

令和5年度高性能汎用計算機高度利用事業
「富岳」成果創出加速プログラム
「超大規模格子QCDによる新物理探索と次世代計算に向けた
AI技術開発」
成果報告書

令和6年5月30日
国立大学法人筑波大学

山崎 剛

目次

1. 補助事業の目的.....	- 1 -
2. 令和5年度（報告年度）の実施内容.....	- 1 -
2－1. 当該年度（令和5年度）の事業実施計画.....	- 1 -
2－2. 実施内容（成果）	- 2 -
2－3. 活動（研究会の活動等）	- 5 -
2－4. 実施体制	- 6 -
別添1 学会等発表実績.....	- 7 -

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発

体系的番号： JPMXP1020230409

1. 補助事業の目的

「富岳」を用いた超大規模格子 QCD 計算により素粒子物理学で喫緊の課題である新物理探索に係る物理量の精密計算を実施するとともに、次世代大規模格子 QCD 計算へ向けて、現在の大規模計算で顕在化した問題に対し、機械学習技術を応用した解決方法の開発研究を行う。

2. 令和 5 年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和 5 年度）の事業実施計画

(1) 物理点超大規模格子 QCD による標準理論を超える新物理探索

u, d, s, c クォーク真空偏極効果を取り入れた、現実的クォーク質量かつ $(10\text{fm})^3$ を超える巨大体積の超大規模格子 QCD 計算を「富岳」を用いて実施する。目標とする格子間隔 3 点 $(0.085\text{fm}, 0.065\text{fm}, 0.045\text{fm})$ での計算の内、令和 5 年度は大きな格子間隔 2 点でゲージ配位生成計算、基本物理量測定計算の完了と結果解析を目指す。また、 0.045fm の計算を開始する。同時に、最も大きな格子間隔 (0.085fm) のゲージ配位を用いて K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算と結果解析も実施する。

(2) 次世代格子 QCD へ向けた AI 技術開発

これまでの大規模格子 QCD 計算で顕在化したゲージ固定計算の長時間化および膨大なメモリ容量の問題に対する解決方法を、機械学習技術を応用し開発する。令和 5 度は、長時間化の問題解決に向け、機械学習のインプットデータに対応するゲージ配位の対称性を取り入れたニューラルネットを用いて、ゲージ固定計算前処理法の開発を行い、ワークステーションを用いた小さな格子サイズでの試験計算を実施する。良好な結果が得られれば大規模計算へ向けた開発を進めていく。

(3) プロジェクトの総合的推進

本事業のアウトリーチを行うため、Web ページを開設し、本事業の研究目的、研究計画、研究成果などの平易な解説を行う。課題で得られた研究成果は速やかに学術論文としてまとめ公表する予定である。中間結果についても国際会議や国内研究会で積極的に発表を行う。また、各サブ課題による成果をまとめて発表する研究会を実施する。研究会には大学院生や若手研究者の参加を促すため、可能な限り旅費補助を行う。

2-2. 実施内容（成果）

（1）物理点超大規模格子 QCD による標準理論を超える新物理探索

令和4年度まで主に実行していた現実的クォーク質量直上で $(10\text{fm})^4$ を超える時空間体積を持つ2+1 フレーバー格子 QCD シミュレーションを発展させ、2+1 フレーバー計算で取り入れたアップ、ダウン、ストレンジクォーク真空偏極効果に加え、チャームクォーク真空偏極効果を取り入れた 2+1+1 フレーバー格子 QCD を実行した。この計算で重要となるゲージ配位生成は異なる格子間隔 3 点（格子間隔, 格子サイズ）= $(0.085\text{fm}, 128^4)$, $(0.065\text{fm}, 168^4)$, $(0.042\text{fm}, 256^4)$ で生成を計画している。これらのゲージ配位は、HPCI 戦略プログラム分野 5 において「京」コンピュータを用いて生成された 96^4 格子サイズの配位[1]と比較してそれぞれ 3.2, 9.4, 50.6 倍の格子体積を有している。これらは現在の世界の格子 QCD 計算が $(5\sim 6\text{fm})^4$ の体積で行われていることを考えると、格段に大きな時空間体積でのシミュレーションである。現在の日本国内において、このような巨大な、特に 256^4 格子サイズのようなゲージ配位生成および以下で記述する物理量計算を実行できる計算機環境は「富岳」のみしか存在しない。令和2年度以前と比べ、「富岳」を用いることで10倍以上となった本研究グループで利用可能な計算機資源と、「富岳」に合わせ最適化・高速化したコードにより、このような大規模シミュレーション実行が可能となった。

