物理学と計算機

横倉 淳也

2024 年 5 月 19 日

Physics Lab. 2024 計算物理班

目次

はじめに

物理学の営み

物理理論は実験によって検証される

物理学の営み

物理理論は実験によって検証される

検証するには理論的予測 (予言) が必要

物理学の営み

物理理論は実験によって検証される

検証するには理論的予測 (予言) が必要

- 定性的な予言……現象の存在・非存在
  例：β 崩壊のエネルギーのばらつきから未知の粒子 (現ニュートリノ) を予言 (パウリ、1930 年)

物理学の営み

物理理論は実験によって検証される

検証するには理論的予測 (予言) が必要

- 定性的な予言. . . . . . 現象の存在・非存在
  例：β 崩壊のエネルギーのばらつきから未知の粒子 (現ニュートリノ) を予言 (パウリ、1930 年)
- 定量的な予言. . . . . . いわゆる理論計算
  例：一般相対論は重力による光の曲がりをニュートン力学の 2 倍と予測
  $\rightarrow$ 皆既日食での検証 (1919 年)

物理学の営み

物理理論は実験によって検証される

検証するには理論的予測 (予言) が必要

- 定性的な予言……現象の存在・非存在
  例：β 崩壊のエネルギーのばらつきから未知の粒子 (現ニュートリノ) を予言 (パウリ、1930 年)
- 定量的な予言……いわゆる理論計算
  例：一般相対論は重力による光の曲がりをニュートン力学の 2 倍と予測
  $\rightarrow$ 皆既日食での検証 (1919 年)

しかし、(特に定量的な) 予言をするのは今や大変……

予言は大変

- 実験の精度が向上し、要請が厳しくなった
  例：素粒子物理における基本的な物理定数
  例の例：電子の異常磁気モーメント $\frac{g-2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,62(12)$[1]

予言は大変

- 実験の精度が向上し、要請が厳しくなった
  例：素粒子物理における基本的な物理定数
  例の例：電子の異常磁気モーメント $\frac{g-2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,62(12)$[1]
- (量子) 多体系や (量子) 場の理論の計算は人力 (手計算) では無理
  解析解は困難、数値解でも人の手に余る量
  定性的な予言のための単純化した模型でもなお厳しい

予言は大変

- 実験の精度が向上し、要請が厳しくなった
  例：素粒子物理における基本的な物理定数
  例の例：電子の異常磁気モーメント $\frac{g-2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,62(12)$[1]
- (量子) 多体系や (量子) 場の理論の計算は人力 (手計算) では無理
  解析解は困難、数値解でも人の手に余る量
  定性的な予言のための単純化した模型でもなお厳しい

ここで計算機の出番！

予言は大変

- 実験の精度が向上し、要請が厳しくなった
  例：素粒子物理における基本的な物理定数
  例の例：電子の異常磁気モーメント $\frac{g-2}{2} = 0.001\,159\,652\,180\,62(12)$[1]
- (量子) 多体系や (量子) 場の理論の計算は人力 (手計算) では無理
  解析解は困難、数値解でも人の手に余る量
  定性的な予言のための単純化した模型でもなお厳しい

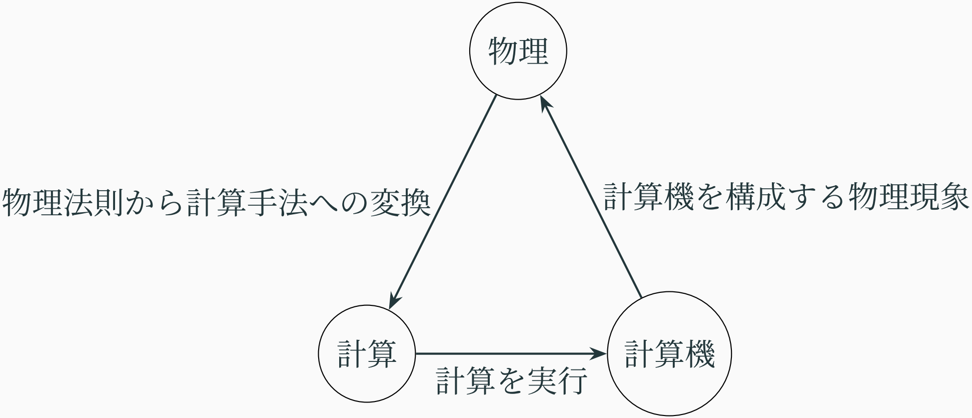
ここで**計算機**の出番！

物理学における計算機の立場 (あるいは計算物理の理念)

