

令和3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
「シミュレーションで探る基礎科学：
素粒子の基本法則から元素の生成まで」
成果報告書

令和4年5月30日
大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構

橋本省二

目次

1. 補助事業の目的	- 2 -
2. 令和3年度（報告年度）の実施内容	- 4 -
2-1. 当該年度（令和3年度）の事業実施計画	- 4 -
2-2. 実施内容（成果）	- 6 -
2-3. 活動（研究会の活動等）	- 20 -
2-4. 実施体制	- 25 -
別添1 学会等発表実績	- 27 -

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」

1. 補助事業の目的

高エネルギー加速器研究機構では、宇宙を支配する基本法則と物質の成り立ちに関わる大きな謎にシミュレーションを通じて挑む。新しい基本法則の探究から、複雑な原子核の理解、激しい天体現象を通じて起こった元素合成の解明まで、素粒子・原子核・宇宙物理の中心的な課題を取り上げ、富岳の計算能力を最大限に活かして早期に成果を得る。我が国が中心となって推進する実験・観測プロジェクトとの密な連携体制を組み、本事業では、相互に関連する以下の研究課題のシミュレーション研究を推進し、相互の成果を最大化することを目指す。

[B 中間子崩壊]

SuperKEKB/Belle II 実験で測定される B 中間子の崩壊では、そのいくつかで素粒子標準模型からのずれを示唆する実験データが得られている。データの蓄積とともに真偽が明らかになるはずだが、同時に必要になるのが、B 中間子崩壊に対する量子色力学(QCD)の寄与を正確に理解することである。格子 QCD シミュレーションにより B 中間子崩壊、特に $B \rightarrow \pi \ell \nu$ 崩壊、の形状因子を精密に計算し、実験結果と組み合わせて素粒子標準模型を超える物理法則に制限をあたえる。

[QCD 相構造]

宇宙初期に高温相にあったとされる QCD の真空は、相転移によって低温相に移行し、物質の質量の起源となっている。相転移の詳細は系のもつ対称性に支配されるが、QCD の対称性は量子異常により不明確になるため相構造は十分に理解されていない。カイラル対称性を保つシミュレーションにより、2+1 フレーバー QCD の相構造を確立する。

[バリオン間力]

陽子・中性子などのバリオンの間に働く力、バリオン間力は、原子核の理解の基礎になるべきものだが、それ自体が QCD によるクォークの複雑な相互作用の結果として生まれるもので、その計算には格子 QCD シミュレーションが必要になる。特に実験的情報の少ないストレンジクォークを含むバリオン間のハイペロン力の決定には、格子 QCD 計算による他ない。ハイペロン力や、さらに重いチャームクォークを含むバリオン間力の計算により未知の 2 バリオン状態の存否を明らかにし、J-PARC におけるハイパー核実験や LHC における重イオン衝突実験につなげる。

上記の 3 課題は、格子量子色力学計算に関わるものである。ポスト京開発中にコデザインの対象コードの一つとして取り上げられた格子量子色力学のコードについて、ウィルソン・クローバー・フェルミオン用クォーク・ソルバー、および、5次元ドメインウォール・フェルミオン・クォーク・ソルバーの富岳への最適化を進める。

[核構造と r 過程]

原子核構造の研究を中性子過剰核に進め、重元素合成の r 過程を定量的に理解することが大きなチャレンジとなる。これまでに培ったモンテカルロ殻模型の手法を適用してニッケル（原子番号 28）同位体の構造計算を質量数 68 近傍から 78 近傍、さらに質量数 100 を超える領域にまで進める。RIBF での実験結果との比較によって信頼性を高め、r 過程の主要部を定量的に明らかにする。

[中性子星合体]

重元素合成の機構としての r 過程には、大量の中性子が必要になる。そのもっとも有力な起源と考えられているのが中性子星合体であり、2017 年の重力波イベントに付随した電磁波対応天体の観測によっても強く示唆されている。中性子星合体のシミュレーションを進めて合体時の放出物質の性質を明らかにすることで、KAGRA 等の重力波干渉計による重力波観測、光学望遠鏡による電磁波観測による検証へつなげる。

[時空生成]

ビッグバンは宇宙の始まりだとされているが、その最初の機構は明らかになっておらず、インフレーション宇宙論も現象論的な理論にすぎない。すべてを説明する理論として期待されている超弦理論を出発点として、無から時空が生成して成長する様子をシミュレーションで明らかにする。

2. 令和3年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和3年度）の事業実施計画

(1) 事業統括

本事業全体の取りまとめを行う。以下にあげる各研究の進捗を確認し、計算機資源の配分等の調整を行う。本研究を一般に紹介するためにシンポジウムの開催、ウェブサイトでの発信を行う。

(2) [B 中間子崩壊]の研究

小林益川行列要素の高精度決定を目指し、 $B \rightarrow \pi \ell \nu$ 崩壊の形状因子を、格子 QCD の数値シミュレーションによって計算する。我が国の SuperKEKB/Belle II 実験の測定精度に見合う理論計算精度を達成するため、重点課題9で実施したシミュレーションを格段に高精度化する。具体的には、相関関数を時空格子上の位置について平均することにより統計精度を向上させ、また、時間距離を変えた計算により励起状態の寄与による不定性を制御する。令和2年度は、富岳で使用するプログラムを開発し、比較的低い格子カットオフ 2.5GeV での計算を開始した。令和3年度は、シミュレーションを格段に高いカットオフ 4.5GeV へと拡張する。これにより、先行研究において最大の問題であった離散化誤差を精査し、カットオフ無限大の極限、即ち、連続時空への外挿を制御する。

(3) [QCD 相構造]の研究

2+1 フレーバーQCD の有限温度ドメインウォールフェルミオン シミュレーションにおいて、格子カットオフ $1/a \approx 2.4$ GeV 付近を中心に、体積スケーリングと、パラメータサーチを行い、相転移の有無の確認と相転移温度を決定する。物理量として、トポロジー励起、ドメインウォールフェルミオン演算子の固有値、カイラル感受率などを用いる。必要に応じてゼロ温度シミュレーションも実行する。2020年度の基礎研究で、QCD コード Grid が、「富岳」上でほぼ予想された効率で動作するところまでチューニングが進んだ。2021年度は、上記のシミュレーションを実行しつつ、平行して更なるチューニングを行う。さらに、効率の高い動作が期待される、QCD wide simd (QWS) ライブラリの QCD コードへの実装を行う。これらの開発でコードの準備が整い次第、シミュレーションに投入していく。

(4) [バリオン間力]の研究

QCD に直接基づく原子核物理の構築を目指し、バリオン間力の格子 QCD 計算を進める。これまでは物理点近傍において格子 QCD 計算を行ってきたが、今後物理点直上におけるバリオン間力計算を実現するために、本年度は主に格子 QCD ゲージ配位生成を行う。2020年度に開発した富岳向け最適化コードを用い、一辺 8fm 以上の大体積格子を用いて (2+1)-フレーバーシミュレーションを行う。また、得られた配位を用いてハドロンスペクトラムやバリオン間力の予備的計算を行う。さらに、バリオン間力計算における系統誤差をさらに削減するための手法開発を行い、物理点・大体積格子において有効性が確認された場合は富岳における計算に向けた準備をすすめる。J-PARC におけるハイパー核実験や、LHC などハドロン衝突実験におけるバリオン間相関観測、エキゾチックハドロン/原子核探索などにおいて、バリオン多体系計算グループや加速器実験グループとの共同研究を進める。

(5) [核構造と r 過程]の研究

前年度に開発した原子核殻模型にもとづく原子核構造計算コードの拡張・高度化を進め、特に奇核への対応と元素合成過程の理解に重要であるベータ崩壊計算への対応をおこなう。これら開発コードを用いて中性子過剰核の大規模原子核構造計算を遂行し、最新の加速器実験によって得られた原子核構造の最新実験結果と比較・検討をおこないつつ、エキゾチックな核構造とそれを生じるメカニズムの理論的な解明を進める。質量数 100 を超えるような重い核種の構造計算を進めると共に、中性子過剰領域のニッケル周辺核種の大規模核構造計算をおこなう。これらの研究成果に基づいて、中重核領域でのベータ崩壊の研究やネオジム 150 などのニュートリノレス二重ベータ崩壊核行列要素の評価をすすめる。

(6) [中性子合体]の研究

弱い相互作用、ニュートリノ輻射輸送、一般相対論的磁気流体力学のすべてを考慮して、連星中性子星合体の数値相対論シミュレーションを合体後 1 秒程度まで行い、連星合体のダイナミクス、放射される重力波の波形、放出物質の熱力学的性質および化学的組成を定量的に明らかにする。上述の物理過程をすべて同時に考慮して、合体から合体後の進化までを総合的に追跡する計算は本研究が初めてである。さらに、放出物質のデータを用いて r 過程元素合成計算を行い、その崩壊熱をエネルギー源とする紫外・可視・赤外域の電磁波放射現象を明らかにする。得られた重力波波形は、重力波観測実験 KAGRA における重力波テンプレートとしても活用される。また、放出物質から導かれるデータは電磁波追観測チーム J-GEM における解析に用いられる。令和 3 年度は、重力波イベント GW170817 からの制限に適合する相対論的平均場理論に基づく中性子星の状態方程式を採用して計算を実行する。