現実的クォーク質量かつ $(10\text{fm})^4$ を超える時空間体積での 2+1+1 フレーバー大規模格子 QCD シミュレーションには令和4年度から着手している。チャームクォーク真空偏極効果は 0.1%オーダーと予想されているが、標準模型を超える物理の間接的探索では 1%よりも小さな不定性での計算が求められており、このような系統誤差をも取り除いた精密計算が望まれている。このような高精度計算を実行するため、上記の（格子間隔, 格子サイズ）パラメータ 3 点でゲージ配位を生成する計画である。これらのパラメータは2+1 フレーバー計算結果との比較を念頭に置き、2+1 フレーバー計算で生成したゲージ配位と同程度になるよう設定した。

これまでの2+1 フレーバーシミュレーションに用いた計算コードに、チャームクォーク真空偏極効果計算を加えるなどの計算実行環境の整備を行い、それを用いて 128^4 格子サイズのゲージ配位を生成した。図1に、その計算より得られた様々な中間子質量の結果と実験値の相対差を示す。横破線は実験値に対応する。我々の計算結果は概ね 2%程度以内で実験値を再現している。緑印や赤印のチャームクォークを含む中間子の一部が実験値からやや離れているのは、有限格子間隔による系統誤差と考えられる。

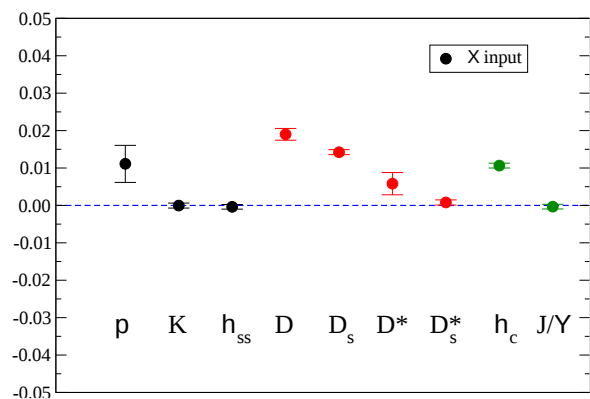


図 1: 2+1+1 フレーバー 128^4 格子サイズ計算から得られた各種中間子質量の実験との相対差。横破線は実験値に対応。

また、2+1+1 フレーバー 128^4 格子サイズのゲージ配位を用いて、キャビボ-小林-益川クォーク混合行列要素 V_{us} の決定に不可欠な、K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算を実行した。 V_{us} の決定

のためには、 K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子をゼロ運動量移行周りで計算し、その結果を運動量移行二乗の関数として内挿し、ゼロ運動量移行の形状因子 $f_+(0)$ の値を決定する必要がある。本課題で目標とする、巨大体積・格子サイズ、小格子間隔、現実的クォーク質量直上での K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算は、空間体積の逆数で与えられる運動量が非常に小さく取れること、およびクォーク質量に関する外挿が必要のないことなど、物理量精密決定に対して非常に有効な計算である。図 2 には $2+1+1$ フレーバー計算から得られた $f_+(0)$ の中間結果を赤色印で示してある。後述の同じ格子間隔での $2+1$ フレーバー計算結果と比較すると、2 つの計算結果の違いは統計誤差と同程度の 0.2% 程度であることが示唆される。今後も、異なる格子間隔 2 点でゲージ配位生成を順次実施していく。

