

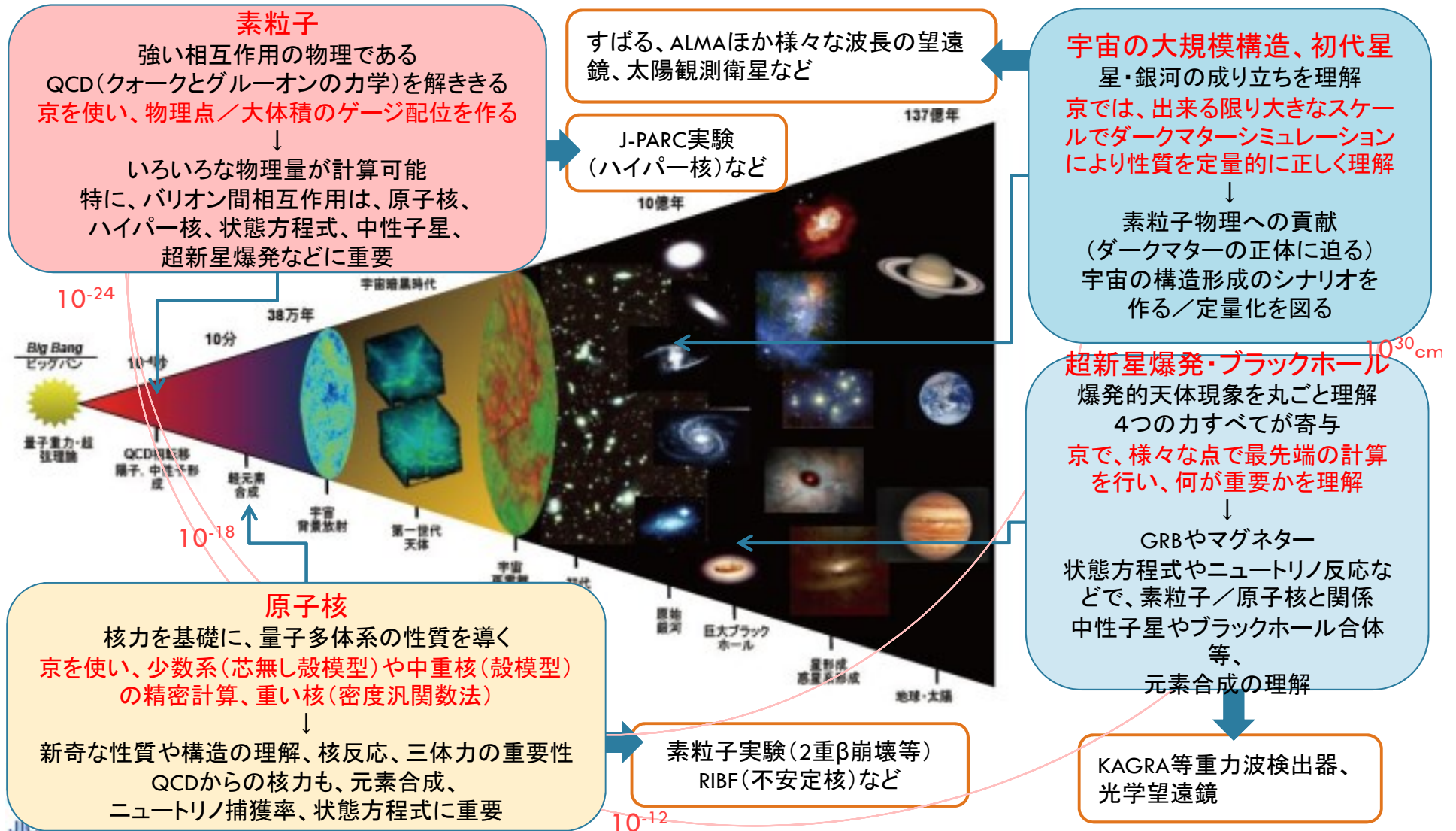
HPCI戦略プログラム 分野5 物質と宇宙の起源と構造

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



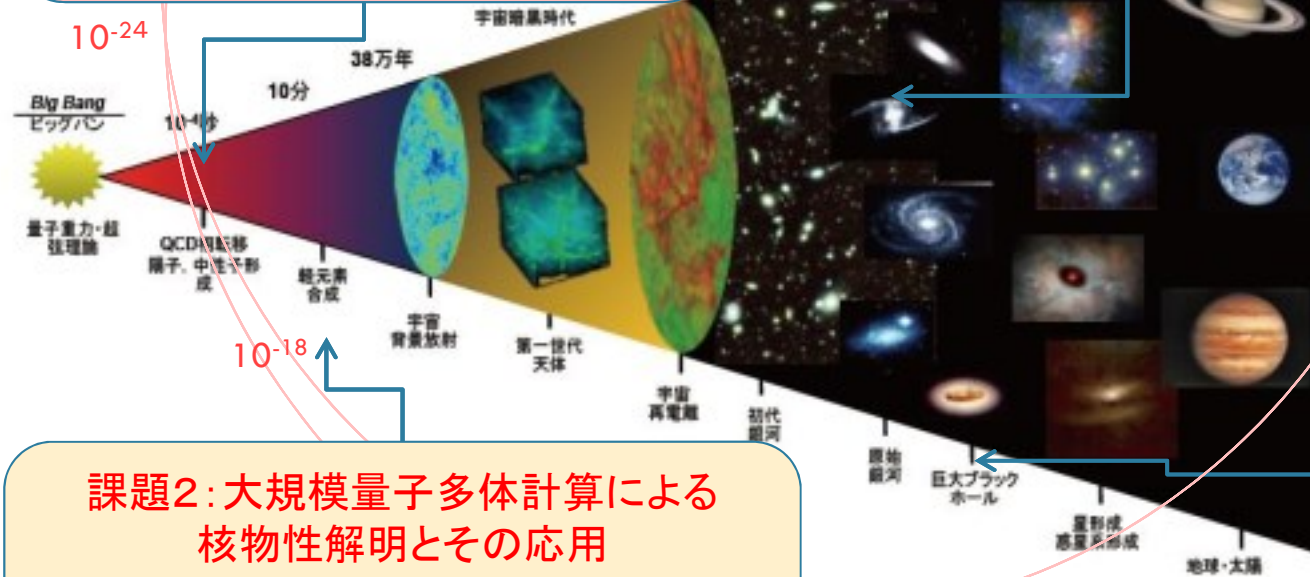
研究開発課題

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



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、自然科学研究機構国立天文台、京都大学基礎物理学研究所、理化学研究所仁科加速器研究センター、東京大学原子核科学研究センター、大阪大学核物理研究センター、千葉大学ハドロン宇宙国際研究センター、8機関

拠点長: 青木慎也(筑波大・京都大)

アドバイザリー委員会 (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、朴泰祐、蔵増嘉伸、中務孝、櫻井哲也、橋本省二、西村淳、石川正、富阪幸治、大須賀健、柴田大、初田哲男、土井琢身、大塚孝治、清水則孝、保坂淳、石井理修、松元亮治、牧野淳一郎、吉田直紀

副拠点長(研究開発): 柴田大(京大)

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

(理化学研究所AICS、東京大学
IPMU、東京工業大学、広島大等)

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 /手法コード発	予備 計算
	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	本格 計算
	③ コード開発	サイエンスラン	計算・エク サ準備
	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・エクサ準 備
目標達成状況	＜実施内容＞ 全体的には順調に進捗し、 着実に達成。 研究開発課題1-3は「○」。 当初計画になかった大きな 成果もあり、課題4は「◎」 としている。		＜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