理論を元に (比較的) 現実的な系の振る舞いをエミュレートし、実験による検証のつてを与える。

計算物理の 3 要素

物理・計算・計算機



物理と計算

物理学類型

物理系のざっくりした分類

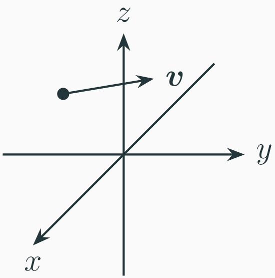
古典粒子　古典場　量子粒子　量子場

(量子粒子とは普通言わない……)

(異論はいっぱいあるはず)

古典粒子

イメージ：点 (質点) が位置と速度を持ち、お互いに力をかけ合っている



ある時刻の状態を完全に決めるには、質点 1 個に $2d$ 個のパラメータが必要 (d 個が位置、d 個が速度)→ 全体で $O(dN)$

古典粒子

イメージ：点 (質点) が位置と速度を持ち、お互いに力をかけ合っている

パラメータ数：$O(dN)$

典型問題：N 体の質点の動き (時間発展) を考える (N は一般にかなり大きい)
例：分子動力学法、重力多体問題
→ 時間についての微分方程式になる (例：ニュートン力学 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}$、$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{F}$)

古典粒子

イメージ：点 (質点) が位置と速度を持ち、お互いに力をかけ合っている

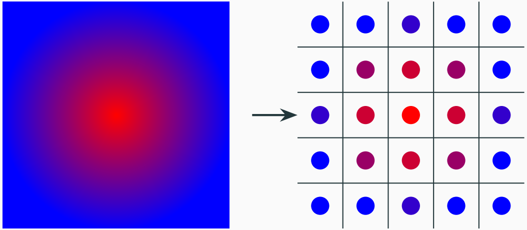
パラメータ数：$O(dN)$

典型問題：N 体の質点の動き (時間発展) を考える (N は一般にかなり大きい)
$\to$ 時間についての微分方程式になる (例：ニュートン力学 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}$、$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{F}$)

微分方程式は (かなり) どうにかなる、問題は力 $\boldsymbol{F}$ の計算
普通考える力は 2 個の質点の間に働く $\to$ 全てのペアを考慮する $\to$ $O(dN^2)$
遠くの質点から小さな力がたくさん $\to$1 つの重い質点で近似 $\to$ $O(dN\log N)$

古典場

イメージ：空間の各点に色/高さ/(ここに好きなものを入力) がある



必要なパラメータは無限個？ → ちょっとズルして、空間を各方向 L 分割して、L^d 個の箱ということにする (離散化)→ $O(L^d)$

古典場

イメージ：空間の各点に色/高さ/(ここに好きなものを入力) がある

パラメータ数：$O(L^d)$

典型問題：

- 時間発展 (再び) 例：電磁場解析
- ある静的な状態 例：静電場・固有モード

空間 (+時間) の微分方程式になる
微分方程式は (まだ) どうにかなる
or 微分方程式を離散化していじって行列計算に持っていく

古典場

イメージ：空間の各点に色/高さ/(ここに好きなものを入力) がある

パラメータ数：$O(L^d)$

典型問題：

- 時間発展 (再び) 例：電磁場解析
- ある静的な状態 例：静電場・固有モード

位置ではなく周波数で離散化すると相性がいい (良い近似になる) 時もある
または、扱いやすい関数で近似
上 2 つはむしろ量子粒子の計算でよく見かける

量子粒子 (量子力学的粒子)

イメージ：

(1) いくつかの状態の混合
(2) だいたい古典場 (粒子が波なので [要出典])

パラメータ数は

(1) 1 粒子の状態が K 個として、$K^{O(N)}$
(2) $K \to L^d$ で対応するので、$L^{O(dN)}$

ここからパラメータが指数で増えるようになる (次元の呪い)

量子粒子 (量子力学的粒子)

イメージ：

(1) いくつかの状態の混合
(2) だいたい古典場 (粒子が波なので [要出典])

パラメータ数：$K^{O(N)}$、$L^{O(dN)}$

典型問題：時間発展、(エネルギー) 固有値/固有状態　例：分子軌道
(ただし、エネルギー固有状態がわかれば時間発展は簡単にわかるので、普通はしない (はず))

- (2) の場合かつ波動関数的な捉え方だと微分方程式
- パラメータ数がまともな範囲なら行列計算
- まともでなかったら多重積分に直す

量子場

イメージ：量子粒子の時の (1) の状態が古典場の状態と対応 (古典場の全ての状態の混合)