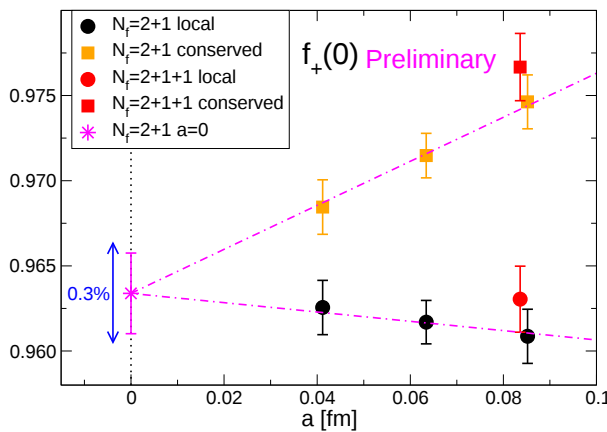


図 2: $f_+(0)$ の連続極限外挿の中間結果。黒丸と橙四角が $2+1$ フレーバー計算結果[2,3,4]。横軸は格子間隔。点破線と星印は連続極限外挿フィット結果。赤丸と赤四角は $2+1+1$ フレーバーの中間結果。

$2+1+1$ フレーバー計算以外にも、これまでに生成した $2+1$ フレーバーゲージ配位を用いて、物理量精密計算を実施した。その一つは $2+1$ フレーバー 256^4 格子サイズゲージ配位を用いた K 中間子セミレプトニック崩壊形状因子計算である。図 2 に示したのは 256^4 格子サイズゲージ配位を用いた計算 (格子間隔 0.42 fm) を取り入れたゼロ運動量移行での形状因子 $f_+(0)$ の格子間隔依存性の中間結果[2]である。横軸は格子間隔であり、黒丸と橙四角の 2 つの結果の違いは計算手法 (図中 local と conserved) の違いである。我々の以前の計算で得られた、大きな格子間隔 2 点での結果[3, 4]と同様に、異なる計算手法からは異なる結果が得られたが、格子間隔が小さくなると共にそれらの差も小さくなるという格子間隔依存性を確認した。これは 2 つの計算の違いが有限格子間隔によるものであることから説明できる。2 つの計算が連続極限で一致するという制限を加えた連続極限外挿を行った結果、格子間隔ゼロの連続極限では、0.3%を下回る統計誤差の中間結果が得られた。図 3 には連続極限で得られた $f_+(0)$ の値を用いて見積もられた $|V_{us}|$ の中間結果 (赤丸) を示す。令和 4 年度までの我々の結果[4] (赤四角) と比較し、小さな誤差で $|V_{us}|$ の決定することができた。この中間結果は、他グループの計算結果や別の K 中間子崩壊過程により決定された $|V_{us}|$ とも概ね一致している。灰色帯で示されている標準模型による $|V_{us}|$ の予言値とは 2σ (σ : 標準偏差) 程度の違いが見られているが、標準模型を超える物理探索のためには更なる精度向上が望まれる。

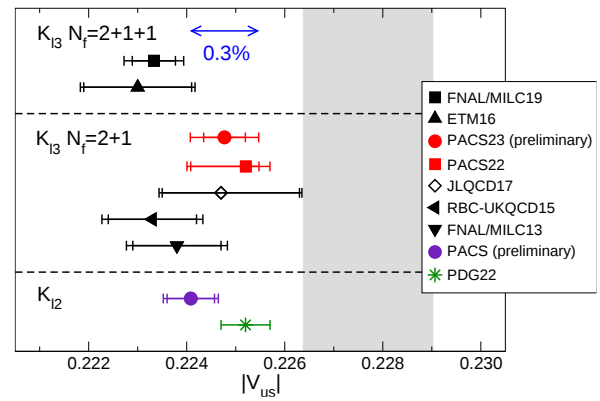


図 3: $|V_{us}|$ の中間結果 (赤丸) と我々の以前の計算結果[3] (赤四角)。それ以外の黒色印は他グループの結果、星印と紫丸は K 中間子レプトニック崩壊過程から決められた値。灰色帯は標準模型の予言値。

参考文献

- [1] K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, (PACS Collaboration), Proceedings of Science (LATTICE2015), 075 (2016).
- [2] T. Yamazaki, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, and T. Yoshié, (PACS Collaboration), arXiv:2311.16755, Proceedings of Science (LATTICE2023), 276, 印刷中.
- [3] J. Kakazu, K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, (PACS Collaboration), Phys. Rev. D101, 094504 (2020).
- [4] K.-I. Ishikawa, N. Ishizuka, Y. Kuramashi, Y. Namekawa, Y. Taniguchi, N. Ukita, T. Yamazaki, and T. Yoshié, (PACS Collaboration), Phys. Rev. D106, 9, 094501 (2022).