			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
			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
			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
			宇宙における構造形成、 ④ 第一世代天体・銀河形成の 過程解明

目標達成状況詳細

6

研究開発項目	達成状況
(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定に関する研究	○着実に達成 ○物理点近傍におけるゲージ配位生成(格子サイズ=96⁴)を行い、安定なハドロン質量に対して、当初目標の統計誤差0.1%レベルを達成した。 ○バリオン間相互作用の中心力およびテンソル力について、京で生成した物理点近傍でのゲージ配位を用いた定量的計算を進め、核力のテンソル力、ハイペロン力の中心力とテンソル力に関して統計的に有意な結果を得ている。 ○物理点近傍でのストレンジネスを含むエキゾチックダイバリオン(HおよびΩΩ)に関する定量的予言を行える統計精度に達している。
(2) 大規模量子多体計算による核物性の解明	○着実に達成 ○京に向けた大規模量子多体計算コードを開発する目標に対し、モンテカルロ殻模型計算コード開発・高度化に成功した。京に於いて、12000ノードを超える並列性能・理論性能比30%を超える高い実行効率を示した。 ○軽い原子核の第一原理計算において、20個程度の核種の計算を40個程度へ広げる目標に対し、ネオン20までの41個の核種についての計算を完了した。当初目標は6主殻までだったが、一部7主殻模型空間までの計算し、模型空間にとられないエネルギー期待値の推定を可能とした。 ◎中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造進化を明らかにし、元素合成過程、長寿命核分裂生成物、二重β崩壊核という応用につなぐ目標に対し、中性子過剰ニッケル同位体などの構造計算に成功し、「形の共存」現象と、メカニズムを解明した。方法論における革新的進歩による計画になかった発展もあった。 ○追加された、いまだ未開拓な3体核力の姿を明らかにする目標に対し、3体力効果を2体近似によって有効相互作用にとりこむ手法を確立し、マグネシウム近傍の中性子過剰核の「反転の島」の記述に成功した。

