

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年6月14日現在

機関番号：82118

研究種目：新学術領域研究

研究期間：2008～2012

課題番号：20105005

研究課題名（和文） 分野横断アルゴリズムと計算機シミュレーション

研究課題名（英文） Interdisciplinary algorithms and computer simulations

研究代表者

松古 栄夫 (Matsufuru Hideo)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター・助教

研究者番号：10373185

研究成果の概要（和文）：本新学術領域研究が目的とする計算物理に基づく素粒子・原子核・宇宙物理の融合と重層的物質構造解明のために、アルゴリズムやシミュレーションの高速化手法に関する分野を横断した連携体制の構築、超並列計算機や GPGPU などの先進アーキテクチャの性能を引き出すための手法の開発、計算素粒子物理学(格子 QCD)のためのデータグリッドなど計算環境の整備、格子 QCD シミュレーションのための共通コードの開発(2012年7月に公開)を行った。

研究成果の概要（英文）： To proceed the project for bridging particle, nuclear and astrophysics and studying hierarchical structure of matter based on computational science, we have constructed interdisciplinary cooperation among the fields and with applied mathematicians for investigation of algorithms and high performance computing and developed techniques to fully extract recent architectures such as massively parallel computers and GPGPU, a data grid system for sharing data in computing elementary particle physics (lattice QCD), and common code system for lattice QCD simulations that was publically released in July, 2012.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	22,900,000	6,870,000	29,770,000
2009年度	25,200,000	7,560,000	32,760,000
2010年度	25,200,000	7,560,000	32,760,000
2011年度	25,200,000	7,560,000	32,760,000
2012年度	25,200,000	7,560,000	32,760,000
総計	123,700,000	37,110,000	160,810,000

研究分野：素粒子物理学（理論）

科研費の分科・細目：物理学、素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：シミュレーション、素粒子論、理論核物理、宇宙物理

### 1. 研究開始当初の背景

新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」が計画された時点において、素粒子・原子核・宇宙物理における数値計算による研究は、お互いの連携が十分とはいえず、また応用数学の研究

者との連携もあまり進んでいない状況であった。本新学術領域は、このような状況を打開し、分野間の連携と共同研究、応用数学や計算機科学など数値シミュレーションを格段に高速化する知見を持つ研究者との連携を進めることによって、素粒子から宇宙に至る階層的な物質構造のメカニズムを解明し

てゆくことを目標として計画された。

## 2. 研究の目的

上記の状況で本計画研究は、本新学術領域における他班が推進する物理研究の基盤となるアルゴリズムや数値計算手法の応用と開発、計算環境の整備に焦点をあてた研究という点で特色があった。計算機の発展は急速に進んでいるが、その性能を最大限活用するには、それぞれの問題に最適なアルゴリズムと高速化手法を選択し、迅速に適用することが不可欠である。このための情報共有と協力体制の構築が最も重要な課題であった。また、数学的構造やアルゴリズムの視点から物理現象を分析することにより、階層の異なる物理の統一的な理解に迫ることも目指した。

## 3. 研究の方法

以下のような計画に従って研究を進めた。

(1). 分野を横断した数値計算アルゴリズムの応用と開発：素粒子、原子核、宇宙の分野で研究されているアルゴリズムや最適化の知見を融合し、応用数学の専門家等と共同で改良し、それぞれの分野に応用する。特に線形方程式系の解法は、計算コストの大きな部分を占めることも多く、最も高速化が望まれる数値アルゴリズムであった。

(2). 高速計算のためのアーキテクチャの検討と高速化手法の開発：近年発展の著しいグラフィックカード(GPGPU)などの演算アクセラレータや、大規模並列計算機など、様々なアーキテクチャの計算機の持つ能力を最大限に利用するための研究を行う。