(7) [時空生成]の研究

超弦理論の非摂動論的定式化として提案された行列模型のシミュレーションを行い、(3+1)次元の膨張宇宙が出現することを検証する。令和 2 年度以前の研究により、連続的な時間が出現し空間 3 方向が大きくなる現象が確認される一方、3 方向の空間の広がりには 2 点のみが担っており、残りの点が原点付近に局在するような状況がみられた。一方、令和 2 年度の研究により、上に述べたような相とは質的に異なる相が、ウィック回転の大きさに応じて新たに現れることが確認された。この相では、時間のみならず空間も連続的になる一方、これまで見られた $S_0(9)$ 対称性の自発的な破れは今のところ見られていない。本年度は、パラメタ空間をさらに広く探索するとともに、フェルミオンの効果を取り入れた 6 次元超対称行列模型の計算を、行列サイズ $N=128, 256, 512, 1024$ などで行い、この新しい相の性質を明らかにする。

(8) 格子量子色力学コードの富岳向け最適化

本年度は富岳においてこれまでに最適化を行ったアプリケーションプログラムを用いて実計算を本格的におこなう。アプリケーションプログラムにはこれまでに最適化を行ったウィルソン・クローバー・フェルミオン用クォーク・ソルバーと 5 次元ドメインウォール・フェルミオンクォークソルバーが組み込まれている。実計算をおこなうアプリケーションプログラム使用ユーザーからの最適化調整や要望に対するサポートをおこなう。また、富岳本格運用での運用形式に基づいた最適化をおこなう。

2-2. 実施内容（成果）

(1) 事業統括

本事業全体の取りまとめを行った。以下にあげる各研究の進捗を確認し、計算機資源の配分等の調整を行った。本研究を一般に紹介するためにシンポジウムの開催、ウェブサイトでの研究紹介記事やプレスリリースなど随時情報発信を行った。活動の詳細は、2-3. 活動（研究会の活動等）に報告する。

(2) [B 中間子崩壊]の研究

小林・益川行列要素 $|V_{ub}|$ の高精度決定を目指し、ポスト京重点課題9で行った $B \rightarrow \pi \ell \nu$ 崩壊の形状因子の計算の高精度化を進めた。まず、レーゲンスブルグ大学での研究開発に基づき、使用しているコードセット「Grid」、「Hadrons」が固定長のSIMD演算を行うようにし、シミュレーションを約2倍に高速化した。その上で、形状因子の計算を、計画中で最大の格子カットオフ $a^{-1} \sim 4.6 \text{ GeV}$ 、最大問題サイズ $64^3 \times 128$ へと拡張した。形状因子を与えるB中間子の3点相関関数を、格子内での相対位置と、B中間子生成演算子と π 中間子消滅演算子間の時間距離を変えて計算し、その豊富なデータを用いることにより励起状態の寄与と統計揺らぎを抑制し、重点課題9の計算と比べて統計精度を約2倍向上させ、典型的には3%まで削減した。形状因子を抽出するために相関関数の比の比較を図1に示した。

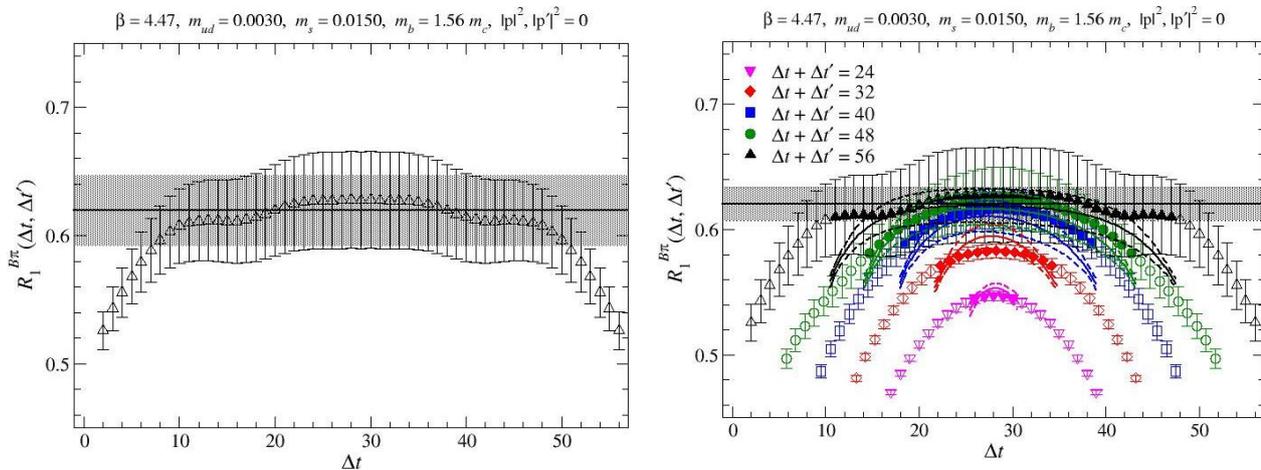


図1 重点課題9（左図）と成果創出加速プログラム（右図）での相関関数の比の比較

重点課題9ではB中間子生成演算子（データの左端）と π 中間子消滅演算子（データの右端）の時間距離 $\Delta t + \Delta t'$ を固定したが、本研究では5つの異なる値を用い、その豊富なデータを用いて不必要な励起状態の寄与の削除と、統計誤差の削減を行った。灰色のバンドはデータへのフィットから決めた比の値をプロットしており、誤差が約1/2に削減されている。

シミュレーションパラメタでの形状因子の線形結合 f_{1+f_2} と f_2 の結果を図2にプロットした。前者は小林・益川行列要素の決定に用いられる軽いレプトンを伴う崩壊モード $B \rightarrow \pi \ell \nu$ 、 $\pi \mu \nu$ を、後者は新物理探索に使われる τ 粒子を伴うモード $B \rightarrow \pi \tau \nu$ の記述に用いられる。図2の左図はこれらの形状因子を π 中間子エネルギー E_π 、右図はボトムクォーク質量の逆数 $1/2m_b$ に対してプロットしている。ただ

し、ボトムonium質量 M_{η_b} を用いて $2m_b = M_{\eta_b}$ と定義した。

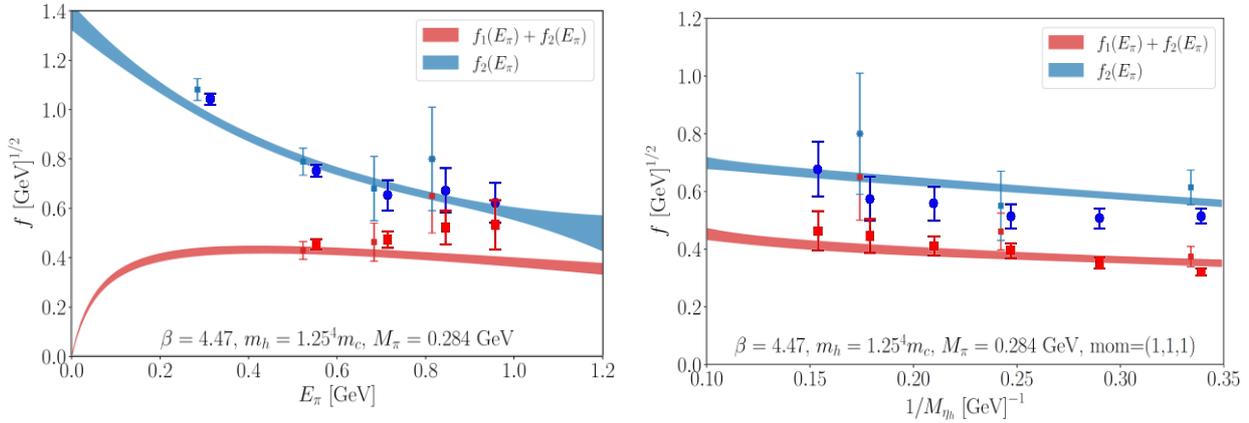


図2 形状因子 f_1+f_2 (赤四角) と f_2 (青丸) の図

小さいシンボルは重点課題9での結果を、バンドはこれらの形状因子の解析性に基づいたパラメトリゼーションをプロットしている。

相関関数の比と同様に、形状因子の統計精度も約2倍に改善されており、目標精度の5%より低く抑えられている。また、 E_π 、 m_b 依存性が大きくないため、運動量遷移の関数としての内挿、現実世界のボトムクォーク質量への外挿の系統誤差も制御できると期待できる。ただし、重点課題9の計算の最大系統誤差は π 中間子質量についての外挿から生じている。これを制御するため、最終年度に行う予定であったより軽い π 中間子質量 $M_\pi \sim 230$ MeV でのシミュレーションについて計画を前倒して進めている。

(3) [QCD 相構造]の研究

2+1 フレーバーQCD のシミュレーションは、軽い2フレーバー(u, dクォーク)の平均質量 m_{ud} と、重い1フレーバー(sクォーク)の質量 m_s 、さらにゲージ結合 β の計3つの格子パラメタで決まる。ゲージ結合は主に格子間隔 $a = a(\beta)$ を制御し、ひいては、時間方向の格子サイズ(N_t)の逆数で与えられる温度 $T = 1/(aN_t)$ 制御する。温度を変化させる際に温度以外の物理量を一定に保つため、ゼロ温度シミュレーションにより物理量一定を実現する格子クォーク質量をゲージ結合の関数として予め求めておく必要がある(Line of Constant Physics: LCP): $m_{ud}(\beta)$, $m_s(\beta)$ 。格子間隔 $a(\beta)$ を含めたLCPは現実世界のハドロン質量比を与えるパラメタ近傍でゼロ温度シミュレーションの解析を行い、現実世界の質量スケールをインプットする事により求められる。今年度はこれまでに求められた LCP(精細格子 $\beta \geq 4.17$ で求めた)の精密化を、粗い格子での(擬)相転移温度付近となる $\beta = 4.1$ のゼロ温度解析の追加により実行した。

