

戦略分野5 「物質と宇宙の起源と構造」

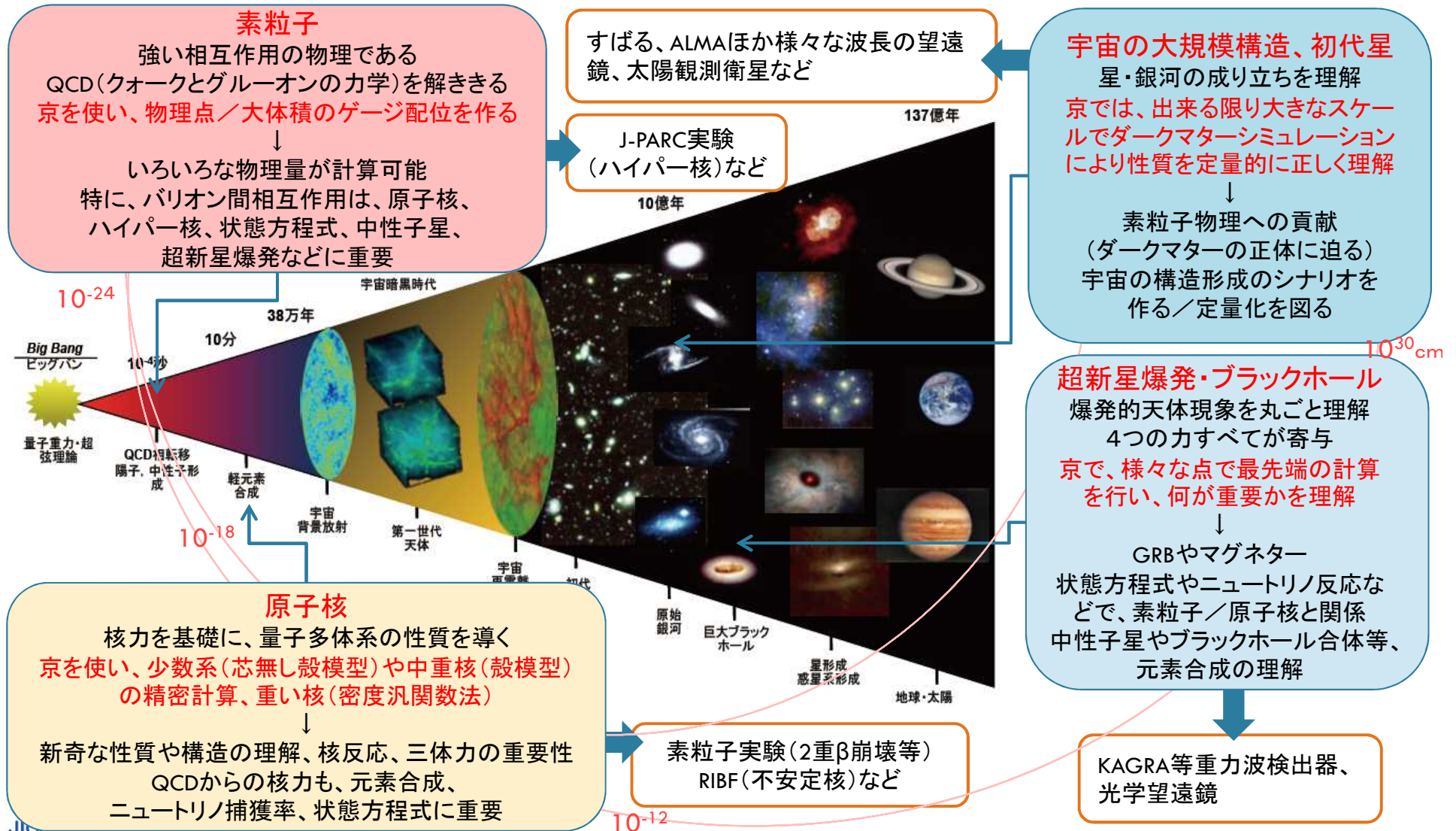
統括責任者 青木慎也(筑波大・京都大)

- 概要：戦略目標、研究開発課題、推進体制
- 研究開発課題：実施計画と最終目標、成果、独創性・優位性、成果の利活用、京の利用状況
- 体制構築：同上
- 予算額の推移

戦略目標

ビッグバンに始まる宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、複数の階層を繋ぐ計算科学的手法で統一的に理解する