目標達成状況詳細2

7

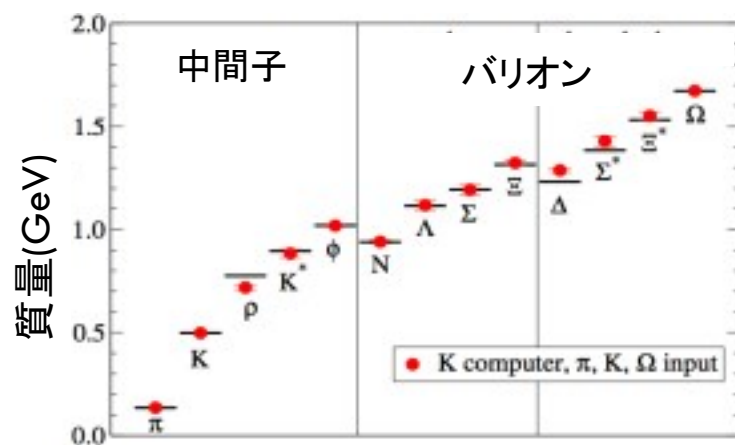
研究開発項目	達成状況
(3) 超新星爆発およびブラックホールの誕生過程の解明	○ 着実に達成 ○ 空間3次元、エネルギー空間1次元を考慮した超新星爆発に対する輻射流体計算を当初の目標通り平成25年までに当時世界で初めて実行し、ニュートリノ加熱機構が超新星爆発に有効であることを示した。 ○ 中性子星合体に対する一般相対論的磁気流体計算を、それ以前の世界最高解像度よりも3倍高い解像度で当初の目標通り実行し、合体時に発生するケルビン・ヘルムホルツ不安定性により10^{16}ガウス以上の強磁場を持つ大質量中性子星が誕生することを明らかにした。 ◎ 中性子星合体に対する一般相対論的輻射流体計算を当初の目標通り平成26年度に実行した。特に合体時に放出される中性子過剰物質が速い中性子捕獲による重元素合成に適した性質を持つことを世界で初めて示した。 ○ 当初の予定通り平成27年度に、超新星爆発に対する空間軸対称の輻射流体計算をボルツマン方程式を解きながら世界で初めて実行した。
(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	◎ 大幅に達成 ◎ ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現できた。(この結果、2012年度のゴードン・ベル賞を受賞した。) ○ 他の課題(銀河中心ブラックホール、惑星形成、初期銀河形成)については、基本的に当初計画通りの成果を実現した。 ◎ 当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。

研究開発課題1の成果例

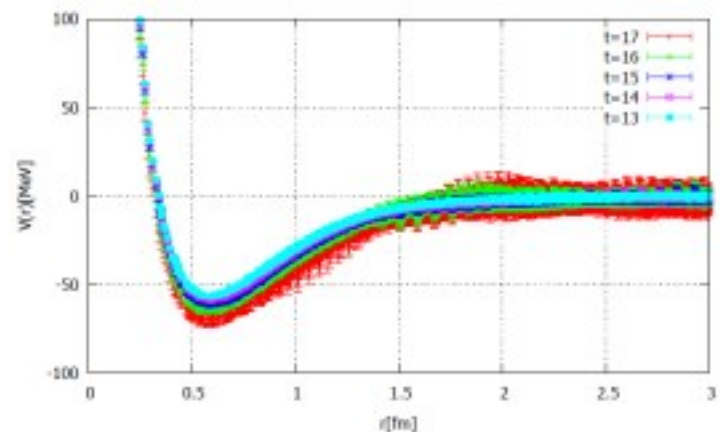
8

- (1) 格子QCD第一原理計算により、物理点近傍で世界最大級の物理体積でQCDゲージ配位を生成し、クォーク質量の精密決定に成功。その配位を用い、
- (2) バリオン間力について物理点近傍・大体積での格子QCD計算に世界で初めて成功。エキゾチックなダイバリオン状態の存在を実験に先駆けて予言。

	格子体積	クォーク質量
バリオン力計算での京のインパクト	「京」以前 : $(2.9\text{fm})^3 \times (5.8\text{fm})$ 「京」 : $(8.2\text{fm})^3 \times (8.2\text{fm})$	非物理的 ($m_p \geq 400\text{MeV}$) ほぼ物理点 ($m_p = 146\text{MeV}$)



クォーク質量 : $(m_{ud}, m_s) = (3.135(52), 88.60(1.40)) \text{ MeV}$
 ハドロン質量の予言値(赤)は実験値(黒)を完全に再現