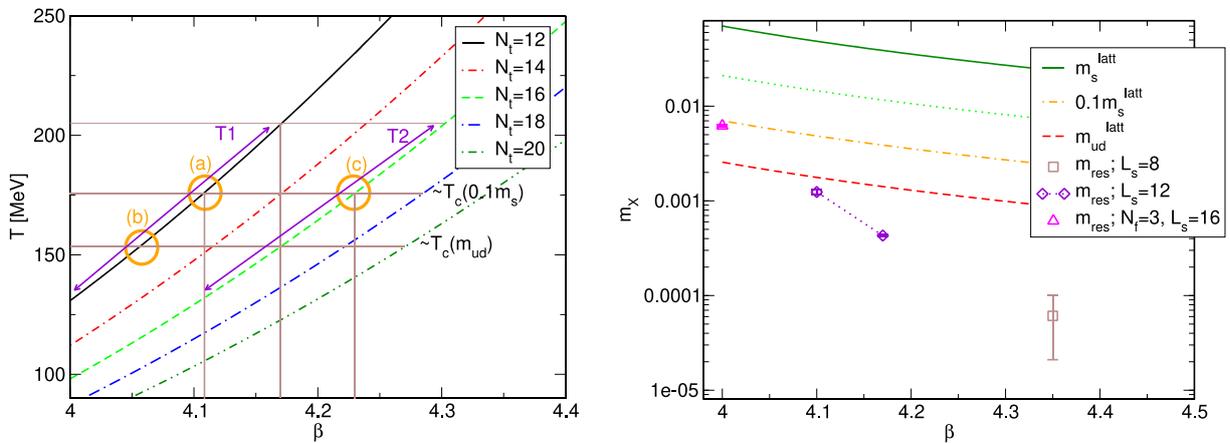


図3 ゲージ結合 β に対する N_t を固定した際の温度とクォーク質量

これにより、 N_t を固定した際の温度がゲージ結合 β の関数として図3左のように求まり、また、各クォーク質量も β の関数として図3右の様に求められた。当課題でシミュレートするsクォークは、常に物理点におき、ターゲットu, dクォーク質量としては、まず、sクォークの1/10(LCP=0.1 m_s と略記する; 物理点u, d平均質量の約3倍)とした系の相転移の解明を行う。それと平行して、物理点u, d平均質量の系の情報を得るための準備を進めることとする。これら二つの系の相転移位置は、 $\beta = 4.17$ のパイロット研究から概略判明しており、 $N_t = 12$ ではそれぞれ(a), (b)と図中に示した通りに、 $N_t = 16$ の前者は(c)の位置と推定される。これらの点の周辺でシミュレーションを系統的に行う。用いるドメインウォールフェルミオンの仮想5次元サイズ(L_s)はゼロ温度での情報蓄積のある $L_s = 12$ を採用した。有限な L_s の帰結であるカイラル対称性の残留度(m_{res})はクォーク質量の加法くりこみ因子となるため、厳密なLCPシミュレーションにはこの効果を取り入れたクォーク質量の微調整が必要になる。図3右図に示した様に、LCP=0.1 m_s シミュレーションでは相転移領域で m_{res} の効果は小さいため、微調整なしの計算を実行する。LCP= m_{ud} ではこの効果が大きい、 $m_{res}(\beta)$ が精密に求まっていない現時点では遂行できない。しかし、相転移(b)付近でu, dクォーク質量をシミュレーションしているのと同様なインプットクォーク質量 $m = 0$ (この領域での加法くりこみ質量 m_{res} の大きさがほぼ物理的udクォーク質量に等しい)を全ての β で使い情報を収集する。これらの結果として得られる $m_{res}(\beta)$ の情報を来年度以降の精密化に用いる。

以上のセットアップによりゲージ配位を生成し、配位上で DWF 演算子の固有値や相転移の指標として最も基本的なカイラル凝縮を計算した。図 4 左は各アンサンブルでノイズ法により計算したカイラル凝縮に乘法的くりこみ定数 (LCP を求める過程で得られている) を乗じて図示したものである。カイラル凝縮には有限質量では巾発散もある。s クォークの凝縮と合わせてその発散の除去を行ったのが図 4 右である。LCP=0.1 m_s の二つの格子間隔の結果の一致度は高く、離散化誤差を制御しつつ連続極限を遂行可能な期待が持てるが、クォーク質量加法くりこみ由来の微調整前であることを注意しておく。凝縮の変曲点は 0.1 m_s で T=170 MeV あたり、 $m = 0$ では T=150 MeV (その当りの加法くりこみによる質量はほぼ物理点 u, d 質量) と読み取れ、これらの値は既存の非カイラルフェルミオンシミュレーションの結果と類似であり、更なる精密化が求められる。

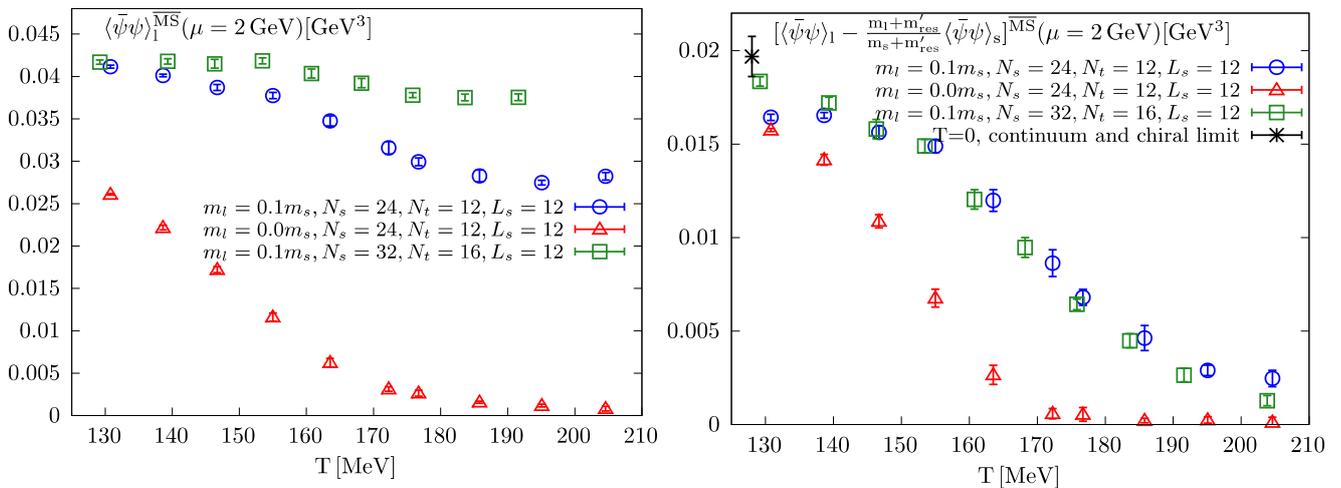


図 4 カイラル凝縮

今後、LCP の微調整を行い結果の精密化を図ること、より大きな空間体積の計算を遂行しスケーリングによる相転移の有無の判定を行うこと、他の物理量の計算も遂行し総合的に相転移と熱力学の情報を得ることが必要である。次年度はこれらを実行し、カイラルフェルミオンの系統的計算として初めての結果を導く。

2020 年度の基礎研究で、QCD コード Grid が「富岳」上でほぼ予想された効率で動作するところまでチューニングが進んでいた。2021 年度は上記のシミュレーションを実行しつつさらなるチューニングを行い、平行してカイラル秩序変数と残留質量計算を Grid をライブラリとする Hadrons に実装した。また、トポロジー励起と DWF 演算子の固有値の計算は Bridge++ に実装した。一連の開発とチューニングにおいて、「富岳」用に開発された現状の Grid のライブラリでは通信隠蔽とアーム命令を用いた高速化の共存に課題がある事が分かってきた。この克服は容易ではないため、平行して開発が進んでいた Bridge++ の開発を加速した。開発された Bridge++ のソルバを用いることにより、特に高ノード並列においてのストロングスケーリングの改善が期待される。

また、ドメインウォールフェルミオンコードの「富岳」A64FX プロセッサの詳細性能評価と改良についての基礎研究を、Grid の DWF カーネルを用いて行った。Grid では複素数配列を実部と虚部が隣り合うように領域確保を行うが、それぞれを一定の単位でまとめて確保した方が高速化に繋がる (QWS/ウィルソンフェルミオン)。Grid/DWF でも同様なゲインがある事が確認されたと共に、計算機のエネルギー消費にお

いても利点がある事が分かった。現時点では単一ノードを用いた研究であり、DWF シミュレーションでは通信隠蔽の方が単一ノード性の向上より重要であることが分かっていることから、まずはそれを解決した上で検討すべき改良点である事を示している。

(4) [バリオン間力]の研究

物理点直上でのバリオン間力の格子 QCD 計算に向けて、2021 年度は主に格子 QCD ゲージ配位生成を富岳を用いて行った。QCD の作用としては、stout smearing を用いた clover fermion action と、Iwasaki gauge action を使い、(2+1)-フレーバーダイナミカルシミュレーションによる配位生成をハイブリッドモンテカルロ (HMC) 法により行った。京における物理点近傍でのゲージ配位生成の成果を最大限活用するため、京配位を種とした 5 系列のモンテカルロ生成を実行した。格子のサイズは 96^4 、格子間隔は $1/a=2.3\text{GeV}$ であり、物理的格子サイズは $(8.1\text{fm})^4$ に対応する。このような大体積の採用は、二体バリオンを格子の中に格納するために重要である。クォーク質量が物理点直上になるためには一般にパラメータのチューニングが必要であるが、PACS Coll. による先行研究の情報を基に物理点パラメータを選択して計算を行った。