古典場のパラメータが $O(L^d)$ 個なので、古典場の状態は $D^{O(L^d)}$
もはやかなり荒い計算でも次元の呪いが効果を発揮する

試験：$d = 3$、$L = 4$、$D = 4$ の時

$$D^{L^d} = 4^{(4^3)} = 4^{64} \sim 10^{38} \tag{1}$$

V.S. 現状最高のスパコンの性能……秒間 10^{18} 回の計算能力 [要出典]
$\rightarrow$ ざっくり 10^{12} 年

量子場

イメージ：量子粒子の時の (1) の状態が古典場の状態と対応 (古典場の全ての状態の混合)

古典場のパラメータが $O(L^d)$ 個なので、古典場の状態は $D^{O(L^d)}$
もはやかなり荒い計算でも次元の呪いが効果を発揮する

よって常に多重積分に持ち込む

用途：もっぱら素粒子物理

物理学類型とデータ量

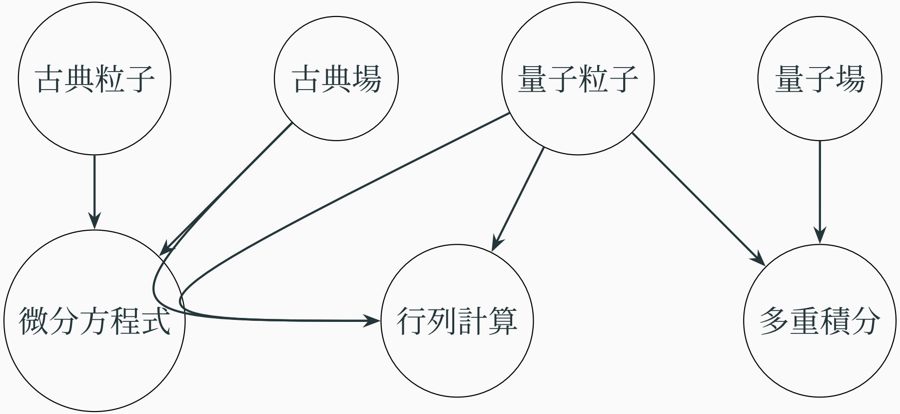
物理系のざっくりした分類

類型	状態の指定に必要なパラメータ数	厭さ (計算目線)
古典粒子	$O(dN)$	そんなに
古典場	$O(L^d)$	多少
量子粒子	$L^{O(dN)}$	かなり
量子場	$D^{O(L^d)}$	最悪

(ただし、空間は 1 次元毎に L 点、場の値は各値について D 点で離散化するものとし、粒子系では N 粒子あると考える)

古典場でもかなり厳しかったが、量子力学の導入で指数的になった ^o^

物理系 → 頻出の数値計算



微分方程式

計算機は有限個の実数 (もどき) しか扱えない $\rightarrow$ 微分方程式を真に解くことはできない

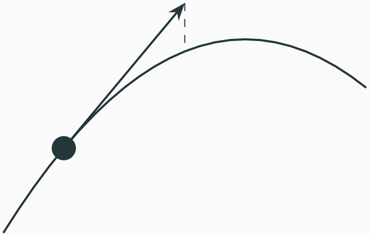
代わりに、関数のパラメータについて差分化して扱う

$$
\begin{aligned}
f'(t) &= g(t) \\
\frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} &\simeq g(t) \\
f(t+\Delta t) - f(t) &\simeq g(t)\Delta t \\
f[T+1] - f[T] &\simeq g[T]\Delta t \quad (t = T\Delta t)
\end{aligned}
$$

微分方程式

計算機は有限個の実数 (もどき) しか扱えない → 微分方程式を真に解くことはできない

代わりに、関数のパラメータについて差分化して扱う



差分による真の解からのズレを補正する方法がいろいろある

例：オイラー法 (補正なし)、ルンゲ・クッタ法、シンプレクティック積分法

行列計算

行列計算：解きたい問題はだいたいいつも一定

- 普通に行列積 AB $\to$ 計算機側の努力の面が強い
- 線型方程式 (連立一次方程式) $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ $\to$LR 分解
- 固有値問題 $A\boldsymbol{v} = \lambda$ $\to$ べき乗法・ヤコビ法 etc.……
  (非常に重要なのに厳密には出せないので手法が多い)

[発展] テンソルネットワーク

多重積分

基本は区分求積だが、積分変数に対して総和に必要な要素が指数で増える
(計算にとっての次元の呪い)

多重積分

基本は区分求積だが、積分変数に対して総和に必要な要素が指数で増える
(計算にとっての次元の呪い)

全部足さなくても...