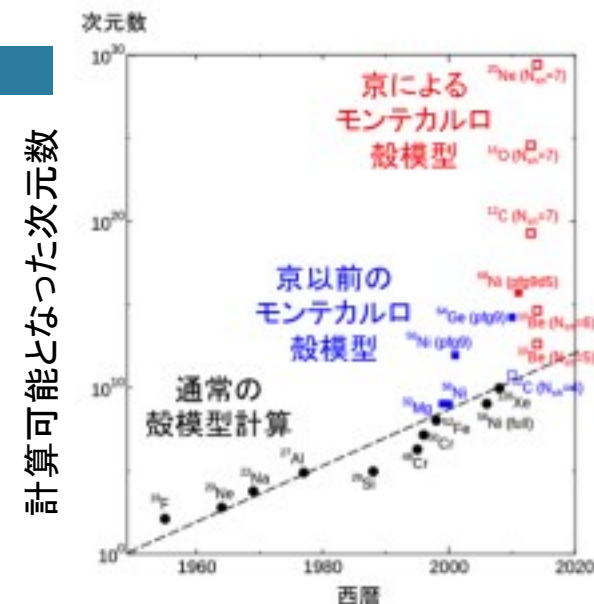
精密決定された $\Omega\Omega$ 相互作用
 束縛状態の存在を予言

研究開発課題2の成果例

9

モンテカルロ殻模型と京計算機の組み合わせにより、殻模型による原子核構造計算の適用可能核種の範囲、及び、計算可能なデータの種別を飛躍的に拡大

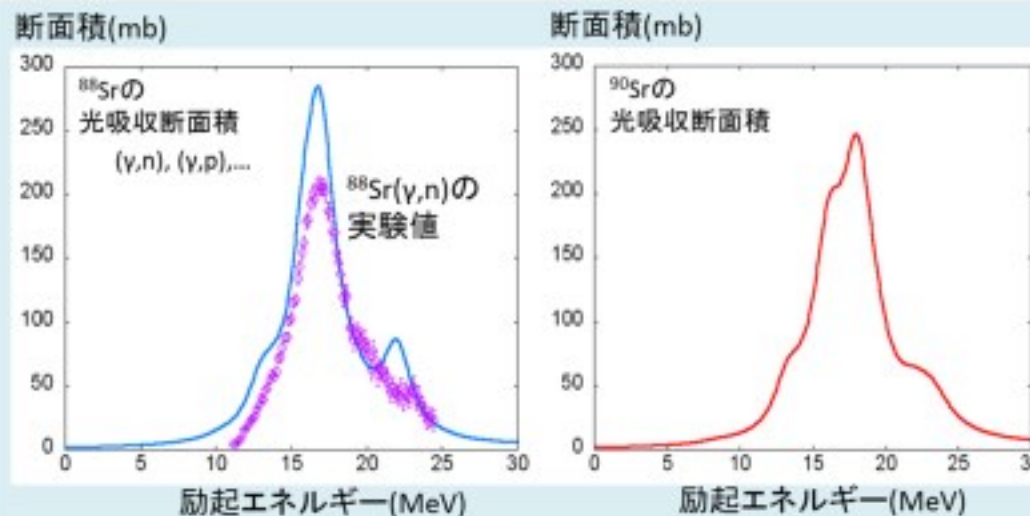
核廃棄物処理に問題となる長寿命核分裂生成物核種の基礎データ計算・原理実証研究に成功



右図は光吸収断面積の計算例
(原理実証研究の成果)

右側にあるストロンチウム-90
は長寿命核分裂生成物の一つ

基礎データの提供により、核変換
研究の様々な局面に貢献が
期待される



研究開発課題3の成果例

10

連星合体における中性子星磁場増幅を説明

- 中性子星は宇宙最大の磁石で、 10^{11-15} ガウス(太陽黒点は数千ガウス)。しかし、合体過程における磁場増幅は良く理解されておらず、磁場増幅過程を正しく追跡するには、超高解像度の計算が必要不可欠だったからである。

□ 以前と「京」の解像度と格子点数の比較

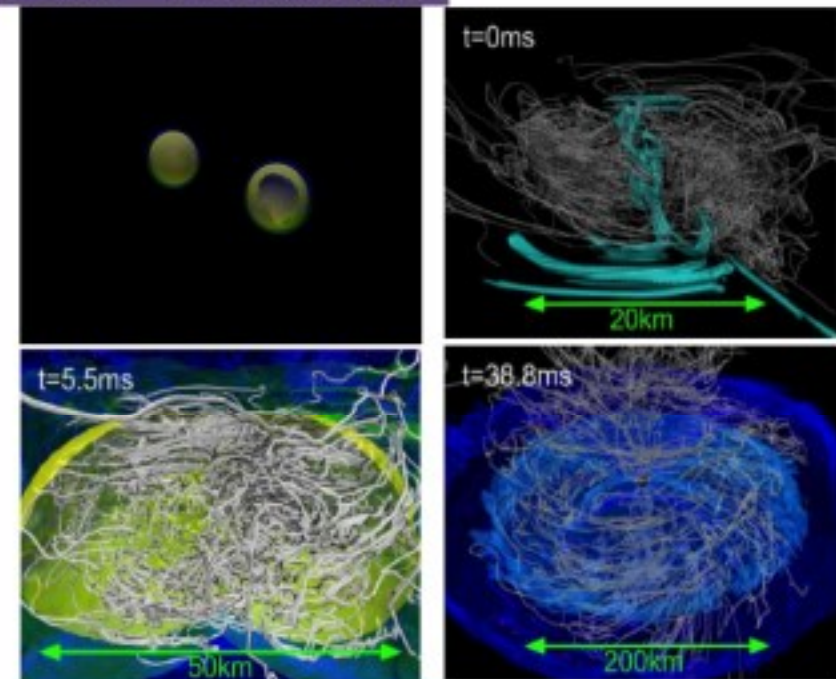
解像度 格子点総数($N_x \times N_y \times N_z$)