2



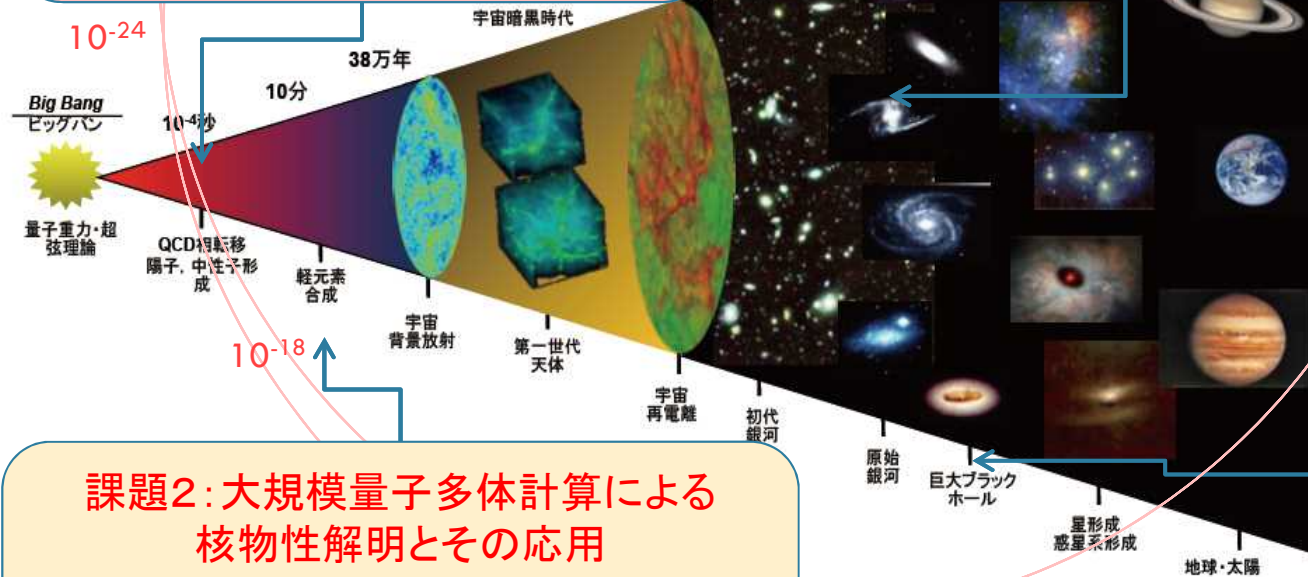
研究開発課題

物質と宇宙の起源と構造での未解明なキープロセスの解明のための4課題

3

課題1: 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

物質の根源を成す素粒子“クォーク”の運動を、格子ゲージ理論の手法を用いて近似なしに解き、素粒子・原子核物理学における長年の謎を一挙に解決



課題2: 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

格子QCDにより得られた核力などを用いて原子核の量子構造を第一原理から決定

課題4: ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成

ダークマターによる構造形成について、世界レベルの2桁大きな粒子数でシミュレーションし、世界初、最小質量から銀河団スケールまで適用可能な理論モデルを構築

課題3: 超新星爆発およびブラックホールの誕生過程の解明

空間的対称性を仮定せず、ニュートリノやスペクトルまで考慮した輻射流体輸送計算を世界に先駆けて行い、ニュートリノ加熱シナリオに基づく爆発機構を解明

運営体制

4



計算基礎科学連携拠点

Joint Institute for
Computational Fundamental Science

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、国立天文台

拠点長: 青木慎也(筑波大・京都大)

アドバイザー委員会

(敬称略: 宇川彰、江口徹、岡真、小柳義夫、佐藤勝彦、
土岐博、野崎光昭、平尾公彦、観山正見)

運営委員会

青木慎也、梅村雅之、矢花一浩、佐藤三久、朴泰祐、櫻井哲也、橋本省二、石川正、湯浅富美子、
牧野淳一郎、富阪幸治、蔵増嘉伸、初田哲男、大塚孝治、中務孝、柴田大、松元亮治

副拠点長(研究開発): 牧野淳一郎(東工大)

研究開発課題(1~4)

研究開発課題責任者

副拠点長(推進体制): 橋本省二(KEK)

計算科学技術推進体制の構築
(計算インフラ、人材育成、広報)

企画運営チーム

協力機関

(東京大学、京都大学基礎物理
学研究所、大阪大学核物理研究
センター、理化学研究所仁科加
速器研究センター、千葉大学、東
京工業大学)

総メンバー: 160名



計算基礎科学連携拠点

Joint Institute for
Computational Fundamental Science

研究開発課題の実施計画と最終目標

5

	前半(H23～H25上)	後半(H25下～H27)	最終目標
当初計画	① コード開発・最適化 各種テスト	ゲージ配位生成・計算開始	計算・実験比較
	② コード開発・サイエンスラン	アルゴリズム改良・サイエンスラン	計算・エクス準備
	③ コード開発	サイエンスラン	
	④ 並列化・コード開発	コード実装・最適化・サイエンスラン	サイエンスラン・エクス準備
現状	<実施内容> 全体的には順調に進捗。 「京」の計算が若干遅れている課題があるが、「京」が混雑しているため、思ったように計算ジョブが実行されないことが一因。「京」の「専有利用」や他の計算機利用で現状は対応。		未解明の鍵となるプロセスの解明のブレークスルー クォークの運動を、格子ゲージ理論で近似なしに解き、大型実験物理学の基礎提供 ①
	<見直した計画> ② 3体力効果の探求を追加 ③ 対象を超新星爆発現象から連星中性子星の合体に変更 ④ 天体ダイナモシミュレーションを追加 全体の計画は変更なし		原子核の量子構造を第一原理から決定し、核物性データを提供 ②
			一般相対論的輻射流体コードや6次元ボルツマン解法を含む輻射流体コード独自開発で世界をリード ③
			宇宙における構造形成、第一世代天体・銀河形成の過程解明 ④

