

エクサスケールコンピューティングで基礎科学が目指すもの

藏 増 嘉 伸^{†,††}

ペタスケールコンピューティングにおいて基礎科学が取り組む研究テーマと、それを遂行するために必要な計算アルゴリズム・手法を説明したのち、エクサスケールコンピューティングへ向けての科学的ターゲットと計算機アーキテクチャの特性から予見される今後の課題を議論する。

Fundamental Science with ExaScale Computing

YOSHINOBU KURAMASHI^{†,††}

We first review what kind of achievements are expected in fundamental science with petascale computing explaining key computational algorithms and techniques. We then present scientific target in exascale computing and discuss possible technical difficulties associated with specific features of future computer architecture.

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラムの第5分野「物質と宇宙の起源と構造」は基礎科学に特化しているという点において他の4分野とは異質である。われわれの目標は物理学の基本法則を第一原理とし、素粒子・原子核から星・銀河におよぶ幅広いスケールのシミュレーションを実行し、宇宙が現在の姿を持つに至った歴史を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法を用いて統一かつ定量的に理解することを目指す。具体的な研究開発課題として、(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定、(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用、(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明、(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成等に取り組む。本講演では、私の専門分野である格子QCDを用いた大規模シミュレーションに焦点をしばり、ペタスケールからエクサスケールの高性能計算における科学としての挑戦的課題とそれを達成するために克服すべき困難について議論する。

自然界には、強い力、電磁気力、弱い力、重力の4つが存在する。重力や電磁気力は我々にとって馴染み深い力であるが、弱い力は日常身近に感じることはない。強い力は宇宙の恒星を輝かせている源であり、多種多様な分子の中の原子核を構成している力である。強い力は物質の基本構成粒子（素粒子）であるクォークに

作用し、グルーオンと呼ばれる質量ゼロのゲージ粒子を媒介として力の伝達が行われる。原子核は陽子と中性子の束縛状態であるが、その陽子・中性子はそれぞれ3つのクォークから構成されている。このクォークとグルーオンの力学を記述すると考えられている理論が量子色力学（QCD）であり、特に離散化した4次元時空上で定義されたものを格子QCDと呼ぶ。格子QCDの利点は、格子化によって理論の自由度が有限になりコンピュータを利用した数値的解析が可能となることである。

格子QCDの数値計算においては、ハイブリッドモンテカルロ（HMC）法と呼ばれる分子動力学法の一つが用いられており、ほとんどの計算コストは $O(10^8)$ 次元の疎行列の線形方程式を反復法で解くことに費やされる。容易に想像されるように、格子QCD計算はメモリバンド幅律速であり、ネットワークバンド幅も重要な要因である。残念ながら、近年の計算機アーキテクチャにおいては演算性能に対するメモリバンド幅とネットワークバンド幅の相対的劣化が顕著な傾向にあり、それに対してこれまで我々がどのように対応してきたかを説明する。また、このトレンドはポストペタスケールからエクサスケールの計算機アーキテクチャにおいて更に加速されると考えられ、その際に予想される困難をGPUクラスタ上での格子QCD計算を例にとって議論したい。

[†] 筑波大学

University of Tsukuba

^{††} 計算科学研究機構

Advanced Institute for Computational Science