「京」以前 180m $240 \times 240 \times 120$

「京」 70m $1,024 \times 1,024 \times 512$

計算規模にして約70倍、「京」にのみ実行可能な課題

シミュレーションの可視化



左上：合体前の密度場の等値面。右上：合体の磁力線（白）と磁場強度（水色）。左下：合体後の高速回転中性子星の密度場の等値面（黄、青）と磁力線（白）。右下：ブラックホール崩壊後の密度場の等値面（青、薄青）と磁力線（白）。

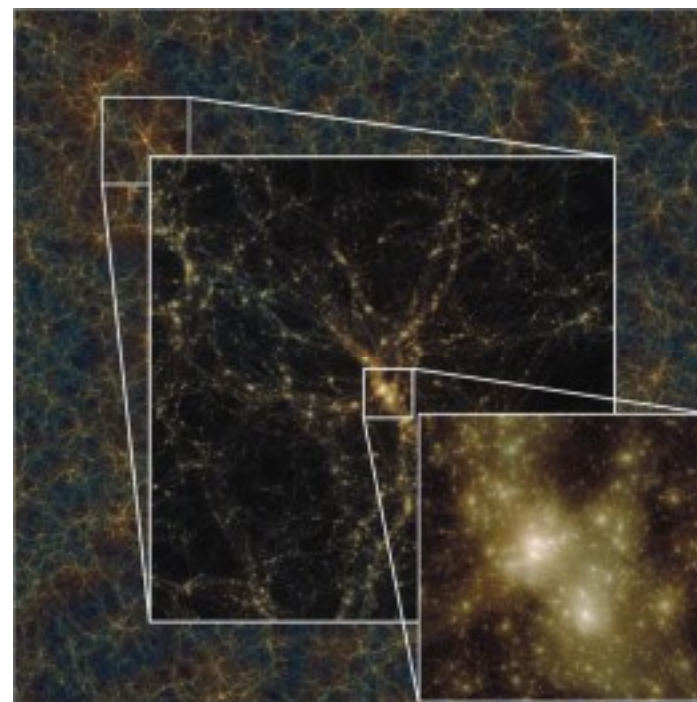
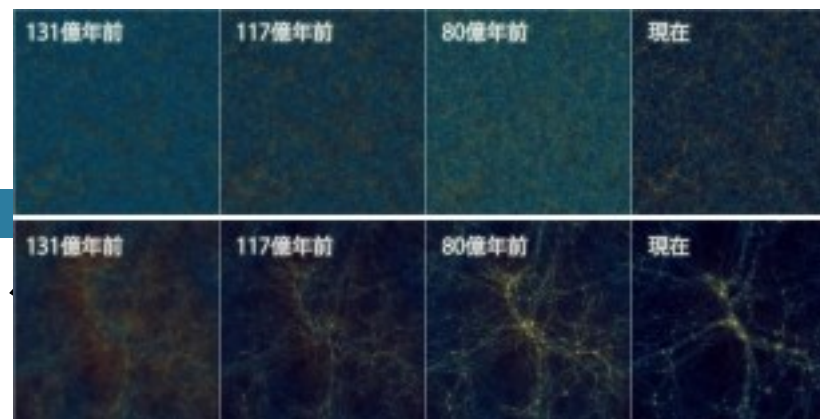
研究開発課題4の 成果例

11

宇宙初期から現在にいたる約5500億個もの
クマター粒子の重力進化を計算

(「京」以前は100億程度が限界)

- 最大一辺約54億光年におよぶ広大な空間サイズ
(上図)。これほど大きな空間でのシミュレーショ
ンとしては世界最高の分解能であり、銀河スケ
ールのハローの階層的形成を追うシミュレーション
としては世界最大。
- 質量スケールに換算しておよそ8桁にもおよぶ範
囲でのハローの構造形成史をモデル化すること
が可能となった(右図)。初期宇宙から現在にわ
たって、矮小銀河から銀河団におよぶ多種多様
な天体の形成、進化過程、そして空間分布を探
ることができるようになった。