研究開発課題の成果

6

<課題1>

- 物理点での大規模格子QCDシミュレーションにより、**クォーク質量とバリオン間相互作用の決定を可能とする高精度を達成**

<課題2>

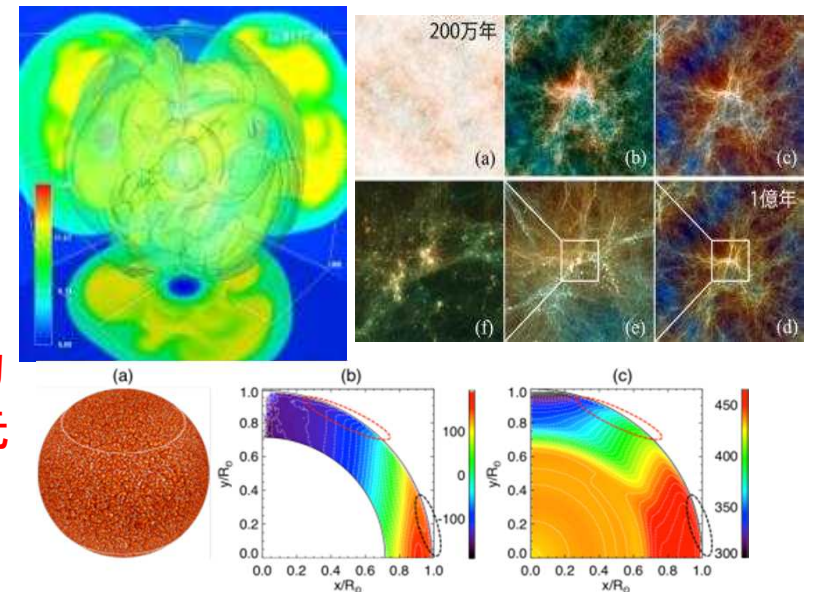
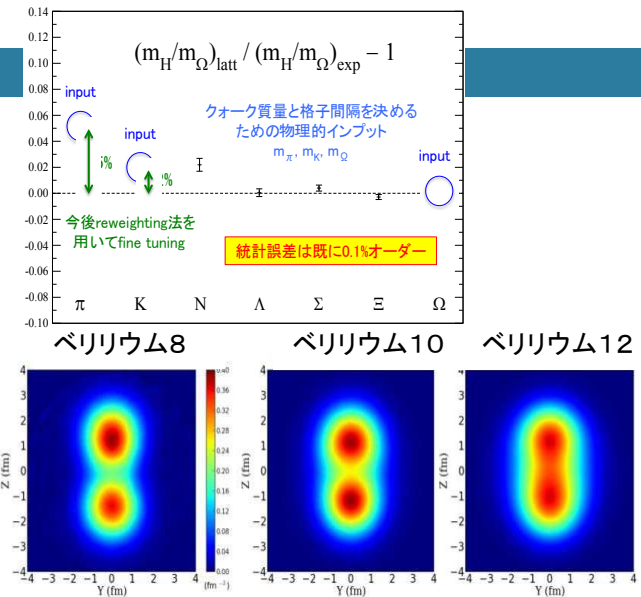
- ベリリウム同位体における**クラスター構造の発見及び消滅の第一原理的発見**
- 中性子過剰エキゾチック中重**原子核での形の進化の系統的予言**

<課題3>

- 空間3次元の輻射流体シミュレーションにより、超新星爆発機構の解明に資する爆発現象の再現に成功**

<課題4>

- 「京」のほぼ**フルシステム**を用いて、約2兆個の**ダークマター粒子の重力進化の計算に成功**
- 世界で初めて太陽の対流層の高解像度3次元**計算を実現**



