方程式の解法のために費やされる。高速で安定で並列性が高い解法の開発が必要とされている。

3.4 臨界減速

前にも述べたように、欲しいのは格子間隔を0とした連続極限での値であるが、これは2次の相転移点であることが知られている。相転移点に近づくと、揺らぎが大きくなるので、格子ゲージシミュレーションでも、マルコフ過程が漸近的分布に達するまでのステップ数が増えたり、ステップを重ねても配位がほとんど変化しなくなったりする。これを、臨界減速(critical slowing down)という。格子の一辺の長さを N とすると、計算時間は N^4 ではなく、臨界減速のために、 N^6 に比例する(クエンチ近似の場合)。full QCDでは、なんと N^8 にも比例すると言われている。

3.5 格子ゲージ専用計算機

このように格子ゲージシミュレーションは、きわめて多くの計算量とメモリを必要とする計算である。しかし、本質的に並列性が高く、商用および専用の並列計算機上で高い効率で実行が可能である。とくに、日本、米国、欧州でさまざまな専用並列計算機を製作するプロジェクト⁴⁾が発足し、いろいろと重要な成果をあげている。一番のボトルネックは、フェルミオン連立一次方程式の解法であろう。

4. ジェット・シミュレーション 相互作用からイベントへ

量子色力学はエネルギーが下がると相互作用が強くなるが、逆にエネルギーが高い領域では相互作用が弱くなる。したがって、高エネルギーでの現象には摂動論が使える可能性がある。また、電磁相互作用や弱い相互作用については当然摂動論が適応できる。しかし今や摂動論でさえ、「紙と

鉛筆」では扱いきれなくなっている。

4.1 グラフの自動生成

摂動論では、各次数の振動がグラフと対応づけられるが、標準理論では、従来の電磁相互作用だけと違って反応にかかわるグラフの個数をはるかに多い。したがって、関係するグラフをもれなく生成することも容易ではない。しかし、グラフはある規則を満たすものをすべて探索すればよいので、計算機の格好の課題である。

4.2 REDUCE ソースの自動生成

数式処理には REDUCE がよく使われるが、そのソースはグラフと対応している。これも複雑かつ多数になると人間の手に負えないので、計算機にやらせることが考えられる。

4.3 数式処理

振幅計算の数式処理は、その規模が通常とはけた違いである。問題にもよるが、REDUCE の出力を紙に打ち出すと一つの式が 1000 頁を越すことも希ではない。現在の数式処理の主流は、人間との対語型の処理であるが、振幅計算では結果を人間が読むことは期待できない。

4.4 数値積分

REDUCE の出力は、ある領域で積分しなくてはならない。反応の種類にもよるが、出ていく粒子の角度やエネルギーに関係する多数の力学変数に関する多重積分になる。被積分関数には鋭いピークや曲がった山脈や不連続性があり、積分領域も複雑な形状をもつので、積分法としては解析的な方法が適用できず、適応型のモンテカルロ法が用いられる⁵⁾。

たいていの FORTRAN コンパイラは、1000 頁を越す式を入力するとダウンしてしまう。ダウンしないまでも、最適化のためのテーブルがあふれてしまう。このため、REDUCE の出力に適した独自の最適化プログラム⁶⁾を自作することが必要となる。その上で、式を分割して並列に計算する master-slave 型の並列処理も試みられている。

4.5 イベントシミュレーション

通常の数値計算では数値積分の結果が得られればおしまいであるが、ジェット計算では、被積分関数に比例した確率密度で力学変数をランダムに生成しなければならない。これを適当に変換すると、反応で生成される粒子の角度やエネルギー

が得られる。一組の値は一回の反応に対応し、これをイベントという。

イベントの生成のためには、適応型モンテカルロで用いた重み情報を使う、一種の棄却法が工夫されている⁷⁾。

4.6 高エネルギー反応の自動計算

以上に示した一連の計算過程は、原理的には自動化できるはずである。清水ら⁸⁾は、標準理論のもとで、トリーグラフに限って、反応の振幅を自動的に計算するシステム GRACE/CHANEL を開発した。さらに、1 個のループを含むグラフまで計算できるよう拡張されている⁹⁾。