計算コードは、2020 年度に開発した富岳向け HMC コードを用いた。これは、富岳のコーデザイン開発の成果として生まれた QWS(QCD Wide SIMD) Library を実質的に中に組み込んだものであり、富岳向けに高度な最適化がされている。さらに生成計算をしながら各種のパラメータ (HMC パラメータ、RHMC パラメータ、ソルバーパラメータや環境変数等) をチューニングすることで、2021 年末時点で年度当初と比べ 30% 以上の高速化を達成した。計算の実行効率は、富岳 576 ノードを用いた場合で、(単純な倍精度換算で) 約 17% の性能を達成している。(より正確には、単精度・倍精度混合計算による加速も行っているため、それぞれの精度でのピーク性能が異なる効果を考えると、10% 強の実行効率と推測される。)

系列あたり数百~1000traj 程度の熟化を行った上で生成された 300 個程度のゲージ配位を用い、ハドロンのスペクトラム、クォーク質量、擬スカラーメソン崩壊定数などを計算したところ、(アイソスピン破れに伴う不定性の範囲内で) 物理点直上での値となっていることを確認した (図 5)。これにより目標としていたゲージ配位が生成されていることが確かめられたため、引き続き統計増大のための生成計算を続行すると共にバリオン間力の測定計算も開始した。

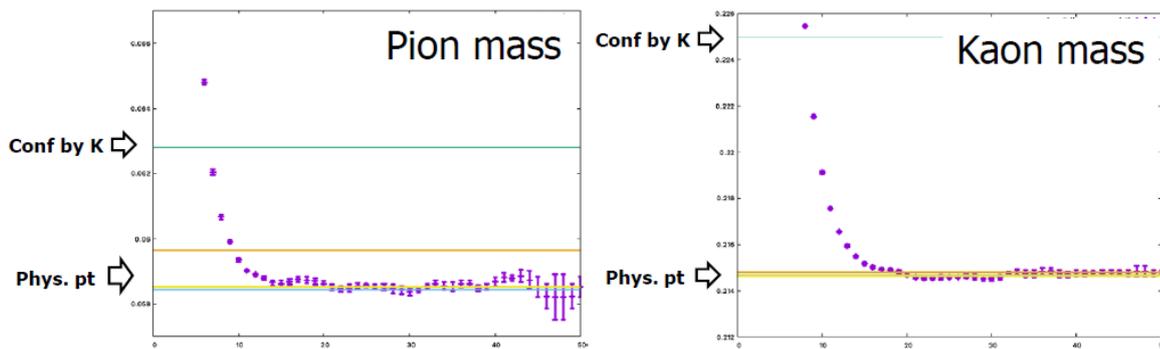


図 5 物理点直上で生成されたゲージ配位に基づくパイオン質量 (左) と Kaon 質量 (右)
(有効質量を時間 t に対してプロット)

エキゾチック粒子として、京で生成された物理点近傍ゲージ配位を用い、チャームダイオメガ (Ω_{ccc} Ω_{ccc}) がユニタリ極限近傍に存在することを予言し、2021 年度に出版・プレスリリースを行った [1]。さらに、ダイオメガ ($\Omega\Omega = \Omega_{sss}\Omega_{sss}$) とチャームダイオメガの相関関数を系統的に研究した。具体的

には、HAL QCD 法で得られたポテンシャルを基に、有限体積における固有モード基底を構築することで、相関関数における各固有モードの寄与を分別した。これにより、 $\Omega\Omega$ 相関関数では基底状態が主成分、 $\Omega\text{ccc}\Omega\text{ccc}$ 相関関数では第一励起状態が主成分となっていることが解り、さらにどちらのケースでも相互作用ポテンシャルは正確に計算できていることを明らかにした (図 6)。これは計算に用いている HAL QCD 法の信頼性をさらに裏打ちする成果である [2]。また、物理点近傍で得られた様々なバリオン間力の結果をバリオン多体系計算グループや加速器実験グループに提供し、J-PARC におけるハイパー核実験や、LHC などハドロン衝突実験におけるバリオン間相関観測、エキゾチックハドロン/原子核探索に向けた共同研究を進めた。

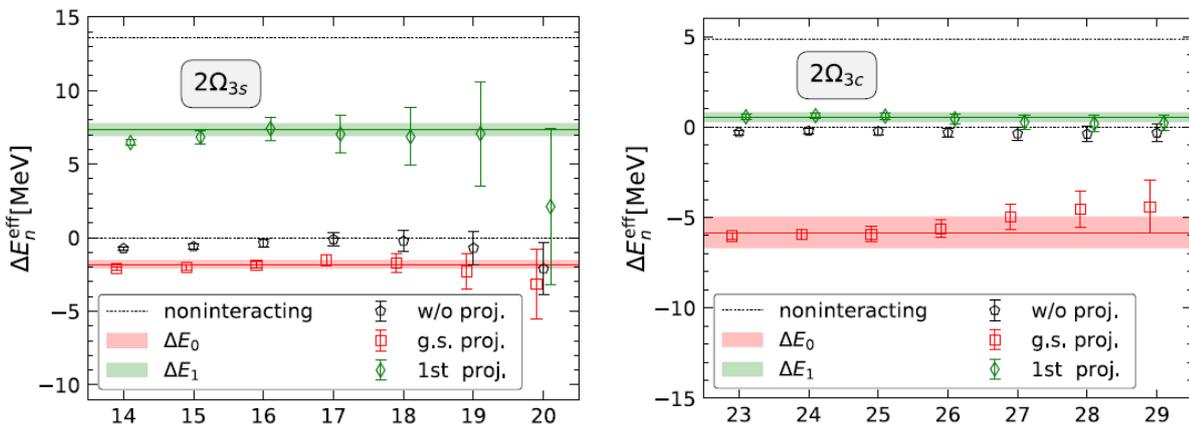


図 6 HAL QCD ポテンシャルに基づく固有モード射影を用いた
ダイオメガ(左)とチャームダイオメガ (右) の有効エネルギー

さらにバリオン間力のみならず、一般ハドロン間力への拡張およびハドロン共鳴状態の研究として、 $I=1$ P 波 $\pi\pi$ 相互作用の計算を重いクォーク質量で行った。この系のようにクォーク対生成消滅ダイアグラムが存在する系の計算では、いわゆる all-to-all プロパゲータの計算が必要であり、従来の HAL QCD 法では計算コストが大きくなりすぎ研究困難であった。これについて、新たな手法として all-to-all 計算を one-end trick, sequential method, all-mode averaging を組み合わせることで行い、さらにポテンシャルの定義として sink 演算子に小さな smearing を入れたスキームを採用することで、従来我々が用いてきた all-to-all 計算 (hybrid 法など) に比べ、約一桁統計精度を改善することに成功した。この手法を用いることでポテンシャルを微分展開の第 2 次オーダー (N2L0) まで決定し、そのポテンシャルを基にして $\pi\pi$ 散乱位相差を計算することで、 ρ メソン共鳴状態の導出に成功した (図 7) [3]。ただし崩壊幅についてはまだ微分展開の打ち切り誤差に起因する系統誤差が大きいため、今後は実験室系の計算も加えて改善する予定である。

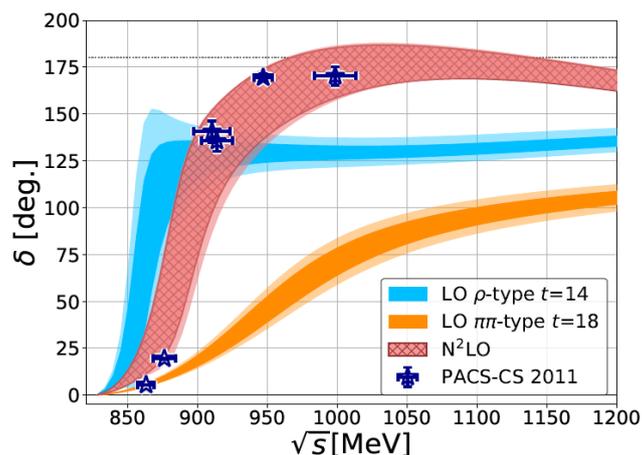


図 7 I=1 P 波 $\pi\pi$ 散乱位相差と ρ メソン共鳴状態

all-to-all 法はバリオン間力計算に対しても、相関関数における非弾性散乱状態の混合に起因する系統誤差を抑制するのに有用であると考えられる。この場合も計算コストが大きくなるが、我々は LapH 法を改良することで一桁～二桁の高速化を達成した (FLapH 法)。また one-end trick をバリオン系に適用することでも all-to-all 計算を高速化できることを見出した。これらの手法を実際に S 波バリオン間力に適用しクォーク質量が重い領域で計算を行った。その結果、実際に非弾性散乱状態の寄与が抑制されることを確認したが、コスト・効果比を考えると、主に P 波バリオン間力の計算に威力を発揮する手法と解った。

[1] Y. Lyu, H. Tong et al., Phys. Rev. Lett. 127 (2021) 072003.

プレスリリース「スパコンで予言する魅惑の新粒子「チャームダイオメガ」 - クォーク 6 個状態の謎の解明に新たな 1 ページが加わる - 」 (2021/08/30)

[2] Y. Lyu et al., Phys. Rev. D 105 (2022) 074512.

[3] Y. Akahoshi et al., Phys. Rev. D 104 (2021) 054510.