(2) 次世代格子 QCD へ向けた AI 技術開発

令和 5 年度の研究では、格子 QCD 計算の加速を目指し、AI 技術を用いた理論的探索を行った。具体的には、格子 QCD における計算は、モンテカルロ法によるゲージ配位の生成とゲージ配位から物理量を計算する段階に分かれている。その中で、ゲージ固定とソルバーの計算は計算時間のボトルネックとなっており、これらを AI 技術で高速化することが目的であった。

令和 5 年度は、より簡単なモデルであるスピン・フェルミオン系に対して、対称性を保ったトランスフォーマー型のニューラルネットを考案し実装した。このトランスフォーマー型ニューラルネットは、大域的対称性を保ちつつフェルミオンが持つ長距離相関を捉えることができるものである。これにより、自己学習モンテカルロ法として利用可能であることを確認した。

コード開発において直面した課題は、ニューラルネットの学習時に必要な誤差逆伝播法を実現するための自動微分の実装であった。令和 5 年度の研究においては、原子力機構（現東京大学）永井とサブ課題責任者富谷の共同研究により、Julia 言語での実装を行った。コードは `rrule` に準拠する形で実装した。それにより自動微分もうまく実装ができた。これにより、効率的な学習が可能となった。

ゲージ固定の加速に関する研究はまだ進行中であり、ゲージ対称性を保つトランスフォーマーを開発中である。このニューラルネットを用いてゲージ固定の計算を高速化する予定である。同様に、ソルバーの加速に関する研究も進行中であり、こちらもゲージ対称性を保つトランスフォーマーの開発が完了次第、ソルバーの高速化に応用する予定である。

次年度の計画としては、ゲージ対称性を保つトランスフォーマー型ニューラルネットの定式化を完成させることを目標とする。これには大域的な対称性を保つトランスフォーマー型ニューラルネットを基礎として開発する予定であり、それを用いてゲージ固定およびソルバーの高速化を図る予定である。

(3) プロジェクトの総合的推進

課題全体の進捗状況を踏まえ、その後の方針や課題全体に関する研究報告会、ミーティング開催についての検討を行った。実際に開催したミーティングと国際会議等については、2-3にまとめた。本事業の2サブグループ研究者が一同に会する研究会をこれまで開催していなかったため、本事業開始初年度に2サブグループの研究進捗状況共有とこれまでの研究成果発信、及び関連分野研究状況の情報収集を目的として、当初目標にはなかったが10名の海外講演者を招待する国際ワークショップ「Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning」を主催した。また、課題目的、研究内容、実施体制の説明、および研究成果を発信するための課題ウェブページを作成し、研究成果発表などを行った際に随時更新を行った。

2-3. 活動（研究会の活動等）

● 課題全体定例ミーティング

全課題参加者が参加するミーティングを概ね月2回オンラインで開催し、特に機械学習応用研究について情報共有を行った。

開催日：4/21, 5/12, 5/26, 6/9, 6/27, 7/18, 10/4, 10/18, 11/1, 12/13, 1/10, 1/30, 2/13, 2/27

● 物理点超大規模格子QCDによる標準理論を超える新物理探索定例ミーティング

大規模格子QCDに関する定例ミーティングを概ね週1回オンラインで開催した。

開催日：4/3, 4/11, 4/20, 4/27, 5/11, 5/18, 5/25, 6/1, 6/8, 6/15, 6/23, 6/30, 7/7, 7/14, 7/25, 8/8, 8/16, 8/23, 8/30, 9/6, 9/13, 9/25, 10/5, 10/13, 10/20, 11/2, 11/9, 11/20, 12/4, 12/11, 12/26, 1/11, 1/17, 1/23, 2/6, 2/13, 2/28, 3/5, 3/13, 3/22, 3/29