研究開発課題の 独創性・優位性、成果の利活用

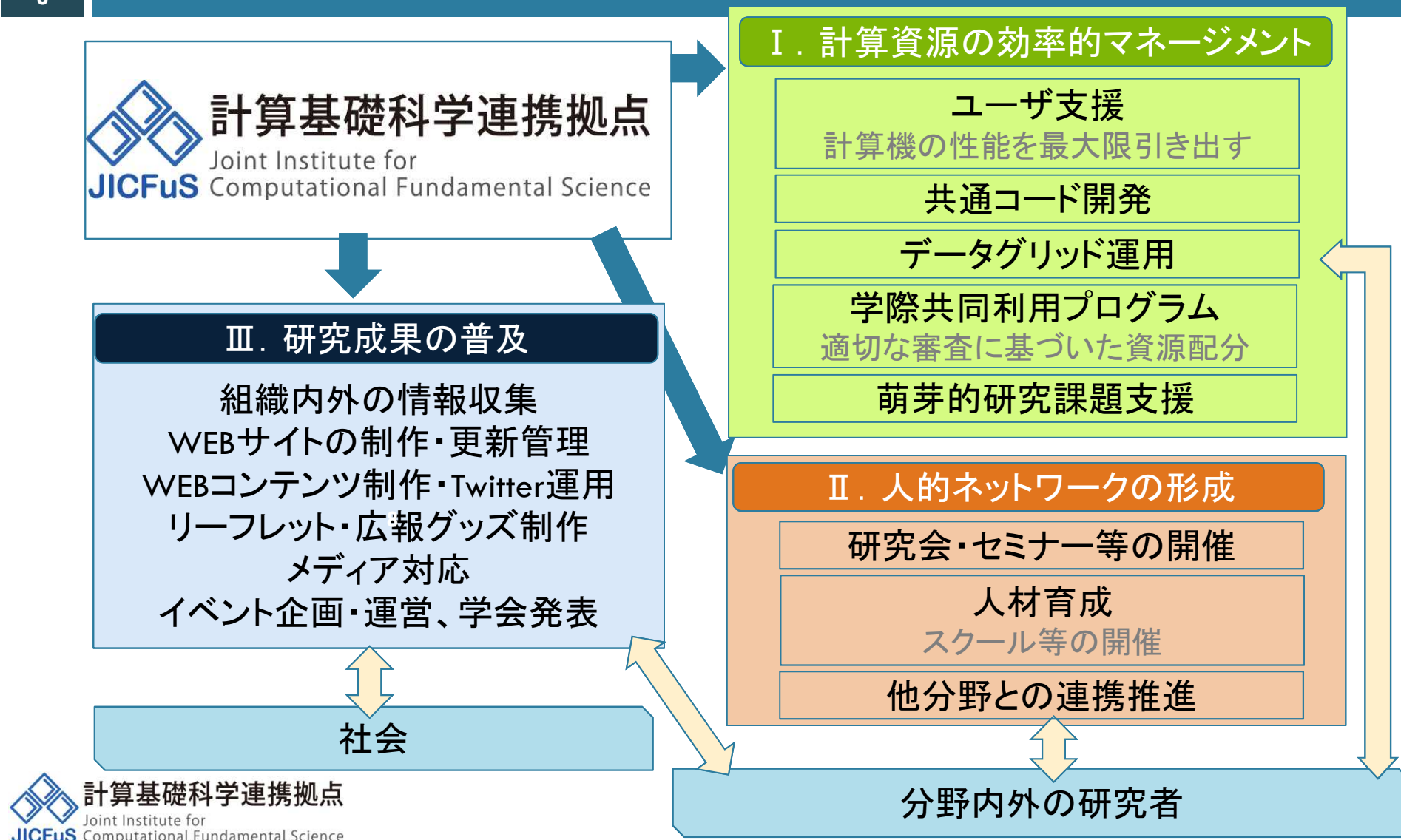
7

	課題1	課題2	課題3	課題4
独創性 優位性	従来比約10倍の精度向上により、電磁相互作用やアップクォークとダウンクォークの質量差から生じる1%レベルの物理的効果を探る微細計算が可能、クォーク質量を精密決定	独自の「モンテカルロ殻模型」による計算を「京」で実行することにより、ハミルトニアン行列の固有値問題の次元が階乗的に増加する困難を克服し、他グループの次元の上限 10^{10} を上回る 10^{16} 次元の計算に成功	一般相対論的磁気流体計算は、京コンピュータの高い性能を用いて、これまでよりも2～3倍の高い精度のシミュレーションを実行することで未解決の問題を解決できうる点で優れる	ダークマター微細構造の超大規模シミュレーションは、同様のコード開発グループは世界に複数あるが、「京」で達成したコードの性能は、BG/Q等の「京」を上回るマシンでの他グループの性能を2倍以上
成果の利活用	生成したゲージ配位は幅広い物理量計算に利用可能、成果発表後は分野内コミュニティへの無償提供を予定	理研RIBFなど世界の重イオン加速器によるRIBビーム実験によって拓かれつつあるエキゾチック原子核の物理に対して理論的な予言や解析を提示	得られたニュートリノの光度曲線や重力波の波形は、ニュートリノや重力波望遠鏡による宇宙観測計画における理論テンプレートとして活用予定	シミュレーション結果の動画を作成して公開し、大学・科学館等の公開講演会などにおいて利用可能な形で提供(課題3も)

計算科学推進体制の構築

「京」・共同利用計算機を含めた共同利用スキームの構築と
ユーザ支援、研究・人的ネットワーク強化、成果の普及

8



体制構築の実施計画と最終目標

9

	前半(H23～H25上)	後半(H25下～H27)	最終目標
当初計画	体制整備	体制維持・充実	体制の継続
計算資源の効率的 マネージメント	ユーザ支援構築	ユーザ支援事例紹介	手法等を分野内外で共有
	共通コード設計・公開	機能充実・最適化	国内標準・分野内利用可能
	データグリッド運用・拠点追加・容量拡大		研究効率化、他分野適応
	学際共同利用プログラム公募		審査・資源配分の枠組構築
	萌芽的研究課題の決定	研究推進 中間評価	Post京課題創出・体制構築
		最終評価	
のフネ人形1つのプロジェクト	人材育成スクール・講習会開催		研究者の次世代確立
	研究会・セミナー・滞在型・全体WS開催		研究動向の全体共有
果研究の普及	WEB公開	WEB定期記事・随時update	分野内外情報流通円滑化
	パンフ作成・イベント開催・紹介映像作成		理解ある層の拡大
現状	当初から順調に様々なプロジェクトが始動・進捗	<見直した計画> 共同利用プログラム、ユーザ支援は宣伝・利用拡大	

