

# KEK 大型シミュレーション研究 外部評価委員会報告(日本語訳)

KEK 大型シミュレーション研究外部評価委員会

February 9, 2003

## 目次

<b>KEK 大型シミュレーション研究</b>	
<b>外部 評価委員会</b> .....	1
1 大型シミュレーション研究の目的 .....	2
2 研究成果 .....	2
2.1 大規模数値シミュレーションによる格子QCDの研究 (scqcd グループ) .....	3
2.2 QCDにおける色荷閉じ込め機構とモノポールの モンテカルロによる研究(scknza グループ) .....	4
2.3 ファインマン振幅の自動計算と高エネルギー物理への応用 (scmiami グループ) .....	4
2.4 有限温度および密度におけるQCD(sctaro グループ) .....	5
2.5 格子QCDにおける核子励起状態の最大エントロピー法を用いたス ベクトル解析 (scmelqcd グループ) .....	5
2.6 微視的計算法による核子構造と重イオン衝突の研究 (scnucl/scsokaku グループ) .....	5
2.7 数値的宇宙物理 (scastro グループ) .....	6
3 計算機資源とユーザ環境 .....	6
4 審査システムについて .....	7
4.1 研究課題の採択について .....	7
4.2 研究プロジェクトの事後評価について .....	7
5 組織 .....	8
5.1 委員会の構成 .....	8
5.2 長期的戦略に関する提案 .....	8
6 まとめ .....	8

## 外部評価委員会について

高エネルギー加速器研究機構(KEK)は、1996年4月、日本での高エネルギー物理学およびその関連分野の大規模シミュレーションをサポートするために、公募型研究制度「大型シミュレーション研究」を開始した。この制度により、KEKはスーパーコンピュータを使って実施する研究プロジェクトを公募し、申請は「大型シミュレーション研究審査委員会」で審査され、採否と計算時間の割り当てが決定される。1996年からこれまでに、のべ77の研究プロジェクトの申請が採択され、多くの研究成果がそれぞれの研究グループから発表された。これらの成果を評価し、問題点があるならばそれをあげ、ひいてはこの制度の将来の方向性について知見を得るために、KEK機構長はこの委員会に、1996年4月から2002年3月までに実施された「大型シミュレーション研究」に関する評価を依頼した。

この委員会に与えられた任務は以下の通りである。

- この制度の下で行われた研究に関する評価。
- この制度の効果に関する評価。
- この制度のための計算機資源とサポートが適切であるかどうかを評価。

これらの点について、将来の方向性についての勧告も期待されている。

この委員会の委員は以下の通りである。

Paul B. Mackenzie	米国、フェルミ国立加速器研究所
益川 敏英	京都大学基礎物理学研究所
Denis Perret-Gallix	フランス国立科学研究センター (CNRS)
三田 一郎 (委員長)	名古屋大学
高田 俊和	日本電気 基礎研究所
宇川 彰	筑波大学計算物理学研究センター
矢崎 紘一	東京女子大学

2002年12月12および13日に KEK 計算科学センターにおいて、この委員会の会合を開いた。

## 1 大型シミュレーション研究の目的

高エネルギー加速器研究機構(KEK)は加速器科学およびその関連分野の研究を行う機関であり、素粒子原子核物理の研究はその主要な課題である。このために、KEK は高エネルギー物理実験のための加速器や検出器を保有し、運転している。また、KEKは素粒子原子核物理の研究に必要な計算機資源も整備しており、スーパーコンピュータシステムはその重要な一部をなしている。

スーパーコンピュータシステムは、大型シミュレーション研究を通じて使用されている。大型シミュレーション研究では、KEK のスーパーコンピュータを使う、高エネルギー物理および関連分野の共同研究を公募し、日本の大学および国立研究機関の研究者、あるいは機構長が適切と認めた者がこれに応募できる。

本外部評価委員会(以下では本委員会)は基本的に、計算機による研究は素粒子物理の研究に不可欠であり、KEK の研究計画の様々な点において重要であると考え。標準模型のシミュレーション、その中でも特に QCD の非摂動効果のシミュレーションは、B の物理全体の中でも B ファクトリー実験の実験結果から意味のある物理量を引き出すための欠かすことのできない主要な部分となっている。また、原子核物理および宇宙物理などの関係分野においても計算機による研究は本質的に重要である。