アイデア 1 ランダムに一部を取ってきてそれで全体を推測できるっしょ (乱択サンプリング)

アイデア 2 積分する値が大きいところだけ取ってくればいいっしょ (重点サンプリング)

→(狭い意味での) モンテカルロ法

計算と計算機

計算と計算機を分ける理由

計算のアルゴリズムを考える時、理想化された計算機を考えている

- メモリは無限

計算と計算機を分ける理由

計算のアルゴリズムを考える時、理想化された計算機を考えている

- メモリは無限
- メモリへのアクセス時間は均一

計算と計算機を分ける理由

計算のアルゴリズムを考える時、理想化された計算機を考えている

- メモリは無限
- メモリへのアクセス時間は均一
- 計算機は 1 台

計算と計算機を分ける理由

計算のアルゴリズムを考える時、理想化された計算機を考えている

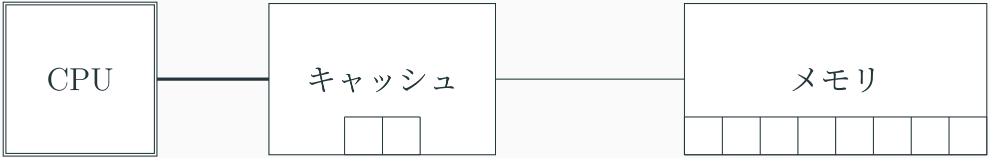
- メモリは無限
- メモリへのアクセス時間は均一
- 計算機は 1 台
- 定数倍の時間差は無視

実際の計算機は高速化のために泥臭いことをしている
$\rightarrow$ 相性の良い操作と悪い操作がある

例１・メモリアクセス

本当のメモリはCPUより遥かに遅い(約100倍)

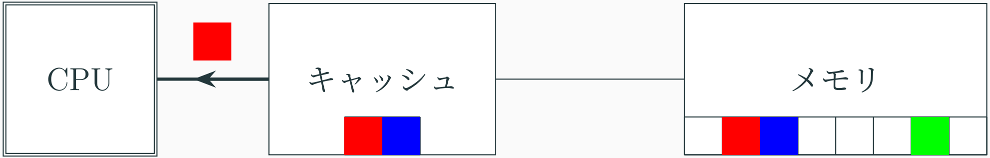
例1・メモリアクセス



本当のメモリは CPU より遥かに遅い (約 100 倍)

間にキャッシュメモリを設ける (速いが小さい)

例1・メモリアクセス



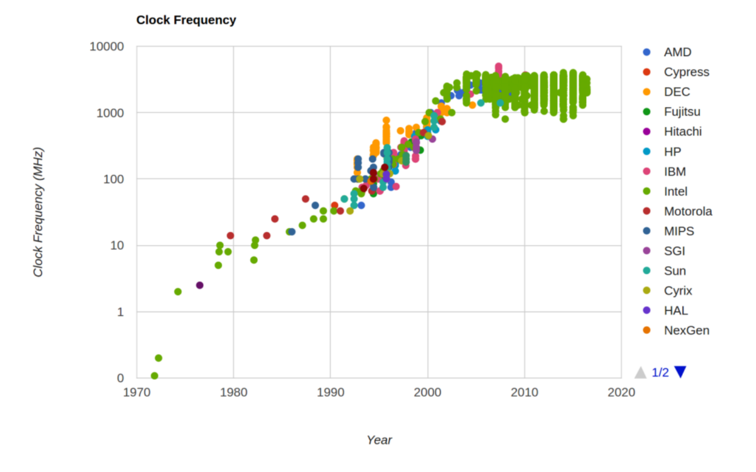
本当のメモリはCPUより遥かに遅い(約100倍)

間にキャッシュメモリを設ける(速いが小さい)

メモリを使った時に、近場にあるものをキャッシュメモリに置いておく
→ メモリの上で近い領域をできるだけ操作するべき

例 2・並列化

計算ユニット自体の高速化 (クロック向上) は限界 [2]



例 2・並列化

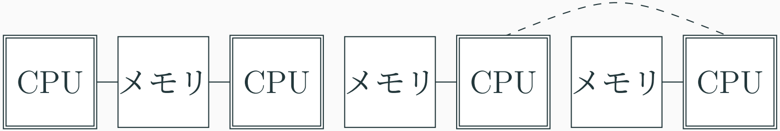
計算ユニット自体の高速化 (クロック向上) は限界 [2]