体制構築の成果

順調に様々なプロジェクトが動いている

10

＜計算機資源の効率的なマネジメント＞

- ユーザ支援、共通コード: 利用者の研究活動の進展等に有効に機能
- データグリッド運用: 拠点・容量ともに順調に拡大
- 萌芽的研究課題(次頁に一覧): ここから課題4に太陽プラズマのシミュレーションを追加、成果出始める

＜人的ネットワークの形成＞

- 人材育成: プログラムが充実(4件)、参加者(延215名)も集まり、素粒子・原子核・宇宙にまたがる横断的人材が育ちつつある

＜研究成果の普及＞

- 広報: 専任者を雇用、体系的な広報戦略により活動、特に「クオーク・カード・ディーラ」という量子色力学の理解をうながすカードゲームが好評、3年間で8000人がプレイ



萌芽的研究課題一覧

11

- 量子色力学の精密計算による標準模型を超える物理の探索
- 量子色力学の真空におけるCP対称性の破れの研究
- 複合ヒッグス模型の数値シミュレーションによる解析
- 超対称理論の数値シミュレーションによる解析
- 摂動的手法を用いた標準模型を超える物理の探索
- 有限温度QCD相転移の精密解明
- 重イオン反応統合シミュレーションによるクォーク・グルーオン・プラズマの解明
- 有限密度格子QCDの挑戦的研究
- 量子色力学に基づいた核子、中間子分光と反応機構の解明
- 少数粒子系精密計算による軽い原子核およびハイパー核構造の解明
- 重元素原子核の構造・反応の数値シミュレーションによる解析
- 中間エネルギー重イオン反応と低密度核物質状態方程式の解明
- 低エネルギー核反応・多核子共鳴機構の解明
- 高密度核物質の性質と爆発的天体現象・元素合成過程の解明
- 原始太陽系星雲からの微惑星の形成プロセスの解明
- ガス惑星の形成の統一モデルの構築
- 星団形成の輻射磁気流体シミュレーション
- 超巨大ブラックホールの成長シミュレーション
- 銀河バルジの形成シミュレーション
- 超巨大ブラックホールと銀河バルジの共進化シミュレーション
- 高精度の磁気流体・輻射磁気流体計算手法の開拓
- 降着円盤の時間変動とジェット形成機構のシミュレーションによる解明
- 高エネルギー粒子加速機構のシミュレーションによる解明
- 太陽圏プラズマ現象の基礎過程の解明
- 数値解析手法に基づく大規模並列処理高速化に関する研究
- メモリアクセス及び通信最適化に基づく大規模並列処理高速化に関する研究
- 広域データ共有に基づくデータ及びコード管理に関する研究

体制構築の 独創性・優位性、成果の利活用

12

＜計算機資源の効率的なマネジメント＞

- **ユーザ支援**: システム・事例公開に独自性があり、**他分野との連携や拡大により活用可能**
- **共通コード**(格子QCD、宇宙磁気流体プラズマ): 分野振興、特に**裾野拡大**に有効
- **データグリッド運用、資源配分**: 格子QCDで開発・運用し本プロジェクトで拡充してきたデータグリッド運用や協力機関の計算資源の一部提供により公募・審査を行う「学際共同利用プログラム」は独自性があり、**全国・全分野のHPCIの補完、HPCIでの活用可能**

＜研究成果の普及＞

- **広報**: これまでの大学・研究機関にない、**情報マネジメント**の観点から**広報戦略**を練り、**PR体制を構築**

＜全体＞

- 研究支援ではなくマネジメント専門職としてプロジェクトマネージャーや広報マネージャーを雇用し、研究者を加えた**専門家集団としてプロジェクト運営・広報活動**を行っている

分野5 物質と宇宙の起源と構造

格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

(課題代表者: 筑波大学・藏増 嘉伸)

研究概要

格子QCD計算はクォーク→ハドロン(陽子・中性子など)→原子核という素粒子の世界の階層構造を第一原理に基づいて定量的に解明する礎を与える。近年の計算機の発展およびアルゴリズムの開発・改良により、格子QCD計算は誤差1%レベルの精密計算の時代を迎えつつある。本課題では、大きな空間体積で物理的なクォーク質量(物理点)を用いた大規模格子QCDシミュレーションを実行し、得られたゲージ配位を用いてQCDの基本パラメータであるクォーク質量(m_u 、 m_d 、 m_s)の精密決定を行うとともに、軽い原子核の直接構成を行う。更に、既知の核力を再現した後、未解明のバリオン間相互作用を決定することによって今後のJ-PARC実験でそれを確認するとともに、原子核の第一構造計算のインプットとすることを目指す。