(3). データ共有のための環境整備：大容量化するデータを効率的に利用するため、異なる研究機関間での高速なデータ転送を行い、データを公開、共有するための環境を整備する。格子QCD分野におけるデータグリッド「JLDG (Japan Lattice Data Grid)」を運用し、これをより使いやすいシステムに発展させるとともに、同様の仕組みが有効な他分野への支援を行う。

(4). 格子QCDのための共通コードの開発：領域内で要望や、(1)-(3)のテーマに対する共通基盤の必要性に答えるため、格子ゲージ理論の共通コード開発プロジェクトを2009年度に開始した。初心者にとって理解しやすく、また同時に高性能な計算も可能なプログラム体系の構築を目指す。多くの研究者が参加する開発体制のテストケースとなることも期待した。

## 4. 研究成果

(1). 分野を横断した数値計算アルゴリズムの応用と開発：分野を横断した研究者間で共通の問題を扱えるような基盤を構築した。格子QCDや超新星爆発シミュレーションにおいて、応用数学の研究者と共同で、線形方程式の性質の理解を進め、超新星爆発の場合は超並列計算の場合でも効率のよいアルゴリズムにより高速化を実現した。超新星爆発シミュレーションコードの大規模並列化、Block Krylov法の格子ゲージ理論への応用、相対論的数値流体方程式のスキームの研究等を行った。これらの知見を共有し、更なる連携のための基盤とするため、アルゴリズムや高速化手法をまとめるウェブサイト「高性能計算の扉」(計算基礎科学連携拠点で運用)を構築した。

(2). 高速計算のためのアーキテクチャの検討と高速化手法の開発：2008年度に導入したGPGPU(NVIDIA Tesla S1070)並列クラスターサーバを含め、AMD社のGPUやCell B.E.などのアクセラレータを備えた計算サーバを導入し、これらの性能を引き出すためのプログラミング技法を開発した。応用例として、核物質の状態方程式を求める際の積分計算に対しGPGPUを用いた高速化を行い、数十倍の高速化を実現した。またこれらの技術は、格子QCD共通コードの中に取り入れられている。研究会や講習会を通してプログラム開発技術の共有を進めた。導入したサーバはコード開発だけでなく、本新学術領域の実際の計算にも利用され重要な計算資源となっている。

(3). データ共有のための環境整備：毎年度JLDGのためのファイルサーバを導入し、データ共有環境の増強を行いながら、より便利なシステムを目指した開発を継続的に行った。現在までに、本研究開時点の6拠点に加え、東京大学情報基盤センター(柏)、名古屋大学素粒子宇宙起源研究機構がJLDG拠点として加わり、これまでに360TB、2400万ファイルのデータを蓄積している。基盤となるGfarmグリッドファイルシステムのアップデートを取り入れることにより、研究グループ内のデータ共有・高速転送サービスを開始するなど、利便性が大きく向上した。システムの利用法についての講習会を開催した。PACS-CSやJLQCDコラボレーションによって生成されたデータの公開を進めた。HPCI共用ストレージとの連携システム構築に向けての技術検討を行った。また、宇宙物理のシミュレーションなど、大規模データが生成され高速なデータ転送が必要な分野への拡張を検討した。

(4). 格子QCD共通コードの開発

2009 年に行った需要調査とその後の開発方針の策定に基づき、オブジェクト指向に基づいたデザインと C++での実装を決定した。月 2 回程度のミーティングと関連情報に関するセミナーなどを行いながら開発を進め、2012 年 7 月に、最初の公開版をリリースした。その後もデザインの改良、機能の拡張、高速化、GPGPU やマルチスレッドへの対応、ドキュメントの整備、計算結果の検証などを継続的に行った。開発は HPCI 戦略プログラム分野 5 へ引き継がれ、今後も継続する。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 53 件)