(5) [核構造と r 過程]の研究

原子核構造計算の手法に関しては、殻模型直接対角化計算コード“KSHELL”，モンテカルロ殻模型法、準粒子殻模型法の3つを併用している。本年度は準粒子真空殻模型計算コード、モンテカルロ殻模型計算コードの富岳上での開発、機能拡張を進め、任意の状態間の二体遷移行列要素の計算を可能とするとともに、同機能の高速化もおこなった。また、これらの計算手法には角運動量射影におけるオイラー角の三重積分が現れ、計算上のボトルネックとなる。この求積法について検討を加え、Lebedev 求積法を導入することにより旧来手法より少ないサンプル点で計算が実行可能となることを示した。

軽い核の核構造研究に関しては、前年度に引き続き、Hoyle 状態を含む炭素 12 の低励起状態に対してモンテカルロ殻模型による第一原理計算を行った。この成果を含むアルファクラスターに関してまとめた論文が、Nature Communications に受理された。

さらに、初期宇宙や恒星内の元素合成に関連して、軽い核のベータ崩壊やガモフテラー遷移の第一原理計算に着手した。本第一原理計算手法でこの物理量を本格的に計算するのは初めてなので、まずは実験でも測定されている核種に限定して軽い核におけるガモフテラー遷移についてテスト計算を行った。計算で用いた核力はこれまでのものと同じ Daejeon16 二体相互作用を採用し、模型空間は 7 主殻、調和振動子エネルギーは対象とする状態に最適な値 (15MeV 近辺) で 100 基底まで重ね合わせて計算を行った。表 1 に計算した換算遷移確率 (B(GT)) と実験の測定値をまとめる。これらの理論計算値と実験値の比較から、ほぼすべての核種における遷移で計算値が実験値より 1～2 割程度、大きい値が得られていることがわかる。これは、従来の芯を仮定する殻模型計算の傾向と一致しており、メソン交換カレントの寄与によるものと思われる。なお、従来の殻模型計算では、この寄与はクエンチング因子として取り込まれており、今後、本第一原理計算をさらに推し進めることによって、このクエンチング因子の微視的な起源に迫ることができると期待される。

B(GT)	MCSM	EXP
${}^6\text{He } 0^+_1 \rightarrow {}^6\text{Li } 1^+_1$	5.28	4.809(8)
${}^{10}\text{C } 0^+_1 \rightarrow {}^{10}\text{B } 1^+_1$	4.22	3.5101(57)
${}^{12}\text{N } 1^+_1 \rightarrow {}^{12}\text{C } 0^+_1$	0.344	0.2950(21)
${}^{12}\text{B } 1^+_1 \rightarrow {}^{12}\text{C } 0^+_1$	0.357	0.3288(15)
${}^{12}\text{Be } 0^+_2 \rightarrow {}^{12}\text{B } 1^+_1$	1.31	0.624(3)
${}^{14}\text{C } 0^+_1 \rightarrow {}^{14}\text{N } 1^+_1$	0.13	$3.53(2) \times 10^{-6}$
${}^{14}\text{C } 0^+_1 \rightarrow {}^{14}\text{N } 1^+_2$	3.63	2.76(11)
${}^{14}\text{O } 0^+_1 \rightarrow {}^{14}\text{N } 1^+_1$	0.12	$0.202(4) \times 10^{-6}$
${}^{14}\text{O } 0^+_1 \rightarrow {}^{14}\text{N } 1^+_2$	3.81	2.818(106)

表 1 : ガモフテラー遷移強度(B(GT))の理論計算(MCSM)と実験 (EXP) の比較

中重核、重い核の構造の研究

中重核領域の原子核研究分野では、モンテカルロ殻模型法および準粒子真空殻模型により、ニッケル（陽子数 28）、サマリウム（陽子数 62）同位体などの近傍の複数の領域の核種を計算し、理論計算に基づいた原子核構造の研究を進めるとともに、実験グループとも共同研究を行ってきた。ニッケル領域では、チタン 56 周辺の核種について A3DA-m 有効相互作用でモンテカルロ殻模型計算を行い、質量測定に関して実験グループとの共同研究を進めた。また、r プロセスにも関連する中性子過剰核であるニッケル 78 周辺の核種について、pfsdg 模型空間での有効相互作用を用いてモンテカルロ殻模型計算を行い、実験データと比較しての有効相互作用の検討をおこなった。また、中性子過剰ジルコニウム同位体の中性子数変化に伴う形の量子相転移について研究をすすめ、ジルコニウム 108 原子核について理化学研究所 RI ビームファクトリ加速器施設にておこなわれた最新の実験結果と比較検討をすすめ、非軸対称変形を議論した。また、カルシウム 40 原子核における 3 つの 0+ 状態間の E0 遷移確率について、大規模殻模型計算をおこなって最新の実験結果と比較し、3 番目の 0+ 状態から 1 番目の 0+ 状態への遷移確率が小さくなる原因を解明した。

サマリウム領域では、サマリウム、ネオジウム同位体について準粒子真空殻模型計算をおこなった。モンテカルロ殻模型を発展させた手法である準粒子真空殻模型は、対相関が重要となる質量数の大きい原子核やニュートリノレス二重ベータ崩壊の核行列要素をより高い精度で計算できると期待される。図 8 にサマリウム同位体の $J\pi=2+, 4+$ 状態の励起エネルギーの計算値と実験値を比較したものを示す。準粒子真空殻模型計算では有効相互作用のさらなる改良を行っており、モンテカルロ殻模型 (MCSM) による以前の計算結果と比べて、準粒子真空殻模型 (QVSM) の計算結果は実験値をよりよく再現している。また、ネオジウム 150 のニュートリノレス二重ベータ崩壊の核行列要素の計算も行った。サマリウム、ネオジウム同位体の研究成果について論文の準備を進めた。

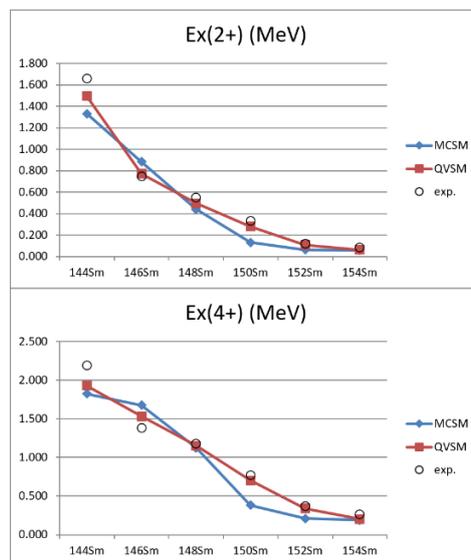


図 8 サマリウム同位体の $J\pi=2+, 4+$ 状態の励起エネルギーの計算値と実験値 (exp.) の比較。

MCSM はモンテカルロ殻模型、QVSM は準粒子真空殻模型による計算値。

CP 対称性の破れを探索するために、永久電気双極子モーメントの探索実験が多くおこなわれている。シッフモーメントは、CP 対称性の破れと永久電気双極子モーメントをつなぐ原子核の物理量であり、核構造計算から理論的に決める必要がある。本研究では、実験で用いられるキセノン原子核のシッフモーメントを、殻模型および準粒子真空殻模型により計算し、磁気双極子モーメントとの相関を明らかにした。本研究では、有効相互作用や模型空間を変えた3つの設定でキセノン 129 原子核の基底状態を殻模型計算で求め、図9の殻模型 (SNV) , 殻模型 (SN100PN) , モンテカルロ殻模型と示されている左上の3点を結果として示した。これら3点とも実験値の磁気モーメントをよく再現している。先行研究の結果 (三角) や、励起状態の結果 (白抜き) のシンボル) を同様に示したところ、シッフモーメントと磁気双極子モーメントに強い相関関係がみられた。磁気双極子モーメントは高精度で測定されているため、この相関関係を利用すればシッフモーメントの不定性を大幅に小さく抑えられると期待される。

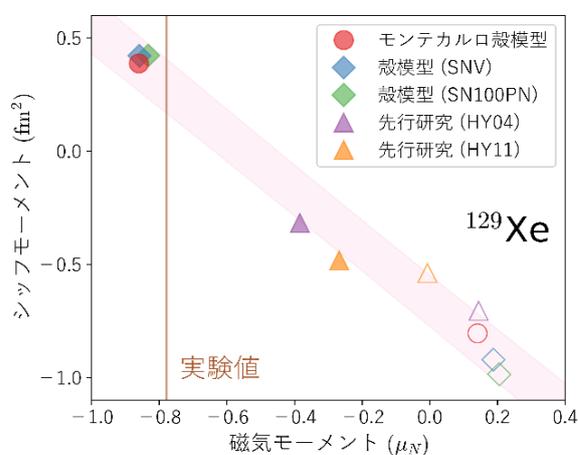


図9 原子核キセノン 129 原子核のシッフモーメントと磁気モーメントの相関

太陽系に存在する鉄よりも重い元素は、超新星爆発または中性子星連星の合体によって生成されたと考えられている。これらのプロセスでは、実験室では生成されない中性子数過剰な原子核を経由する。これは元素合成 r 過程とよばれ、ベータ崩壊と中性子捕獲の繰り返しで重い元素が作られると考えられているが、それらの反応率の高精度の予言はいまだ困難である。本研究では、まず原子核殻模型において直接対角化計算を用い、粒子-ホール励起を制限することによって、計算可能なように模型空間を切り詰めた殻模型計算を実行し、中性子数 82 の中性子過剰核のベータ半減期を求め、図10のような結果を得て研究発表をおこなった。過小評価が見られるものの、本研究結果は実験値を再現するとともに、陽子数が小さい未知の核への予言を与えている。

より研究対象を広げるべく、モンテカルロ殻模型により中性子数 82 近傍の中性子過剰な原子核の質量や半減期を計算した。これらの計算は実験的に得られている質量や半減期を再現し、かつ未知の原子核に対する予言を与えている。