これらの分野で最先端の研究を行うには、非常に大きな計算機資源が必要である。個々の研究グループがこうした計算機環境を用意することは非常に困難であり、この面での KEK の努力は物理学のコミュニティー全体が評価するところである。

## 2 研究成果

現在の大規模計算は、物理学の多くの分野で過去に例のないほどの進歩を可能にした。KEK の大型シミュレーション研究も、これらのいくつかの分野に重要な進展をもたらしてきた。本委員会は、このプログラムのもとで研究を進めている 7 つの研究グループから、大規模な数値シミュレーションによって可能になった多様な物理の研究について報告を受けた。例えば、摂動的場の量子論においてすでに確立した手法も、計算機を使うことでさらに高いレベルに到達することができる。scminami グループは、ファインマン振幅を計算機を使って自動的に計算する手法を開発し、この手法は LEP 実験や将来の加速器実験の研究に幅広く使われている。原子核物理学の進展においても、非常に異なる計算手法が使われている。scnucl/scsokaku グループは、KEK のスーパーコンピュータを使ってストレンジネス核物理や J-PARC における重イオン衝突実験に関する研究を行っている。

特に非摂動的な場の量子論においては、大規模な数値シミュレーションは過去には得られなかった強結合理論の解を求めることを可能にした。このことは著しい学問上の成果であると同時に、

KEK や世界中で行われている実験計画にとって緊急の実際的な重要性がある。KEK やその他の実験では、数百億円を費やして B 中間子の物理の実験を進めているが、その解析は QCD の計算なしには理論的に完全にはなりえない。そして、QCD は大規模数値シミュレーションなしには解くことのできない強結合場の理論なのである。これらの実験は、例えばカビボ-小林-益川行列の要素を決定するために必要になるものである。このような標準模型の基本パラメタは、標準模型を越える物理の理解を進めるうえで本質的な手がかりを与えるもので、現在の素粒子実験の中心的な目的になっている。大型シミュレーション研究のサポートによって、scqcd グループはこれらの計算で世界をリードしてきている。しかしながら、KEK や世界の実験で必要とされる計算を完成させるためには、さらに大きな計算が必要になり、それによりこの分野をリードし続けていく必要がある。ためには、さらに大きな計算が必要であり、従ってこの分野を引続きリードしていく必要がある。

## 2.1 大規模数値シミュレーションによる格子 QCD の研究 (scqcd グループ)

このグループは、スーパーコンピュータ VPP-500 を使って、 $B_K, m, d, f$ 、陽子崩壊行列要素、 $f_B, B_B$ 、および  $\alpha_s$  をクエンチ近似の範囲内で計算した。これらの計算ではカイラル対称性による振る舞いを制御することが必要であり、 $B_K$  の場合には演算子混合の問題をカイラル・ワード・高橋恒等式を使うことで解決した。彼らの  $B_K$  の結果は Particle Data Group に標準的な値として採用されており、このことはその数値が高エネルギー物理学のコミュニティで広く使われていることを示している。また、本委員会は彼らの B の物理の計算が Belle 実験の解析を完成するために本質的であることを指摘しておきたい。

2000 年にスーパーコンピュータ SR8000 が導入されたのにもない、このグループは動的なアップおよびダウンクォークを含んだクエンチ近似によらない計算を開始した。これにより得られた  $f_B, B_B$ 、および SU(3) の破れを表す比  $(f_B \sqrt{B_B}) / (f_B \sqrt{B_B})$  の結果は世界の競争をリードするもので、クエンチ近似が 10% 程度の無視できない誤差を生むことを示した。彼らは、上であげたすべての計算をストレンジクォークの動的効果も取り入れて行うべきだと主張している。このグループは、スーパーコンピュータシステムの計算時間のうちの 90% を使用している。本委員会は、このグループが世界をリードする成果を挙げていることについて祝意を表す。

これらの結果は KEK の実験計画だけでなく、世界中の高エネルギー物理のコミュニティにとって、今まさに重要なものである。物理のコミュニティにとって、極めて重要なものである。この研究を完成させるには、完全にクエンチ近似によらない同じ精度の計算が必要になる。(それにはより強力な計算機が必要である。) したがって、もし十分な計算資源が得られるならば、引き続いて本質的な成果をあげることが期待できる。今後一年のうちにアメリカおよびヨーロッパのグループが強力な競争相手になると予想される。本委員会は、この共同研究が最高水準を保つため、KEK が必要なすべての措置をとるよう強く勧告する。