CPU CPU CPU CPU

単にユニットを複数用意して同時に動かせばたくさん計算できる (並列化)

例 2・並列化

計算ユニット自体の高速化 (クロック向上) は限界 [2]



単にユニットを複数用意して同時に動かせばたくさん計算できる (並列化)

メモリ共有 メモリアクセスの順番がばらつく
メモリ分離 計算結果をどう他のユニットに知らせるか

→ 並列化を考慮したプログラミングが必要 (割愛)

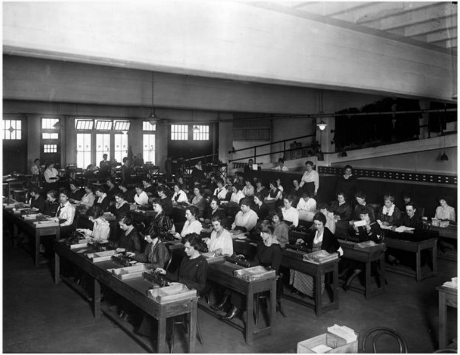
(GPGPU や FPGA も割愛)

計算機と物理

計算機の歴史

計算機 $\neq$ 半導体デジタルコンピュータ

〜20 世紀前半 人力！ (原義 computer)[3]



機械式計算機 ($\approx$ 電卓) も補助的に使う

計算機の歴史

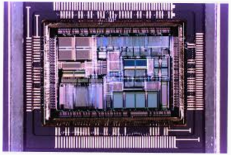
計算機 ≠ 半導体デジタルコンピュータ

〜20 世紀前半 人力！ (原義 computer)[3]
1920,30 年代 電気回路のアナログコンピュータが実用化 [4]

計算機の歴史

計算機 $\neq$ 半導体デジタルコンピュータ

〜20 世紀前半　人力！ (原義 computer)[3]
1920,30 年代　電気回路のアナログコンピュータが実用化 [4]
1940 年代　真空管のデジタルコンピュータ (いわゆるコンピュータの始まり)[5]
1950 年代　真空管をトランジスタで置換 [6]
1960 年代〜現在　トランジスタを 1 個のチップに載せる (集積回路)[7]

計算機の歴史

計算機 $\neq$ 半導体デジタルコンピュータ

〜20 世紀前半 人力！ (原義 computer)[3]
1920,30 年代 電気回路のアナログコンピュータが実用化 [4]
1940 年代 真空管のデジタルコンピュータ (いわゆるコンピュータの始まり)[5]
1950 年代 真空管をトランジスタで置換 [6]
1960 年代〜現在 トランジスタを 1 個のチップに載せる (集積回路)[7]
2010 年代〜 量子コンピュータ. . . . . . ？

量子コンピュータは胡乱ではない
(ここ数十年の計算機があまりに半導体一強だっただけ)

まとめ

まとめ

物理と計算

物理系の理論を噛み砕いて、数値計算の典型問題に持っていく

微分方程式・行列計算・多重積分

計算と計算機

計算機の事情を汲み取って相性よく高速に計算させる

キャッシュメモリ・並列計算

計算機と物理

物理現象を計算機に転用・応用する

人力 → 機械 → 電気回路 → 真空管 → 半導体 → 量子？

ご清聴ありがとうございました

参考文献

[1] R. L. Workman et al. (Particle Data Group), **"Review of Particle Physics"**, PTEP **2022**, 083C01 (2022) (cit. on pp. 9–12).

[2] Stanford VLSI Group, ***CPU DB: Clock Frequency***, http://cpudb.stanford.edu/visualize/clock_frequency (cit. on pp. 41–43).

使用画像

[3] Computer History Museum, ***Large-scale tabulating operation***, https://www.computerhistory.org/revolution/calculators/1/65/272, 2013 (cit. on pp. 45–48).

[4] Wikipedia, ***File:Analog Computing Machine GPN-2000-000354.jpg***, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Analog_Computing_Machine_GPN-2000-000354.jpg (cit. on pp. 46–48).

使用画像

[5] Wikipedia, ***FileRadio-tubes.jpg***, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Radio-tubes.jpg (cit. on pp. 47, 48).

[6] 秋月電子通商, 『**トランジスタ 2SA1015GR 50V150mA**』, https://akizukidenshi.com/catalog/g/g100882/ (cit. on pp. 47, 48).

[7] 東京大学総合研究博物館, ***MPU (GMICRO300)***, https://umdb.um.u-tokyo.ac.jp/DPastExh/Publish_db/1997DM/DM_CD/DM_CONT/SILICON/HOME.HTM (cit. on pp. 47, 48).