● 次世代格子QCDへ向けたAI技術開発研究打ち合わせ

機械学習技術の格子QCD計算応用研究に関する研究打ち合わせを概ね3週間に1回対面で行った。

開催日：4/26, 5/24, 6/28, 7/18, 9/4, 10/2, 10/23, 11/13, 12/11, 1/16, 2/13, 2/16, 3/1, 3/22, 4/12, 4/25, 4/26

● 機械学習集中講義

課題参加者の機械学習の基礎的な理解を深めるため、サブ課題責任者 富谷氏による集中講義を開催した。

開催日：令和5年6月27日, 7月18日

開催場所：筑波大学つくばキャンパス(ハイブリッド)

参加者：約30名(2回合計)

● 国際ワークショップ

国内外の格子QCDおよび機械学習研究者を招聘し、大規模格子QCDおよび格子QCDへの機械学習応用

研究に関する国際ワークショップ「Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning」を開催した。

開催日：令和 5 年 11 月 23 日～25 日

開催場所：筑波大学つくばキャンパス(ハイブリッド)

参加者：35 名(内海外招待講演者 10 名，参加国数 5)

研究会ホームページ：https://www-het.ph.tsukuba.ac.jp/~yamazaki/LQCD_ML2023/

● 成果創出加速プログラム基礎科学 4 課題合同シンポジウム

素粒子・原子核・宇宙物理に関連する成果創出加速プログラム 4 課題合同のシンポジウムを開催し、各課題の進捗状況や研究成果の報告を行なった。

開催日：令和 5 年 12 月 18 日～20 日

開催場所：筑波大学東京キャンパス(ハイブリッド)

参加者：75 名

主催：計算基礎科学連携拠点、『富岳』成果創出加速プログラム基礎科学 4 課題

共催：筑波大学・計算科学研究センター、高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・理論センター

研究会ホームページ：<https://kds.kek.jp/event/48556/overview>

● 課題研究内容、研究成果情報発信

課題目的、研究内容、実施体制の説明、および研究成果を発信するための課題ウェブページを作成し、随時更新を行った。

ウェブページ：https://www-het.ph.tsukuba.ac.jp/~latticeqcd_ai/latticeqcd_ai/

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) 物理点超大規模格子 QCD による標準理論を超える新物理探索	筑波大学 茨城県つくば市天王台一丁目 1 番 1	山崎 剛
(2) 次世代格子 QCD へ向けた AI 技術開発	大阪国際工科専門職大学 大阪府大阪市北区梅田 3 丁目 3-1	富谷 昭夫
(3) プロジェクトの総合的推進	筑波大学 茨城県つくば市天王台一丁目 1 番 1	山崎 剛

別添 1 学会等発表実績

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期
1	Self-learning Monte Carlo with equivariant Transformer	Yuki Nagai, Akio Tomiya	arXiv:2306.11527	令和 5 年 6 月
2	Equivariant Transformer is all you need	Akio Tomiya, Yuki Nagai	arXiv:2310.13222 Proceedings of Science	令和 5 年 10 月
3	Comparison with model-independent and dependent analyses for pion charge radius	Kohei Sato, Hiromasa Watanabe, Takeshi Yamazaki	arXiv:2310.16622 Proceedings of Science	令和 5 年 11 月
4	$ V_{us} $ from kaon semileptonic form factor in $N_f = 2+1$ QCD at the physical point on $(10 \text{ fm})^4$	Takeshi Yamazaki et al. for PACS Collaboration	arXiv:2311.16755 Proceedings of Science	令和 5 年 11 月