## 2.2 QCDにおける色荷閉じ込め機構とモノポールのモンテカルロによる (scknza グループ)

このグループは、モノポール凝縮が QCD の閉じ込め機構において本質的であるというトーフートの予想を証明しようと試みている。動的フェルミオンを含む計算によって、彼らは(1)アーベリアン、および(2)モノポールが支配的な役割を果たしていることを見出した。特に、中間子の中のクォーク--反クォーク間の色荷流の分布を目に見えるように示したことは興味深い。

このグループの研究結果は、閉じ込め機構の概念的な理解にかなりの進歩をもたらした。しかしながら、低エネルギーでのハドロン力学を理解するために使える有効理論を導くという目標までは果たしていない。

また、このグループに割り当てられた時間のうちかなりの部分が使われていないことも記しておきたい。

## 2.3 ファインマン振幅の自動計算と高エネルギー物理への応用 (scminami グループ)

このグループは、1 体あるいは 2 体から  $n$  体への散乱のヘリシティ振幅を自動的に生成するプログラム(GRACE)を開発した。これは、標準模型あるいは超対称標準模型の最低次の計算に用いられる。実際、これはイベントジェネレータのジェネレータとでも呼ぶべきものであり、LEP 実験において広く使われている。1 ループのダイアグラム( $n=2$  および  $n=3$  のいくつか)の計算につかえるパッケージも最終テストの段階にあり、高次ループ補正も研究されている。ほとんどの場合、計算の制限は CPU やメモリー、ディスク容量といった計算機システムの性能によって与えられる。また、4 倍精度演算もこれらの計算には本質的である。このパッケージは、LHC や将来の線形加速器における超対称粒子の探索に広く使われることになるだろう。

こうした方向での研究は、高エネルギー物理の検出器で得られた実験データを理解する上で本質的であり、世界中でいくつかのグループが同様のパッケージを開発中である。今後も世界をリードする研究を続けるためには、この研究を今後も適切な計算機システムによりサポートすることが重要である。

本委員会は、このグループが多くの重要な反応において世界をリードする成果をあげていることに祝意を表したい。

## 2.4 有限温度および密度における QCD (sctaro グループ)

このグループは、有限温度および密度でのハドロン質量の研究を非等方格子を使ってすすめている。カイラル極限への外挿が研究され、極および遮蔽質量が、擬スカラー、ベクター、スカラー、および軸ベクター粒子について温度の関数として得られている。また、有限密度でのハドロン質量の研究の最初の試みがなされ、カイラル秩序パラメタ  $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$  が、有限の化学ポテンシャルのもとで計算された。

なお、最近このグループに割り当てられた時間のうちかなりの部分が使われていないことも記しておきたい。

この研究計画は、J-PARC での  $p$ -A (あるいは A-A') 衝突実験に関係している。

## 2.5 格子 QCD における核子励起状態の最大エントロピー法を用いたスペクトル解析 (scmelqcd グループ)

このグループは、彼らが以前提案した最大エントロピー法を用いて核子演算子の相関関数からスペクトル関数を抜き出すことで、核子の励起状態を研究している。スペクトル関数において  $N'$  (1440) と  $N^*$  (1535) 粒子を同定するために、パリティ射影がなされた。クォーク質量が軽いときには有限体積効果が重要になり、長年の疑問であった励起状態の間の準位の順序の問題は、無限体積の極限では解決されることが明らかになった。

この研究計画は最近始まったばかりで、計算時間は多くはない。また、この研究は J-PARC における研究課題の一つであるハドロン分光学にとって重要である。

## 2.6 微視的計算法による核子構造と重イオン衝突の研究 (scnucl/scsokaku グループ)

このグループは3つの課題を研究している。(1) ハイパー核の構造、(2) 安定および不安定核の構造、(3) 中間エネルギーでの重イオン衝突。(1)に対して、彼らは軽いハイパー核の研究にガウス基底を用いて、 $Y$ - $N$ および  $Y$ - $Y$ 相互作用に関する情報を引き出した。また、 $\pi$ -結合がハイパー核の統一的な理解に本質的であることを発見した。(2)と(3)に関しては、原子核多体系の微視的な扱いとして、反対称化分子動力学法を用い、中性子過剰核の奇妙な構造や重イオン衝突での多重破砕の様子を説明することに成功した。