研究体制

2つのサブテーマからなり、後者は前者で生成したゲージ配位を用いてバリオン間ポテンシャルの決定を行う。

1. 物理点での1+1+1フレーバー($m_u \neq m_d \neq m_s$) QCD+QEDシミュレーション

研究総括(筑波大・藏増)、ゲージ配位生成とクォーク質量決定(広島大・石川、筑波大・浮田)、原子核の直接構成(名大・山崎)

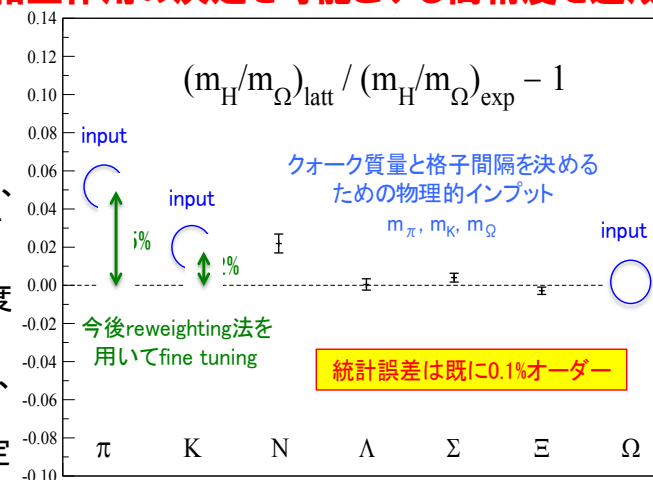
2. バリオン間ポテンシャルの決定

研究総括(理研・初田)、核力の再現(筑波大・石井)、ハイペロン力の決定(筑波大・根村、筑波大・佐々木)、三体力の解明(理研・土井)

成果内容と科学的又は社会的意義

物理点での大規模格子QCDシミュレーションにより、クォーク質量とバリオン間相互作用の決定を可能とする高精度を達成

格子QCDシミュレーションでは、モンテカルロ法によってゲージ配位を生成し、その配位を用いて様々な物理量を計算する。その意味で、ゲージ配位生成は格子QCD計算の根幹となる重要性を持つ。本課題では、Domain-Decomposed Hybrid Monte Carlo (DDHMC) と呼ばれる分子動力学法を組み入れたモンテカルロ法を用いて、 96^4 格子サイズ、0.1fmの格子間隔での2+1フレーバー($m_u = m_d \neq m_s$) QCDのシミュレーションを実行している。右図は、これまで得られたハドロン(クォークの複合粒子)質量の計算結果を Ω バリオン質量(m_Ω)を基準として実験値と比較したものである。既に、0.1%オーダーの統計誤差に到達していることがわかる。当初計画では、平成25年度末を目処にゲージ配位生成を終え、平成26年度にゲージ配位を用いた物理量計算(クォーク質量の決定、軽い原子核の直接構成、バリオン間ポテンシャルの決定など)を行う予定であったが、既にかかなりの高精度を達成しており、今後の物理量計算も予定どおりの成果が出せるものと期待できる。なお、生成したゲージ配位幅広い物理量計算に利用できるため、成果発表後はコミュニティへの無償提供を予定している。



分野5 物質と宇宙の起源と構造

大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

(課題代表者: 東京大学・大塚 孝治)

研究概要

原子核の核子多体系としての量子構造について、①重い原子核についても核力に直接基づいての構造解明が進む、②構造解明を受けて、原子力などで必要な核物性データ(スズ、ヨウ素のアイソトープなどから幾つか)が提供される、③構造解明を受けて、天体での爆発的要素合成に使われる核物性データ($N=82$ アイソトーンなど)が提供される。

以上のように、様々な物質の構成要素である原子核の成り立ちが解明できるだけでなく、放射性元素の性質を次世代スパコンにより予言する事が可能になり、放射性廃棄物処理などの人類の課題の解決に役立てる。

研究体制

課題代表者が所属している東京大学原子核科学研究センターに最大5名の特任教員・研究員を雇用し、東京大学物理学専攻原子核理論グループと共同で研究拠点を形成している。この拠点において、京計算機向けのプログラム開発、京計算機を用いた微視的核構造計算の研究を進めている。また、鈴木俊夫教授(日本大)・本間道雄教授(会津大)とベータ崩壊の研究、高柳和雄教授(上智大)・岡本良治名誉教授(九工大)等との有効相互作用の研究、水崎高浩教授(専修大)・宇都野穰研究副主幹(JAEA)等とモンテカルロ殻模型法の開発をおこなっている。特に第一原理計算では、アイオワ州立大学のJames Vary教授のグループとの国際的な共同研究を進めている。