2. 国際会議・シンポジウムにおける口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名（所属機関）	発表した場所（学会名等）	発表した時期
1	$ V_{us} $ from kaon semileptonic form factor in $N_f = 2+1$ QCD at the physical point on $(10 \text{ fm})^4$ [口頭]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	Lattice2023	令和 5 年 7 月 31 日～8 月 4 日
2	Equivariant transformer is all you need [口頭]	Akio Tomiya (大阪国際工科大学)	Lattice2023	令和 5 年 7 月 31 日～8 月 4 日
3	Comparison with model-independent and dependent analyses for pion charge radius [口頭]	Kohei Sato (筑波大学)	Lattice2023	令和 5 年 7 月 31 日～8 月 4 日
4	Hadron form factors from PACS10 configurations [口頭・招待講演]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	Lattice QCD and Probes of New Physics	令和 5 年 8 月 7 日～11 日
5	Implementation of lattice QCD in the Julia language [口頭]	Akio Tomiya (大阪国際工科大学)	日本物理学会第 78 回年次大会	令和 5 年 9 月 16 日～19 日

6	Light hadron spectrum of 2+1 flavor QCD on PACS10 configurations [口頭]	Naoya Ukita (筑波大学)	日本物理学会第 78 回 年次大会	令和 5 年 9 月 16 日～19 日
7	Kaon semileptonic form factor from the PACS10 configuration of the 256 ⁴ lattice [口頭]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	日本物理学会第 78 回 年次大会	令和 5 年 9 月 16 日～19 日
8	Computation of proton decay matrix elements on top of the physical point [口頭]	Yasumichi Aoki (理研), Yoshinobu Kuramashi (筑波大学), Eigo Shintani (筑波大学), Ryutaro Tsuji (東北大学)	日本物理学会第 78 回 年次大会	令和 5 年 9 月 16 日～19 日
9	Model-dependent and independent analysis and comparison for pion charge radius [口頭]	Kohei Sato (筑波大学)	日本物理学会第 78 回 年次大会	令和 5 年 9 月 16 日～19 日
10	Search for physics beyond the standard model from 2+1 +1 Flavor Lattice QCD with the Physical Quark Masses [ポスター]	Naoya Ukita (筑波大学)	15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences	令和 5 年 10 月 1 日～2 日
11	Systematic error of model-independent method for pion charge radius [ポスター]	Kohei Sato (筑波大学)	15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences	令和 5 年 10 月 1 日～2 日
12	Integrating Machine Learning into Lattice QCD [口頭・招待講演]	Akio Tomiya (大阪国際工 科専門職大学)	15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences	令和 5 年 10 月 1 日～2 日
13	「富岳」、これからの利用と 若手プロジェクト・リーダーによる先進アプリ課題への期待 [口頭・パネルディスカッション]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	第 6 回 HPCI コンソー シアムシンポジウム	令和 5 年 10 月 25 日
14	Calculations using PACS10 configuration [口頭]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning	令和 5 年 11 月 23 日～25 日

15	Self-learning Monte Carlo method with equivariant Transformer [口頭・招待講演]	Yuki Nagai (原子力研究機構)	Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning	令和 5 年 11 月 23 日～25 日
16	Wilson-Clover quark solver implementation on the supercomputer Fugaku [口頭・招待講演]	Ken-ichi Ishikawa (広島大学)	Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning	令和 5 年 11 月 23 日～25 日
17	How to directly calculate pion charge radius without fitting [口頭・招待講演]	Kohei Sato (筑波大学)	Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning	令和 5 年 11 月 23 日～25 日
18	超大規模格子 QCD による新物理探索と次世代計算に向けた AI 技術開発 [ポスター・招待]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	第 3 回「富岳百景」シンポジウム	令和 5 年 12 月 1 日
19	『富岳』成果創出加速プログラム：プロジェクト紹介 [口頭・招待講演]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	成果創出加速プログラム 4 課題合同シンポジウム	令和 5 年 12 月 18 日～20 日
20	大規模格子 QCD 計算による標準模型を超えた物理探索 [口頭]	Takeshi Yamazaki (筑波大学)	成果創出加速プログラム 4 課題合同シンポジウム	令和 5 年 12 月 18 日～20 日
21	自己学習モンテカルロとトランスフォーマー [口頭]	Akio Tomiya (大阪国際工科専門職大学)	成果創出加速プログラム 4 課題合同シンポジウム	令和 5 年 12 月 18 日～20 日