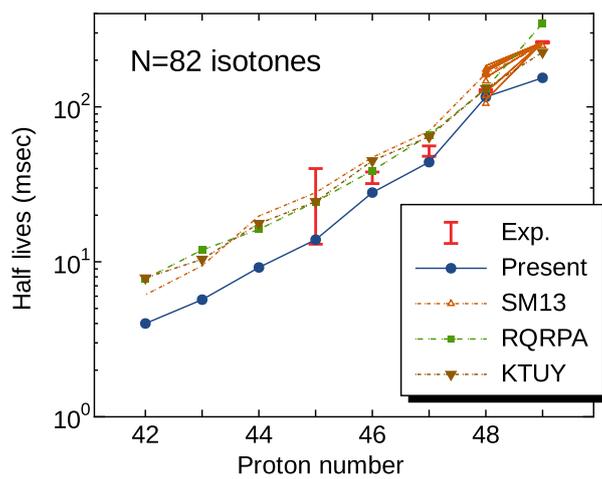


図 10 中性子数 82 の中性子過剰同中性子体の半減期。

Present:本研究結果、Exp.: 実験結果、SM13、RQRPA、KTUY は他の先行研究の結果を示す。

(6) [中性子星合体]の研究

2021年度の研究計画通り、初期条件としてGW170817の重力波観測が示唆する中性子星半径に整合的な相対論的平均場理論に基づく中性子星状態方程式(SFHo)および連星質量比1.2Msun-1.5Msun(Msunは太陽質量)を採用し、数値相対論の枠組みで弱い相互作用、ニュートリノ輻射輸送、一般相対論的磁気流体力学のすべてを考慮したシミュレーションを行った。これまでの研究より高い空間分解能150mを設定し、1段あたり(508グリッド)³の計算領域を13段積み上げた静的多層格子法を用いることで、物理領域として約30万kmをカバーした。

本計算コードではMPIとOpenMPのハイブリッド並列化を実装している。1728並列を4MPI/ノードに分割し、富岳のノード形状に合わせ、6×9×8のグリッド分割をstrictで指定している。効率化については、多重ループ融合とブロック分割、明示的ソフトウェアプリフェッチによるソフトウェアパイプラインングを行い、実行性能6%程度を達成している。

2021年度は、高分解能の首尾一貫した3次元計算によって、連星中性子星合体の合体前段階(インスパイラル)をから合体後の500msまでのシミュレーションを行った。その結果、(1)合体時に放射される重力波波形およびニュートリノ光度、(2)合体後の磁場の増幅過程と磁場増幅に伴って生じる乱流状態(図11)を明らかにするとともに、(3)乱流粘性により駆動されるメカニズムによって放出される質量を定量的に評価した(図12)。我々の結果は、従来仮定されていた磁場構造がより理想化されたものであること、および磁気乱流粘性による質量放出を過大評価している可能性を示唆している。2022年12月から開始予定の重力波観測O4に伴って行われる電磁波対応天体の観測の解析においては、乱流粘性の効果を過大評価していた場合の影響を考慮する必要がある。2. 本研究結果について論文の準備を開始した。

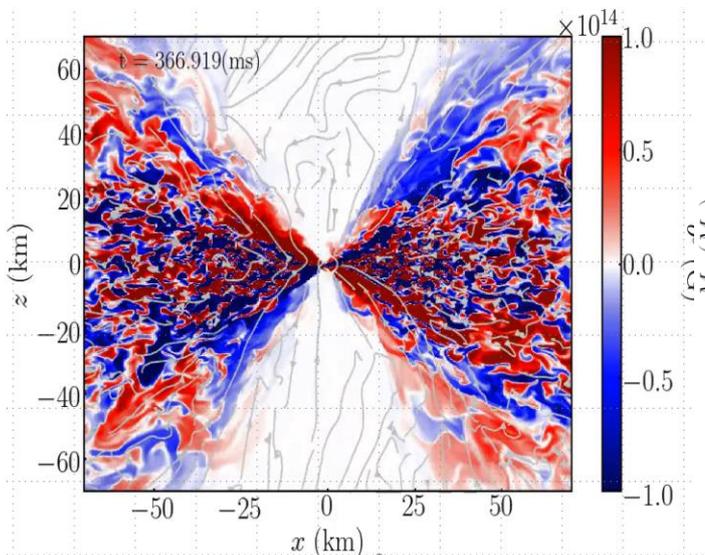


図11: 合体後の磁場の増幅過程と磁場増幅に伴って生じる乱流状態。

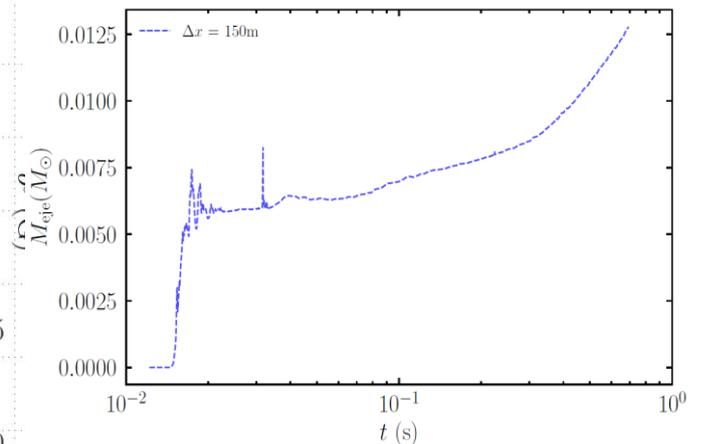


図12: 乱流粘性により駆動される質量放出。横軸は時間、縦軸は太陽質量(M_{\odot})単位の放出質量である。

(7) [時空生成]の研究

超弦理論の非摂動的定式化として提案された行列模型のシミュレーションを行い、(3+1)次元の膨張宇宙が出現することを検証すべく、以下のような研究を行った。まず、令和2年度においては、連続的な時空が現れているが、空間3次元方向のみの膨張は見られなかった。本年度の研究で、この行列模型の素朴な数値シミュレーションでは実の時空が出現しないことを見出した。そこで、この模型の古典解に関する研究に着目し、作用に新たな項を加えることで、実の時空を実現することができた(図13)。

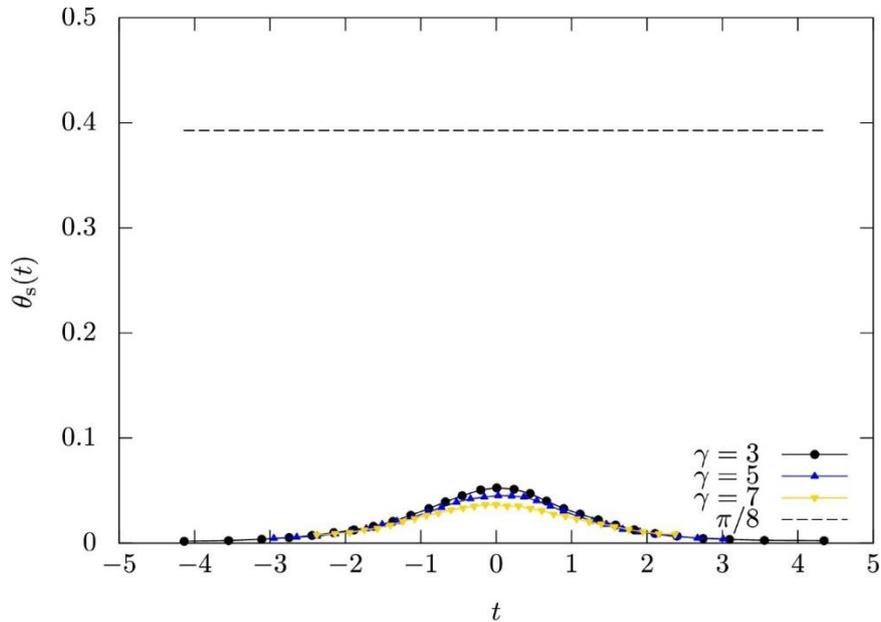


図13：空間のもつ複素位相を時間に対してプロットした図

異なるシンボルは、作用に新たに付け加えた項の係数 γ を3, 5, 7と変えたときの振る舞いを表す。時間 t が原点から離れるにつれ、複素位相が小さくなり、実の空間が生成していることが確認された。

フェルミオンの効果を落として単純化した模型に付加項を導入した場合、連続的で膨張する空間が現れたが、膨張しているのは1次元であった。3次元空間の膨張は、フェルミオンの効果を取り入れることで実現できると考えている。また、この付加項は行列サイズ無限大の極限を取った後に、なくすことができると期待される。

(8) 格子量子色力学コードの富岳向け最適化

本年度は富岳においてこれまでに最適化を行ったアプリケーションプログラムを用いて実計算が本格的におこなわれた。アプリケーションプログラムにはこれまでに最適化を行ったウィルソン・クローバー・フェルミオン用クォーク・ソルバーと5次元ドメインウォール・フェルミオンクォークソルバーが組み込まれている。実計算をおこなうアプリケーションプログラム使用ユーザーからの最適化調整や要望に対するサポートをおこなった。また、富岳本格運用での運用形式に基づいた最適化調整を行った。以上の最適化されたコードについての成果の発表およびソフトウェアの公開をおこなった。

2-3. 活動（研究会の活動等）

領域①「人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓」の本課題「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」および「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」は、計算基礎科学連携拠点として協力し、素粒子・原子核・宇宙・惑星物理分野の計算科学をリードする存在として、さまざまな科学的成果を創出するとともに、計算科学推進体制の構築や分野振興活動を行った。

課題内では、プロジェクトマネージャーが課題代表者のもとで行われるテーマ責任者メール会議などの会議を開催するとともに、テーマ責任者を通じて情報収集、課題内のメーリングリストを通じて情報交換している。特に、複数テーマに関係する QCD コード関係の富岳を使った進捗報告と情報交換の会を前期隔週、後期毎月第4木曜（4/7, 21, 5/12, 26, 6/9, 23, 7/7, 21, 8/4, 25. 9/8, 29, 10/28, 11/25, 12/23, 1/27, 2/24, 3/24）で開催し、進捗状況の確認と情報交換を行った。