彼らの研究にはかなりの計算時間が割り当てられ、そのほとんどを使いきっている。このことは、プログラムの最適化がよくなされていることを示している。

彼らの研究対象は核物理の最先端であり、J-PARC におけるストレンジネス核物理や重イオン

衝突実験と密接に関連している。

## 2.7 数値的宇宙物理 (scastro グループ)

このグループは、超新星サブグループと数値相対論サブグループの2つからなっている。超新星サブグループは、超新星爆発のシミュレーションコード(洗練された1次元コードと単純化された2及び3次元コード)を開発し、観測されている  $r$  過程での重粒子過剰を定性的に説明した。また、SN1987a からのニュートリノ事象を、ニュートリノ振動の可能性も考慮して再解析した。数値相対論サブグループは、融合する二連中性子星とその放出する重力波を、4次元アインシュタイン方程式と一般相対論的流体方程式を数値的に解くことで研究した。

このグループには豊富な計算時間が割り当てられたが、すべては使われていない。スーパーコンピュータへのさらなる最適化が必要なのかもしれない。この研究は、宇宙物理においてだけでなく素粒子原子核物理においても重要であり、J-PARC で行われるニュートリノ物理にも関係している。

## 3 計算機資源とユーザ環境

スーパーコンピュータの機種は、導入時にもっとも価格性能比が高くなるよう、適切に選択されている。この計算機は、主要な応用分野である格子 QCD の大規模シミュレーションに適したものであり、非常に効果的に使用されている。過去数年の間は、格子 QCD の分野に使われた計算機としてはもっとも強力なものであった。

スーパーコンピュータの TOP500 リストによれば、2000 年の導入時には世界で 9 番目に高速であったが、2002 年には 53 位にまで順位を落としており、今後も急速に落ちていくと予想される。KEK が格子ゲージ理論とその他の大規模シミュレーションの分野でトップの地位を保つためには、計算機の更新が緊急の課題となる。現在の6年間のレンタル契約期間は、世界的な競争の先頭に立ち続けるシステムを保証するには長すぎる。今後のレンタル契約は、より短期のものにするべきである。

計算機をサポートする周辺環境は、スーパーコンピュータを最大限に使うために重要である。ギガビットイーサネットで遠隔地と接続するネットワークの増強計画は、遠隔地のユーザのスーパーコンピュータ利用環境を改善し、効果的な共同研究をもたらすであろう。近年のディスクの価格の下落を考えると、ディスク容量を増強することも望まれる。また、スーパーコンピュータが最適でないような計算需要に対してもサポートしていくことも重要であろう。安価な PC ファームは、スーパーコンピュータのユーザのある種の計算には効率的な解になりうる。将来のシステムの更新計画を練る際には、異なる計算需要に対してさまざまなタイプの計算機の効率性を、注意深く検討することが必要である。



スーパーコンピュータ利用の最適化を助けるために十分なサポートスタッフを擁することは、効率的な利用のためには本質的な重要性をもつ。最近空席となった格子 QCD のポジションを時機を逸することなく補充することは、特に重要である。スーパーコンピュータの使用に関するワークショップは、外部ユーザの仕事を促進するのに役にたつであろう。

## 4 審査システムについて

大型シミュレーション研究審査委員会は、スーパーコンピュータの設備を使って行う研究課題の提案について、審査し採択する役割を負っている。

第 2 章でも述べた通り、本委員会はスーパーコンピュータを使って行われた研究を高く評価している。したがって、審査と課題採択は問題なく行われていると考える。

### 4.1 研究課題の採択について

本委員会の見るところ、いくつかの計算は、例えば PC クラスターなど、より適した計算機アーキテクチャーで走らせることもできる。しかも、グループによっては申請され配分された計算時間のうち部分的にしか使用していない。ただし、年に 2 回の見直しが行われているため、余った時間は他のユーザに割り当てられ、全体ではすべての計算機資源が使われている。

したがって本委員会は、計算科学センターにあるより広範な計算機資源を審査委員会で扱えるようにし、計算の種類によっては、適切ならば他の計算機で実行できるようにすることを勧告する。