研究開発課題の 独創性・優位性、成果の利活用

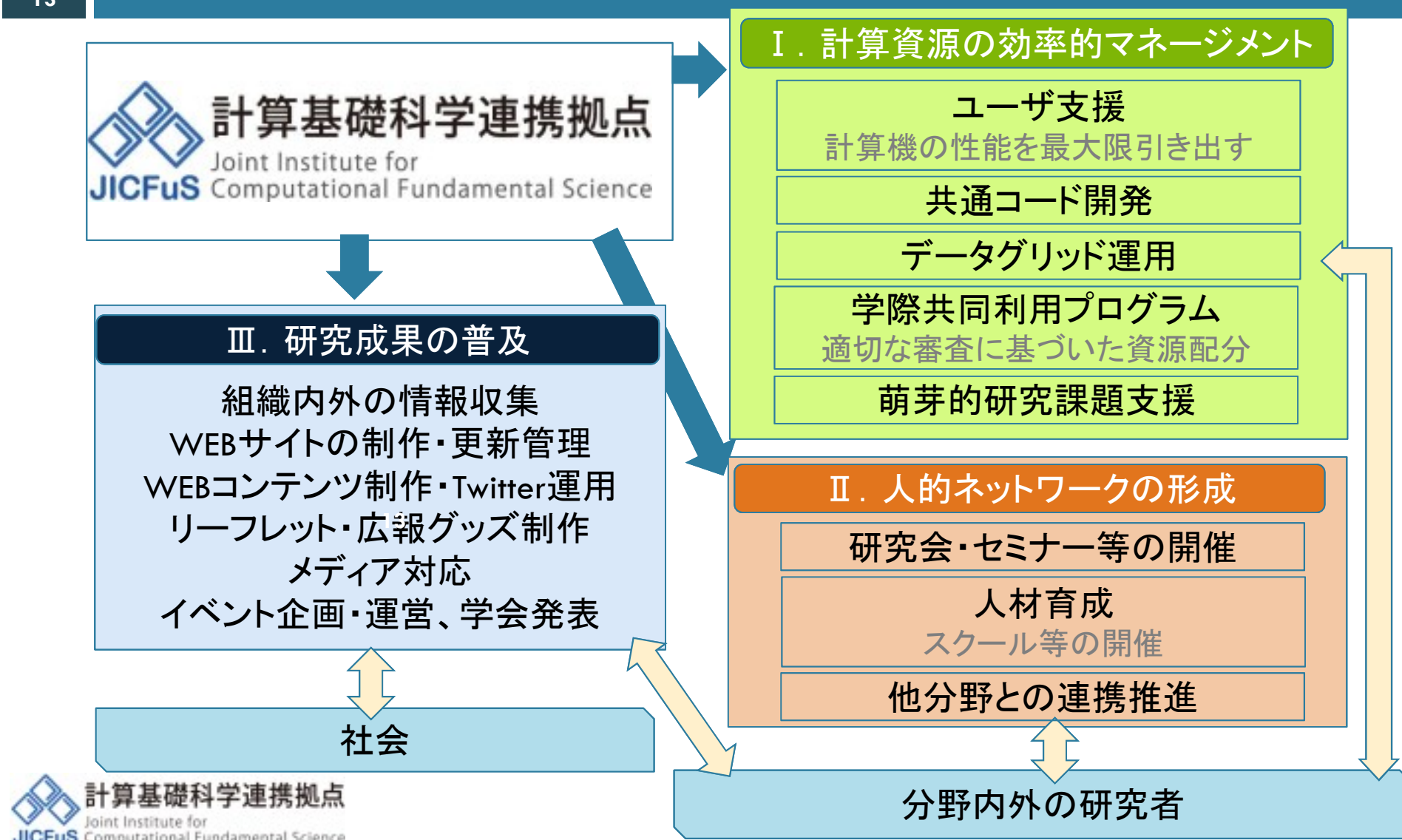
12

	課題1	課題2	課題3	課題4
独創性 優位性	生成した物理点近傍($m\pi=146\text{MeV}$)かつ大きな格子体積($L=8.2\text{fm}$)でのゲージ配位は、バリオン間相互作用の計算に供される貴重な資源、素粒子と原子核を現実的なパラメータでつなぐ世界最初のデータ	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	独・米や日本の第一原理的輻射輸送計算を行うグループに比べ、近似度の高いスキームを使いつつ、計算速度に優れ、多モデルを系統的に計算、超新星爆発現象のパラメータ依存性を網羅的に調べ、未解決問題を解決可能	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	実験との共著論文3本、投稿中2本、他10件以上問合せ・共同研究進行中、原子核構造研究に大きなインパクト	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	開発した新しい並列化アルゴリズムや数値計算法の他分野への応用