高エネルギー物理学研究所のトリスタン加速器で試みられたトップクォーク探しなども、それに特徴的なジェットを探索するわけで、以上に述べたようなシミュレーションが不可欠である。そのためには、量だけではなく質的にも高度なハイパフォーマンスコンピューティングが求められている。

5. おわりに

高エネルギー物理学は、加速器と測定器と、それに計算機とによって今日まで発展してきた。とくに複雑な系の振舞いを、基本法則から数値的に導出するシミュレーションの手法は、理論や実験の補助手段であるにとどまらず、それ自身一つの独自の的方法論として確立しつつある。すなわち、物理的対象そのものではなく、それを表す数学的モデルを扱うという点では理論物理学と共通点をもつが、データを取得し、分析し、演繹的ではなく帰納的に推論するところが実験物理学と共通している。計算物理学が「第三の物理学」と言われるゆえんである。

今後、さらに大規模で非線形性の高い問題を扱う必要が出てくるが、そのためにはさらにけた違いの計算量やメモリが必要になる。これを可能にするのは並列処理しかない。並列処理を活用するためには、既存のソフトウェアをそのまま自動並列化コンパイラに掛ければよいというわけではなく、モデル化や定式化から考え直さなければならぬ。物理学者などのユーザと情報科学者との密接な連携が今後一層重要になると思われる。

参考文献

- 1) 渡瀬芳行・藤井啓文：高エネルギー物理実験とコンピュータ，日本物理学会誌，Vol. 49, No. 2, pp. 83-91(1994).
- 2) 岩崎洋一：格子ゲージ理論，物理学最前線 11, 共立出版，(1985).
- 3) Creutz, M., Jacobs, L. and Rebbi, C.: Experiments with a Gauge-Invariant Ising System, Physical Review Letters, Vol. 42, No. 21, pp. 1390-1393(1979).
- 4) 岩崎洋一：並列計算機で素粒子，宇宙，物質を探る，日本物理学会誌，Vol. 49, No. 3, pp. 191-199(1994).
- 5) Lepage, G. P.: VEGAS, Adaptive Multi-dimensional Integration Program, CLNS-80/447(1980).
- 6) Kaneko, K. and Kawabata, S.: A Preprocessor for FORTRAN Source Code Produced by REDUCE, Comput. Phys. Comm., Vol. 55, No. 1, p. 141(1989).
- 7) Kawabata, S.: A New Monte Carlo Event Generator for High Energy Physics, Comput. Phys. Comm., Vol. 41, No. 1, pp. 127-153.
- 8) Kaneko, T., Kurihara, Y., Shimizu, Y. and Tanaka, H.: GRACE and CHANEL, Automatic Calculation of Cross Sections, Proceedings of the Second International Workshop on Software Engineering, Artificial Intelligence and Expert Systems in High Energy and Nuclear Physics, ed. by D. Perret-Gallix, pp. 659-664(1992).
- 9) Fujimoto, J., Shimizu, Y., Kato, K. and Oyanagi, Y.: Numerical Approach to One-Loop Integrals, Prog. Theor. Phys., Vol. 87, No. 5, pp. 1233-1247(1992).

(平成6年3月31日受付)



小柳 義夫 (正会員)

1943年生。1966年東京大学理学部物理学科卒業。1971年同大学院理学系研究科物理学専門課程修了。理学博士。同年同大助手。高エネルギー物理学研究所理論部門助手，筑波大学電子情報工学系講師，助教授，教授を経て，1991年東京大学理学部情報科学科教授。並列処理，数値解析，計算物理学に関する研究に従事。とくに，偏微分方程式の高速並列解法，最小二乗法の数値計算，乱数やモンテカルロ法に興味をもつ。物理学会，日本統計学会，応用統計学会，計算機統計学会，応用数学会など各会員。