成果内容と科学的又は社会的意義

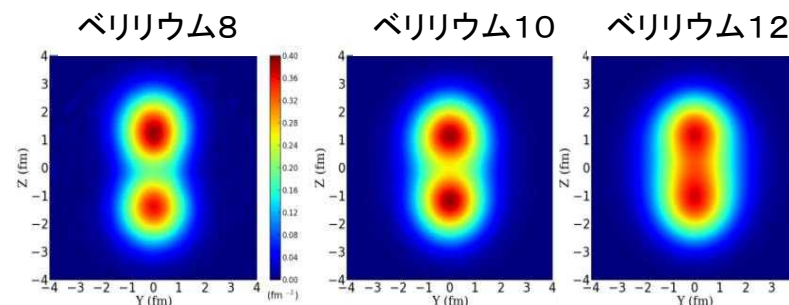
独自の微視的構造計算手法であるモンテカルロ殻模型をエネルギー分散による外挿法と組み合わせることなどの方法論の開発と、京計算機における大規模並列にも対応したコード開発を行うことにより、精度が高い原子核構造計算をおこなった。

ベリリウム同位体におけるクラスター構造の発現及び消滅の第一原理的発見

この手法を軽い核の第一原理的な計算に応用して、ベリリウム同位体の構造計算をおこなった。さらに、多体相関を取り込んだうえで物体固有座標系の核構造を視覚的に調べるまったく新しい手法を提唱した。これによりベリリウム同位体においてクラスター構造が発現し、中性子過剰側に移るにしたがってクラスター構造が消滅していく様子を第一原理的に議論することに成功した。

中性子過剰エキゾチック中重原子核での形の進化の系統的予言

中重核領域における原子核の構造を微視的に計算し、質量数78までのニッケル同位体近傍において、中性子過剰になるにしたがって原子核の形が変化していく様子を記述、予言した。とくにニッケル68において、低エネルギー領域に球形、ラグビーボール型変形、ミカン型変形の3つの四重極集団運動状態が共存するという特異な現象の微視的な理解に到達した。さらに、中性子過剰になった場合の形の進化を予言した。



分野5 物質と宇宙の起源と構造

超新星爆発およびブラックホールの誕生過程の解明

(課題代表者: 京都大学・柴田 大)

研究概要

太陽の約10倍以上の初期質量を持つ恒星は、進化の最終段階に重力崩壊し原始中性子星を形成させる。その後多くの場合に超新星爆発が起こり、超新星爆発に失敗した場合にはブラックホールが誕生すると考えられている。ブラックホールはまた、2つの中性子星からなる連星(連星中性子星)が合体する現象でも誕生すると考えられている。しかしながら、超新星爆発やブラックホール形成の機構は未だに解明されていない。これらの現象は重元素の合成現場でもあり、その解明は宇宙物理学における最重要課題の1つだが、従来の天文観測手段で解明するのは難しい。本研究の目的は、大規模数値シミュレーションを用いてこれらの現象を解明することである。具体的な最終的な目標は、一般相対論的效果を取り入れながらボルツマン方程式、流体方程式を解き、第一原理的に超新星爆発や中性子星連星の合体現象を再現することだが、それは今後10～15年スケールの課題なので、本課題では世界最先端の成果を出しつつ、最終目標に向けたコード開発を段階的に進める。

研究体制

大きく分ければ2つのプロジェクトに分類できる。①ニュートン重力を仮定するが、輻射流体方程式に対する扱いを段階的に精緻化する: 参加研究者は、瀧脇知也(国立天文台)、固武慶(福岡大)、諏訪雄大、長倉洋樹、岩上わかな(京大)、山田章一(早稲田大)、住吉光介(沼津高専)。②一般相対論的な輻射・磁気流体シミュレーションにより、主に連星中性子星の合体過程の解明に迫る: 参加研究者は、関口雄一郎、木内建太、柴田大(京大)。①の責任者は、固武と山田と住吉であり、②の責任者は柴田である。なお、①と②の研究で用いる高温高密度の核物質の状態方程式や輻射流体方程式の解法は共通なので、これらについては全研究者が密接に協力しながら研究を進める。

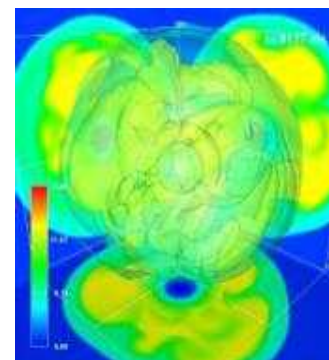
成果内容と科学的又は社会的意義

空間3次元の輻射流体シミュレーションにより、超新星爆発機構の解明に資する爆発現象の再現に成功

・超新星爆発に対する実空間3次元、位相空間1次元の輻射流体シミュレーションを京コンピュータで実施した。過去数十年間実行されてきた空間的対称性を仮定した計算では超新星爆発機構は解明され得なかったのだが、空間3次元の効果をも考慮した大規模シミュレーションにより、爆発現象が理論的に再現可能であることが、定量的に初めて示された。この課題における最初の大きな成果である。超新星の爆発現象がほぼ第一原理的に解明可能になったので、今後宇宙における元素生成過程の解明などに応用されることが期待される。