課題外では、各種メディアをウォッチし、学会や研究者グループ等のメーリングリストに登録して情報収集を行っている。このような課題内外の情報収集を行うとともに、2課題に所属する素粒子・原子核・宇宙・惑星の4分野にわたる研究者が交流して情報交換する場を設けるためセミナーや研究会を開催した。また、研究内容と成果を広報して国民の理解を得ることは、領域①としては特に重要で、定期的な記事配信などウェブページを通じた成果の公表、イベント等での一般普及活動などを計画していたが、新型コロナウイルスの影響でイベント等での一般普及活動などは実施できなかった。

<セミナー、研究会等>

セミナーや研究会は研究を進めるうえで重要な役割を果たす。特に研究分野の最新の動向を知るのみならず、自身の研究との関係性や今後の発展を考えるため、研究手法の異なる理論や実験・観測の研究者と協力してサイエンスを進めていくためにも必要不可欠なものである。本年度も新型コロナウイルスの影響でセミナーや研究会の開催数は少なく、オンラインによる開催によるものがすべてであった。重点課題⑨から引き続き行われている HPC-Phys 勉強会は計算科学を軸に各分野の交流が活発に行われており、参加者からも好評を得ており前年度に比べて開催数も増えている。セミナーと研究会等は本年度6件が実施され総参加者は計429名であった。

●第11回 HPC-Phys 勉強会

参加者：113名

日時：令和3年6月10日, 11日

場所：オンライン開催

主催：計算基礎科学連携拠点（JICFuS）

共催：理研計算科学研究センター（R-CCS）

概要：物理に軸足を置きつつ数値計算を活発に行っている研究者が集まり、計算の技術的な側面を議論

する集まりの11回目。量子計算をテーマとした勉強会を開いた。

●第12回 HPC-Phys 勉強会

参加者：35名

日時：令和3年8月26日

場所：オンライン開催

主催：計算基礎科学連携拠点（JICFuS）

共催：理研計算科学研究センター（R-CCS）

概要：物理に軸足を置きつつ数値計算を活発に行っている研究者が集まり、計算の技術的な側面を議論する集まりの12回目。「富岳」で用いる演算ライブラリとコードのチューニングに関する講演を2つ行った。

●第13回 HPC-Phys 勉強会

参加者：34名

日時：令和3年11月25日

場所：オンライン開催

主催：計算基礎科学連携拠点（JICFuS）

共催：理研計算科学研究センター（R-CCS）

概要：物理に軸足を置きつつ数値計算を活発に行っている研究者が集まり、計算の技術的な側面を議論する集まりの13回目。「富岳」で用いられる JIT コンパイラに関する講演を行った。

●「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム

参加者：119名

日時：令和4年1月17日,18日

場所：オンライン開催

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「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」・「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」

概要：「富岳」での成果創出を目指して、各課題によるこれまでの研究の進捗とこれからの展望が発表された。

●第14回 HPC-Phys 勉強会

参加者：57名

日時：令和4年2月4日

場所：オンライン開催

主催：計算基礎科学連携拠点（JICFuS）

共催：理研計算科学研究センター（R-CCS）

概要：物理に軸足を置きつつ数値計算を活発に行っている研究者が集まり、計算の技術的な側面を議論

する集まりの14回目。チュートリアル講演を含む形で2名の講演を行った。

●CfCA 流体学校

参加者：基礎編 34 名、応用編 37 名、計 71 名

日時：令和 4 年 3 月 8 日～3 月 10 日、3 月 22 日～3 月 23 日

場所：オンライン開催

主催：国立天文台・天文シミュレーションプロジェクト

後援：「富岳」成果創出加速プログラム「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」「計算基礎科学連携拠点」

概要：基礎編と応用編の2つの日程で開催された。数値流体の基礎や磁気流体力学についてのスクール。

<研究成果の情報発信>

課題で得られた研究成果の普及、社会への情報発信は、計算基礎科学連携拠点（JICFuS）として、領域①「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」および「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描像の構築」が協力し、これまでの JICFuS 広報コンセプトを継続して行っている。

●ウェブサイトの制作・更新管理

領域①「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」のウェブサイト（日・英）を制作し、2020 年 9 月から公開している。

計算基礎科学連携拠点（JICFuS） <http://www.jicfus.jp/jp/>

領域①「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」
https://jicfus.jp/fugaku_pn/jp/

●メディア対応

1) プレスリリースおよびニュースリリース

・スパコンで予言する魅惑の新粒子「チャームダイオメガ」

発表日：令和 3 年 8 月 30 日情報解禁

発表主宰者：理化学研究所、京都大学

メディア掲載：マイナビニュース (9/1)

●ウェブマガジン「月刊 JICFuS」「月刊 JICFuS ムービー」制作

若手研究者を中心にインタビュー記事「月刊 JICFuS」を掲載。本年度はオンライン取材による紹介記事 42 号～43 号の 2 本と、理化学研究所協力による動画による紹介「月刊 JICFuS ムービー」1 本（46 号）を制作した。また、今年度は特別に拠点長による各研究分野の紹介を「月刊 JICFuS」の特別記事「拠点長コラム」として 3 本の掲載を行った。

【月刊 JICFuS】

- ・第 42 号「4 冠を誇るスーパーコンピュータ「富岳」はいかにつくられたのか—格子 QCD アプリケーションからのコデザイン物語」(令和 3 年 11 月 29 日) 理化学研究所 計算科学研究センター 中村宜文 技師
- ・第 43 号「大規模データの高速な共有と解析を実現する広域分散ファイルシステム「Gfarm」」(令和 3 年 12 月 15 日) 筑波大学 計算科学研究センター 建部修見 教授

【月刊 JICFuS ムービー】

- ・第 46 号「Pc ペンタクォークをもとめて—「富岳」でハドロン間相互作用を探る」(令和 4 年 3 月 7 日) 理化学研究所 iTHEMS 杉浦拓也 特別研究員

【拠点長コラム】

執筆者はすべて橋本省二 代表

- ・第 1 号「富岳と SuperKEKB」(令和 3 年 10 月 1 日)
- ・第 2 号「階層をつなぐシミュレーション：クォークから原子核へ」(令和 3 年 11 月 22 日)
- ・第 3 号「原子核ってふしぎ」(令和 4 年 1 月 28 日)

●リーフレット

A3 判変形四つ折り。2 か国語(日・英)で製作し、各種イベントで配布予定。本年度も新型コロナウイルスの影響で各種イベントが中止となったため、前年度に引き続き英語版を製作しオンラインにて公開を行った。

<個別活動、特記事項>

活動として、各テーマの個別活動や特記事項を以下に報告する。

(2) [B 中間子崩壊]の研究

- ・ 第 2 4 回 B ファクトリー物理勉強会

参加者：80 名

日時：令和 3 年 9 月 3 日

場所：オンライン開催

主催：高エネルギー加速器研究機構

概要：SuperKEKB/Belle II 実験の研究者と協力し、理論、実験研究者が B ファクトリー実験で展開すべき物理について議論する国際研究会を開催した。ヨーロッパの国際会議で発表された Belle II 実験の成果の詳細や、標準理論を超える新物理の解明における宇宙論研究と B の物理の研究の相補性についての招待講演が行われた。

- ・ Flavor Physics Workshop 2021

参加者：175 名

日時：令和 3 年 9 月 27-30 日

場所：オンライン開催

主催：高エネルギー加速器研究機構

概要：実験、理論研究の若手育成を目的として、SuperKEKB/Belle II 実験の研究者と協力して開催した。標準理論や実験技術の基礎から新物理探索の最新の状況までの講義を設けた。

(3) [QCD 相構造]の研究

・ YITP workshop QCD phase diagram and lattice QCD

参加者：85 名

日時：令和3年10月25-29日

場所：オンライン開催

主催：京都大学基礎物理学研究所

概要：QCD の有限温度および有限化学ポテンシャルにおける相構造についての最新の研究成果を元に議論を行った。招待講演 18(内国内 7)，ショートトーク 9(6)，ポスター6(4)件の発表があった。

(7) [時空生成]の研究

2 週間に一回、zoom を使ったコラボレーション・ミーティングを行った。これには、KEK に所属するメンバー以外にも、海外からアテネ工科大の Konstantinos Anagnostopoulos 氏、Stratos Kovalkov Papadoudis 氏が参加し、国内からも徳山高専の伊藤祐太氏、静岡大の土屋麻人氏、摂南大の東武大氏が加わった。このミーティングでは、計算結果の議論、今後の指針の議論の他、研究会での発表に関する議論など、多岐にわたる内容が議論された。

2-4. 実施体制

実施項目	実施場所	担当責任者
(1) 事業統括	茨城県つくば市大穂1番地1 大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構	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 理論センター センター長 教授 橋本 省二
(2) [B中間子崩壊]の研究	茨城県つくば市大穂1番地1 大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構	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 理論センター センター長 教授 橋本 省二
(3) [QCD相構造]の研究	兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目1番地26 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター	国立研究開発法人 理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー 青木 保道
(4) [バリオン間力]の研究	埼玉県和光市広沢2番1号 国立研究開発法人理化学研究所仁科加速器科学研究センター	国立研究開発法人 理化学研究所 仁科加速器科学研究センター 専任研究員 土井 琢身
	大阪府茨木市美穂が丘10番地1 国立大学法人大阪大学 核物理研究センター	国立大学法人大阪大学 核物理研究センター 教授 保坂 淳
	京都市左京区北白川追分町 国立大学法人京都大学 基礎物理学研究所	国立大学法人京都大学 基礎物理学研究所 教授 青木 慎也
(5) [核構造とr過程]の研究	東京都文京区本郷七丁目3番1号 国立大学法人東京大学 大学院理学系研究科	国立大学法人東京大学 大学院理学系研究科 原子核科学研究センター 特任准教授 清水 則孝
(6) [中性子星合体]の研究	茨城県つくば市大穂1番地1 大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構	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 理論センター センター長 教授 橋本 省二
(7) [時空生成]の研究	茨城県つくば市大穂1番地1 大学共同利用機関法人	大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構