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

13



体制構築の実施計画と最終目標

	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 最終評価	Post京課題創出・体制構築
のフネ 形 的 成 果	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 及 の 研 究 普 成	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
目標達成状況	○着実に達成。ユーザ支援、共通コード、データグリッド運用、共同利用プログラム、萌芽的研究課題支援、研究会・スクール等開催、広報ウェブサイト、広報イベントについて、広範な事業を展開し、それぞれに成果を得た。		<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進展

15

＜計算機資源の効率的なマネジメント＞

- ユーザ支援、「高性能計算の扉」(計算アルゴリズム・最適化の情報サイト整備、提供)、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(6PB超)ともに拡大蓄積・安定運用・提供
- 萌芽的研究課題(次頁一覧): ここから課題4に太陽プラズマのシミュレーション追加や京一般利用課題としてScience2論文等の成果創出

＜人的ネットワークの形成＞

- 人材育成等: 研究会・セミナー(98件、6414名参加)、スクールプログラム充実(19件、参加813名)、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
- 分野2との分野横断型研究会の開催など他分野との連携を推進

＜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、研究者紹介記事・ムービー(3.7万人視聴)※、「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(1.4万人がプレイ)



萌芽的研究課題一覧

16

- 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

17

＜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**

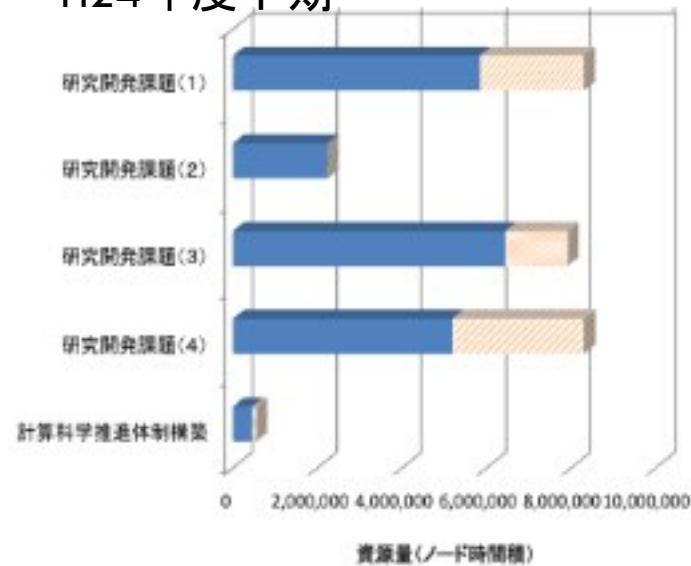