大規模な計算時間の申請に関しては、採択する前にまず計算をテストして有効であることを確認すべきである。この目的のために、テストのための小規模の計算時間については、要求に応じて認めるべきである。

### 4.2 研究プロジェクトの事後評価について

本委員会の理解するところでは、すべての研究結果は大型シミュレーション研究審査委員会で評価されることになっているが、我々はこの評価をより厳密に透明なやり方で実施することを勧告する。1997 年度から 2001 年度までの公式な成果報告書は、研究活動を評価するには不十分である。研究の動機や結果の有効性はどちらも明確に書かれていない。それぞれの研究報告は、他分野の研究者が理解できるように書くべきである。

さらに 2000 年度に関しては、3 グループの報告書しか掲載されておらず、これは明らかに受け入れがたい。このような態度は、長年にわたる努力によって得られた計算機の研究所に対する一般の信頼を損なうものである。

本委員会は、申請年度の終りには各分野の専門家による評価を行うことを勧告する。また、一

般にも理解できるような研究活動のまとめをウェブページで公開することもすすめる。

## 5 組織

### 5.1 委員会の構成

現在は、KEK スーパーコンピュータシステムの運用は計算科学センター長に任命されるスーパーコンピュータシステム運用委員会の下で行われている。一方、研究計画の採択と計算時間の配分は大型シミュレーション研究審査委員会が決定する。

研究計画と計算機の運用とは互いに密接に関係しているので、両者が互いに矛盾しないよう統一的に組織されるべきである。

このことは、特に将来のスーパーコンピュータによる研究計画を決定するときには重要になる。

したがって本委員会は、KEK 機構長の下に、大型シミュレーション研究の運営とスーパーコンピュータシステムの運用の両方を包含する委員会を設けることを提案する。これによって、KEK のスーパーコンピュータの設備は、さらに効果的に科学に貢献できるようになるであろう。スーパーコンピュータによる研究計画の将来の方向性も、この新しい委員会で議論されることになる。

### 5.2 長期的戦略に関する提案

本委員会の任務は、研究所のスーパーコンピュータに対する評価であるが、将来の日本およびアジアの素粒子原子核物理学のための、確固とした適切な構成の計算機環境の重要性を強調しておくことが必要であると考えます。

したがって本委員会は、KEK がコミュニティ全般の需要を考慮し、素粒子原子核物理における計算機関係の研究活動のグローバルなネットワークの中で、計算科学センターが主要な核として果たしうる役割を評価することを提案する。

## 6 まとめ

現在の素粒子原子核物理の研究では、高精度かつ大規模な計算が強く要求される。

適切に設計された強力な計算機システムなしには、新しい研究プロジェクトの成功はおぼつかない。日本の研究の効率性と競争力が問題になっているのである。

いくつかの改善点を指摘したが、全体としては、大型シミュレーション研究はコミュニティの研究目標を達成するためのすばらしい仕組みを提供しているというのが本委員会の考えである。この制度は、KEK 所員だけでなく所外の研究者にも高性能の計算資源を提供してきており、これによって、物理コミュニティの研究者が、共同して多くの興味深い問題に取り組む努力を後押ししてきた。本委員会は、この制度が非常に有効なものであると認めるとともに、今後もこれを継続して物理コミュニティ全体を強くサポートすべきであると考えます。物理コミュニティ全体のために、今後もこれを継続

し、強くサポートすべきであると考える。

研究の水準は総じて非常に高い。特に非摂動 QCD においては、B の物理に不可欠な数多くの物理量の計算で世界をリードしている。本委員会は、スーパーコンピュータの施設と大型シミュレーション研究を通じた研究者による共同利用のサポートを、KEK が継続することを強く勧める。

評価制度の問題は、文部科学省のサポートを受けたすべての研究プロジェクトに共通のものであり、正して行かなければならない。本委員会は、あらゆる機会にこの問題を指摘していくことで変化の契機になることを期待している。また、KEK 大型シミュレーション研究がこの方向への第一歩を踏み出すことを期待する。

最後に、日本とアジアの国々を含む諸外国での計算機科学のより幅広い領域で、計算科学センターの役割と研究活動を促進していくためのさらなる議論がすすめられることを、本委員会は期待している。