- ① A.Imakura, T.Sakurai, K.Sumiyoshi, H.Matsufuru, “A Parameter Optimization Technique for a Weighted Jacobi-Type Preconditioner”, JSIAM Letters 4 (2013) 41-44. 査読有 [JOI: DN/JST.JSTAGE/jsiaml/4.41]
- ② K.Nagata, S.Motoki, Y.Nakagawa, A.Nakamura, T.Saito, Towards extremely dense matter on the lattice, Prog. of Theor. Exper. Phys. (PTEP) 2012 (2012) 01A103, 査読有 [DOI: 10.1093/ptep/pts003]
- ③ S.Furusawa, S.Yamada, K. Sumiyoshi and H. Suzuki, A new baryonic equation of state at sub-nuclear densities for core-collapse simulations, Astrophysical Journal 738 (2011) 138 (17 pages), 査読有 [DOI: 10.1088/0004-637X/738/2/178]
- ④ K.Ioka, Y.Ohira, N.Kawanaka, and A.Mizuta, Gamma-Ray Burst without Baryonic and Magnetic Load?, Prog. Theor. Phys. 126 (2011) 555-564, 査読有 [DOI: 10.1143/PTP.126.555]
- ⑤ PACS-CS collaboration (S.Aoki, K.-I.Ishikawa, N.Ishizuka, T.Izubuchi, K.Kanaya, Y.Kuramashi, K.Murano, Y.Namekawa, M.Okawa, Y.Taniguchi, A.Ukawa, N.Ukita, T.Yoshié), “Non-perturbative renormalization of quark mass in  $N_f=2+1$  QCD with the Schroedinger functional scheme”, JHEP 08(2010) 101, 1-27, 査読有 [DOI: 10.1007/JHEP08(2010)101].
- ⑥ JLQCD collaboration (H. Fukaya S. Aoki, S. Hashimoto, T. Kaneko, J. Noaki, T. Onogi, N. Yamada), “Determination of the chiral condensate from 2+1-flavor lattice QCD,” Phys. Rev. Lett. 104, 122002 (2010) (4 pages), 査読有 [DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.159901, 10.1103/PhysRevLett.104.122002].
- ⑦ JLQCD and TWQCD collaborations (J. Noaki, T.W. Chiu, H. Fukaya, S. Hashimoto, H. Matsufuru, T. Onogi, E.Shintani, N.Yamada), “Non-perturbative renormalization of bilinear operators with dynamical overlap fermions,” Phys. Rev. D 81 034502 (2009) (22 pages), 査読有 [DOI: 10.1103/PhysRevD.81.034502].
- ⑧ JLQCD and TWQCD collaborations (S.Aoki, T.W.Chiu, H.Fukaya, S.Hashimoto, T.H.Hsieh, T.Kaneko, H.Matsufuru, J.Noaki, T.Onogi, E.Shintani, N.Yamada), “Pion form factors from two-flavor lattice QCD with exact chiral symmetry,” Phy. Rev. D 80, 034508 (2009). (20 pages), 査読有 [DOI: 10.1103/PhysRevD.80.034508].

[学会発表] (計 145 件)

- ① Hideo Matsufuru, Computational physics project (A04) report, International Symposium:Quarks to Universe in Computational Science, 2012 年 12 月 13-16 日, 奈良県新公会堂
- ② T.Kaneko, Precision determination of the CKM matrix element  $|V_{us}|$ , International Symposium:Quarks to Universe in Computational Science, 2012 年 12 月 13-16 日, 奈良県新公会堂
- ③ 吉江友照, JLDG の現状と計画, HPCI 戦略プログラム分野 5 「物質と宇宙の起源と構造」全体シンポジウム, 2013 年 3 月 5-6 日, 富士ソフトアキバプラザ、東京都秋葉原
- ④ 住吉光介, ニュートリノ輸送方程式の数値解法, 宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションワークショップ WS2013 (招待講演), 2013 年 2 月 18-19 日, 千葉大学
- ⑤ 元木伸治, C++コードに対する OpenCL を利用したアクセラレータフレームワークの開発, 情報処理学会 HPC 研究会, 2012 年 10 月 3 日 沖縄産業支援センター、沖縄県那覇市
- ⑥ Akira Mizuta, Photospheric thermal radiation from GRB collapsar jets, 13th Marcel Grossmann Meeting (招待講演), 2012 年 7 月 2 日, Stockholm Univ., Sweden
- ⑦ K. Sumiyoshi, Numerical challenges in physics of core-collapse supernovae: the role of dense matter and neutrinos,