＜全体＞

- 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

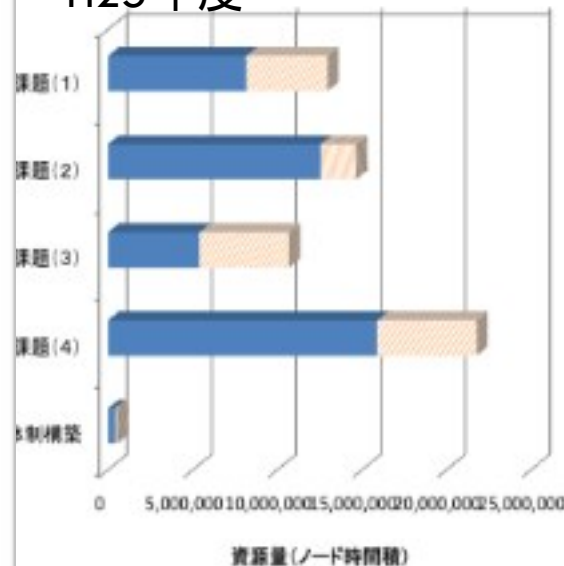
「京」の利用状況（H24年度下期～H27年度12月迄）

18

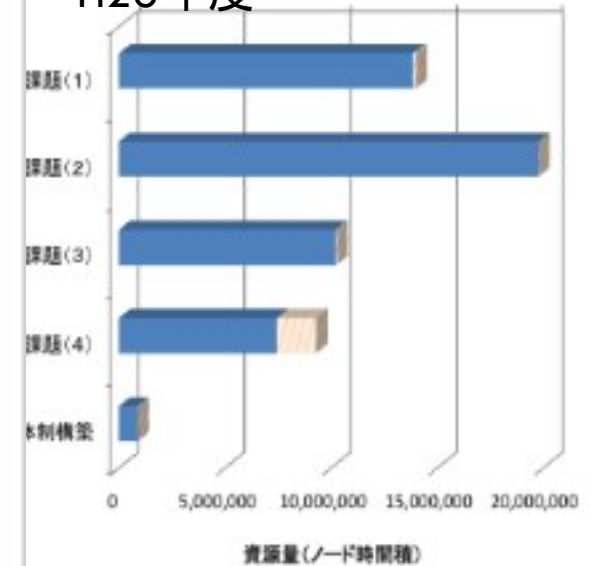
H24年度下期



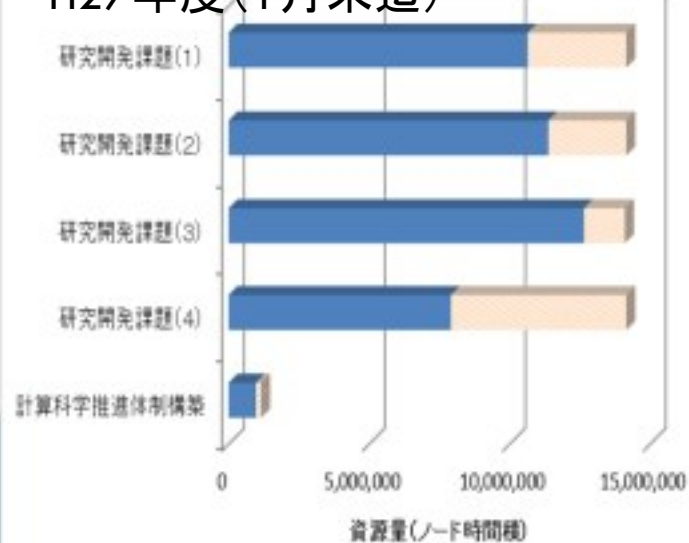
H25年度



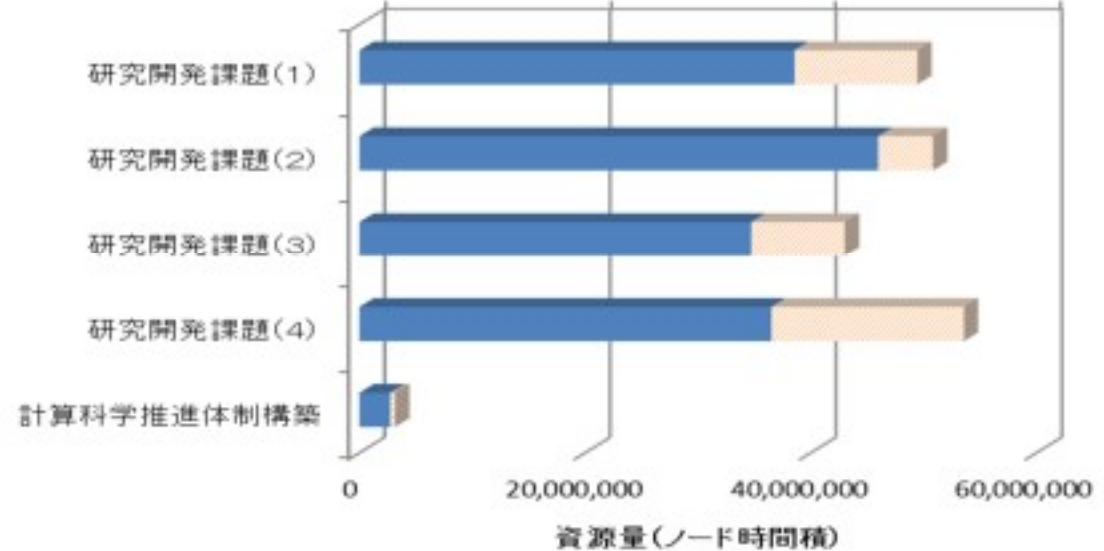
H26年度



H27年度(1月末迄)



全体(H24下期-H27年度1月末迄)



予算の推移-1

(単位:千円)

研究開発課題

(千円)	H23	H24	H25	H26	H27	備考
課題1	44,865	49,378	48,477	43,690	43,581	人件費、 旅費、 消耗品、 計算機使 用料、 研究室借 料 など
課題2	49,423	49,989	49,951	44,946	40,451	
課題3	49,398	49,060	49,060	45,254	36,333	
課題4	39,667	48,006	49,191	41,373	41,314	
小計	183,353	196,432	196,678	177,168	161,679	

予算の推移-2

計算科学推進体制の構築

(単位:千円)

(千円)		H23	H24	H24 補正	H25	H26	H27	備考
計算資源の効率的マネジメント	ユーザ支援、共通コード、萌芽的研究支援	173,762	196,319	0	186,716	183,118	169,895	人件費、プログラム高度化
	データグリッド運用、資源配分	7,000	9,300	86,760	16,890	10,056	10,228	サーバ、計算機使用料
人的ネットワークの形成	研究会・セミナー開催、人材育成、他分野との連携推進	19,902	10,188	0	14,088	10,928	8,100	会場費、旅費、消耗品費
研究成果の普及		4,600	11,332	3,240	5,975	4,441	3,444	印刷・コンテンツ制作費
その他		104,912	62,958	2,000	73,183	56,199	44,564	旅費、消耗品等
小計		310,176	290,097	11,000	296,852	264,742	236,231	
合計		493,529	493,529	11,000	493,530	441,910	397,910	