・今年度は主に、連星中性子星の合体に対する高解像度一般相対論的磁気流体計算を京コンピュータで進めている。連星中性子星は合体後多くの場合、大質量中性子星を形成させると推測される。その後磁気流体過程により、その構造を変化させながら最終的にはブラックホールとその周りを取り囲む降着円盤を誕生させると考えられている。この現象に付随して、ガンマ線バーストやマクロ新星と呼ばれる現象が発生すると予想されているが、これまでのところ予想通りの結果がある条件のもとで得られることが示唆されている。25年度後半はこの合体現象を集中的に調べ、仮説の検証を目指す。

・26年度以降はこれまでの研究をより発展させ、一般相対論的輻射流体計算による連星中性子星合体の研究や6次元ボルツマン方程式を解く輻射流体計算による超新星爆発の計算を予定通り実行する。



図は超新星爆発現象に対する計算結果。エントロピー分布を表示。

分野5 物質と宇宙の起源と構造

課題4 ダークマターの密度ゆらぎから 生まれる第1世代天体形成

(課題代表者: 東京工業大学 牧野 淳一郎)

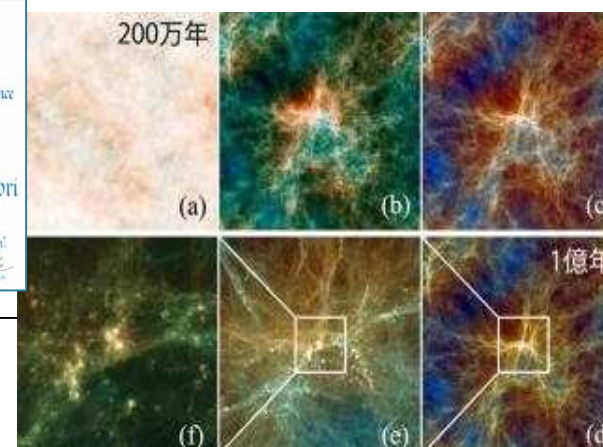
研究概要

本研究課題の目標は、次世代スパコンで初めて可能になる大規模シミュレーションによって、ダークマターの重力ゆらぎによる構造形成およびバリオンの構造形成、具体的には、第一世代星形成及び銀河形成の研究を従来の研究よりも2桁程度高い質量分解能で行ない、宇宙における天体の起源を明らかにすることである。

現在、(a)宇宙最初期に形成されるダークマター天体の構造とその進化、(b) 輻射のフィードバックをとりいれた「宇宙暗黒時代」における天体の形成・進化、(c) 銀河中心におけるブラックホールのガス降着による成長過程、の3テーマを中心に計算コード開発と予備的計算を進めている。さらに、今年度から(d)天体ダイナモ、および(e) 惑星形成過程についても、計算コード開発と予備計算を始めた。

研究体制

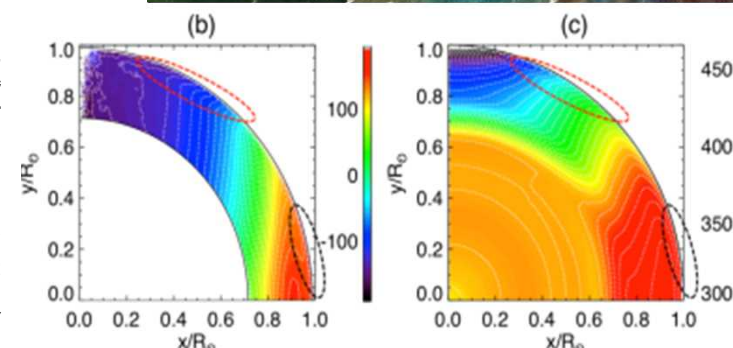
責任者: 牧野(東工大) --- 斎藤、馬場、小南
梅村(筑波大学) --- 石山、長谷川
松元(千葉大学)、大須賀(国立天文台) --- 高橋
富阪(国立天文台)
井田(東工大)



成果内容と科学的又は社会的意義

(a) では、「京」のほぼフルシステムを用いて、約2兆個のダークマター粒子の重力進化を計算することに成功した。実効性能5.67ペタフロップス、実行効率約55%である。この成果によりゴードンベル賞を単独受賞した。これは、同様な問題を名目ピーク性能では上回る BG/Q で実行した米国グループに比べて、同じ規模の問題を2倍以上高速にシミュレーションできたことが評価された。(b)―(e) の各課題でも並列化と「京」むけのチューニングを進めている。特に(b)、(d) では大規模計算が可能になっており、科学的成果につながる計算を進めている。

成果としては、(a) では物理学・宇宙論における最大の謎であるダークマターの正体を検証する道を開いた。(b)では、観測が届かない「暗黒時代」の天体がどのようなものであるかを明らかにし、そこから観測で検証可能な予言をもたらし、将来の観測計画につなげる。(d)においては、世界で初めて太陽の対流層の高解像度3次元計算を行い、ダイナモ効果、内部の速度構造の再現、さらには太陽の長期変動のメカニズムを解明し、気候変動予測にも貢献する。



(b)シミュレーション結果。カラーは回転角速度分布。単位はnHz。(c)日震学から求められた回転角速度分布。