Third International Conference on Nuclear Fragmentation: From Basic Research to Applications (NUFRA2011) 招待講演, 2011年10月2-9日, Kemer, Turkey

- ⑧ 野秋淳一, 格子 QCD シミュレーションの共通コード開発, 素核宇融合による計算基礎物理学の進展, 2012年12月3日, 合歓の郷, 三重県志摩市
- ⑨ T.Kaneko, "Lattice studies of hadron physics with disconnected quark loops", 35th International Conference on High Energy Physics (ICHEP 2010), Palais des Congres, France, July 22-28, 2010
- ⑩ 松古栄夫, 格子 QCD シミュレーションにおける固有値問題(招待講演), 特異値固有値合同ワークショップ, 2009年11月21-22日, エポカルつくば, つくば市
- ⑪ T.Kaneko, "Pion form factors from lattice QCD with exact chiral symmetry", 6th International Workshop on Chiral Dynamics (Chiral Dynamics 2009), University of Bern, Switzerland, July 6-10, 2009
- ⑫ 吉江友照, 格子 QCD データグリッド ILDG/JLDG (基調講演), 平成 21 年度 ITBL シンポジウム, 2009年5月29日, 海洋研究開発機構 横浜研究所
- ⑬ T.Yoshie, "International Lattice Data Grid" (invited talk), HackLat2009, 7 May 2009, NeSC, Edinburgh, UK

[その他]

ホームページ等

<http://bridge.kek.jp/A04/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

松古 栄夫 (MATSUFURU HIDEO)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター・助教  
研究者番号: 10373185

### (2) 研究分担者

吉江 友照 (YOSHIE TOMOTERU)

筑波大学・数理物質科学研究科・准教授  
研究者番号: 40183991

金児隆志 (KANEKO TAKASHI)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・助教  
研究者番号: 20342602

### (3) 連携研究者

橋本 省二 (HASHIMOTO SHOJI)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・教授  
研究者番号: 90280510

石川 健一 (ISHIKAWA KEN-ICHI)

広島大学・理学研究科・准教授

研究者番号: 60334041

矢花 一浩 (YABANA KAZUHIRO)

筑波大学・数理物質科学研究科・教授  
研究者番号: 70192789

清水 則孝 (SHIMIZU NORITAKA)

東京大学・理学系研究科・特任准教授  
研究者番号: 30419254

鈴木 英之 (SUZUKI HIDEYUKI)

東京理科大学・理工学部・教授  
研究者番号: 90211987

櫻井 鉄也 (TAKURAI TETSUYA)

筑波大学・システム情報工学研究科・教授  
研究者番号: 60187086

多田野 寛人 (TADANO HIROTO)

筑波大学・システム情報工学研究科・助教  
研究者番号: 50507845

住吉 光介 (SUMIYOSHI KOSUKE)

沼津工業高等専門学校・教養科・教授  
研究者番号: 30280720

青山 龍美 (AOYAMA TATSUMI)

名古屋大学・素粒子宇宙起源研究機構・特任准教授

研究者番号: 30391840

高橋 大介 (TAKAHASHI DAISUKE)

筑波大学・システム情報工学研究科・准教授  
研究者番号: 00292714

野秋 淳一 (NOAKI JUN-ICHI)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・特任助教  
研究者番号: 90392068

浮田 尚哉 (UKITA NAOYA) (研究支援員)

筑波大学・計算科学研究センター・研究員  
研究者番号: 50422192

### (4) 研究協力者

水田 晃 (MIZUTA AKIRA)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・研究員  
研究者番号: 90402817

元木 伸治 (MOTOKI SHINJI)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・研究員 (研究支援員)

研究者番号: -