	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 センター長 教授 橋本 省二
(8) 格子量子色力学コード の富岳向け最適化	広島県東広島市鏡山一丁目3番2 号 国立大学法人広島大学	国立大学法人広島大学 理学研究科 准教授 石川 健一

別添 1 学会等発表実績

(2) [B 中間子崩壊]の研究

学会等発表

1. “Heavy-Heavy and heavy-light form factors from lattice QCD”, Takashi Kaneko, The 19th Conference on Flavor Physics and CP Violation, June 8-11, 2021, Shanghai, China and on-line (hybrid format) (招待講演)
2. “Semileptonic form factors from JLQCD”, Takashi Kaneko, BNL-HET and RBRC Joint Workshop “DWQ@25”, December 25, 2021, Brookhaven National Laboratory (on-line)
3. 「B 中間子崩壊による小林・益川行列要素の決定」、金児隆志、シンポジウム「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」、2022年1月27-28日、オンライン開催

(3) [QCD 相構造]の研究

学会等発表

1. “2+1 flavor fine lattice simulation at finite temperature with domain wall fermion”, Y. Aoki, 38th International Symposium on Lattice Field Theory - Lattice 2021 (online), 2021. 7. 26-30.
2. “2+1 flavor fine lattice simulations for finite temperature with domain wall fermions”, 金森逸作, 日本物理学会 2021 年秋季大会(オンライン), 2021. 9. 15.
3. “2+1 flavor fine lattice simulations for finite temperature with domain wall fermions”, I. Kanamori, poster at YITP workshop QCD phase diagram and lattice QCD, 2021.10.27.
4. “Finite Temperature Fine Lattice Simulation with DWQs”, Y. Aoki, BNL-HET & RBRC Joint Workshop “DWQ@25” (オンライン) [招待講演], 2021. 12. 16.
5. “QCD 相構造: Line of Constant Physics 上の有限温度 QCD”, 金森逸作, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (オンライン) 2022. 1. 17.
6. “QCD phase transition with chiral fermion at fine lattice”, Y. Zhang, poster, 「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会 (オンライン) 2022. 3. 14.
7. “Thermodynamics near the physical point using Möbius domain wall fermions”, 青木保道, 日本物理学会 第 77 回年次大会(オンライン) 2022. 3. 16.

査読論文

1. “Role of the axial $U(1)$ anomaly in the chiral susceptibility of QCD at high temperature”, S. Aoki, Y. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto, C. Rohrhofer, K. Suzuki, PTEP 2022 023B05.
2. “Execution-Cache-Memory modeling and performance tuning of sparse matrix-vector multiplication and Lattice quantum chromodynamics on A64FX”, C. Alappat, N. Meyer, J. Laukemann, T. Gruber, G. Harer, G. Wellein, T. Wettig, CPE(2021)e6512.

(4) [バリオン間力]の研究

査読論文

1. Y. Lyu, H. Tong, T. Sugiura, S. Aoki, T. Doi, T. Hatsuda, J. Meng and T. Miyamoto, Dibaryon with Highest Charm Number near Unitarity from Lattice QCD, Phys. Rev. Lett. Vol.127, 072003 (2021), 2021年8月

学会等発表

1. T. Doi, H. Irie, H. Liang, S. Gongyo and T. Hatsuda, Hybrid Quantum Annealing via Molecular Dynamics, RIKEN-Vancouver Joint Workshop on Quantum Computing, online, 2021年4月, 招待
2. T. Doi, Y. Lyu, H. Tong, T. Sugiura, S. Aoki, T. Hatsuda, J. Meng and T. Miyamoto, Finite volume analysis on systematics of the derivative expansion in HAL QCD method, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021), online, 2021年7月
3. T. Doi, for HAL QCD Collaboration, Three-Nucleon Forces from Lattice QCD, The 10th International Workshop on Chiral Dynamics (CD2021), online, 2021年11月, 招待
4. T. Doi, for HAL QCD Collaboration, YN and YY interactions from Lattice QCD, The 4th International workshop on strangeness nuclear physics (SNP2021), online, 2021年12月, 招待
5. T. Doi, for HAL QCD Collaboration, Status and Prospects of Baryon Interactions from Lattice QCD, Second International Workshop on the Extension Project for the J-PARC Hadron Experimental Facility (2nd J-PARC HEF-ex WS), online, 2022年2月, 招待
6. T. Doi, for HAL QCD Collaboration, Hyperon forces from Lattice QCD, Workshop on J-PARC Hadron Hall Extension HIHR/K1.1, online, 2021年5月, 招待
7. T. Doi, for HAL QCD Collaboration, Probing hadron-hadron interactions from lattice QCD, JPS meeting (Symposium session), online, 2021年9月, 招待
8. 伊藤 悦子(理化学研究所), 物理点におけるハドロン間力の計算に向けて-格子 QCD の配位生成-, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム, オンライン, 日本, 2022年1月

(5) [核構造と r 過程]の研究

学会等発表

1. CI 計算とその発展的手法による大規模原子核構造計算 (口頭発表), 清水則孝, 2021 年度第 2 回 HPCIC 計算科学フォーラム(オンライン開催), 2022/3/28, 国内
2. 殻模型計算による中性子過剰 pf 殻核の構造 (口頭発表), 清水則孝、吉田聡太、角田直文、角田佑介、大塚孝治, 日本物理学会第 76 回年次大会(オンライン開催), 2022/3/17, 国内
3. CI 計算とその発展的手法による大規模原子核構造計算(口頭発表), 清水則孝, 「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム・研究交流会「富岳百景」2021 年度, 2022/3/14, 国内
4. CI 計算とその発展的手法による大規模原子核構造計算(口頭発表), 清水則孝, 第 2 回 HPCIC 計算科学フォーラム(オンライン開催), 2022/3/28, 国内

5. 大規模殻模型計算による中重核構造研究の進展 (口頭発表), 清水則孝, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム(オンライン開催), 2022/1/17, 国内
6. 殻模型計算による N=82, 81 中性子過剰核のガモフテラー遷移(口頭発表), 清水則孝, 宇都野穰, 富樫智章, 日本物理学会 2021 年秋の分科会(オンライン開催), 2021/9/14, 国内
7. Gamow-Teller transition of neutron-rich N=82, 81 nuclei by shell-model calculations (ポスター), N. Shimizu, Y. Utsuno and T. Togashi, 16th International Symposium on Nuclei in the Cosmos (NIC-XVI), 2021/9/25, 国際
8. Ab initio description of nuclear structure in no-core Monte Carlo shell model (口頭発表), T. Abe, XXXII IUPAP Conference on Computational Physics, 2021/8/4, 国際
9. モンテカルロ殻模型による第一原理計算の最近の進展(口頭発表), 阿部喬, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム, 2022/1/18, 国内
10. モンテカルロ殻模型による第一原理計算の進展(口頭発表), 阿部喬, 基研研究会「核力に基づいた原子核の構造と反応」, 2021/12/7, 国内
11. モンテカルロ殻模型を用いた第一原理計算によるヘリウム同位体の構造研究(口頭発表), 阿部喬, 角田佑介, 清水則孝, 宇都野穰, 大塚孝治, 日本物理学会第 76 回年次大会, 2022/3/15, 国内
12. 原子核におけるアルファクラスター発現の第一原理的研究(口頭発表), 大塚孝治, 第 6 回クラスター階層領域研究会, 2022/6/14, 国内
13. Spin contents of Na isotopes towards driplines(口頭発表), 大塚孝治, International Spin Symposium (SPIN2021), 2022/10/20, 国際
14. Shell structure, its 70-year voyage and future(口頭発表), 大塚孝治, C2R2 Seminar Series, 2022/9/9, 10/7, 10/28, 国際
15. What determines the driplines of atomic nuclei ? (口頭発表), 大塚孝治, CNS-RIBF セミナ, 2022/11/5, 国際
16. Impact of monopole effects on driplines, Shape variations and some thoughts on fission (口頭発表), 大塚孝治, Workshop Elements-WA3, TU Darmstadt, 2022/11/8, 11/9, 国際
17. Novel crossover between alpha clustering and quantum liquid in ^{12}C described by First Principles calculation (口頭発表), 大塚孝治, 第 7 回クラスター階層領域研究会 東北大学電子光理学研究センター、仙台, 2022/12/27, 国際
18. Emerging concepts in nuclear structure and its relevance to new shape isomers (口頭発表), 大塚孝治, general ILL webinar organized by College 3, ILL (Online) ラウエランジェバン研究所、グルノーブル, 2022/3/4, 国際
19. 準粒子真空殻模型計算による中重核の構造の研究 (口頭発表), 角田佑介, 清水則孝, 大塚孝治, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021/9/15, 国内
20. 準粒子真空殻模型計算による Sm 領域の核構造の研究 (口頭発表), 角田佑介, 清水則孝, 大塚孝治, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022/3/17, 国内
21. キセノン原子核のシッフモーメントと中性子 EDM 探索 (口頭発表), 柳瀬宏太, 清水則孝, 東山幸司, 吉永尚孝, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022/3/17, 国内
22. Present status of large-scale shell-model calculations for photonuclear reactions (口頭発表)

- 表), 宇都野穰, Second PANDORA Workshop, 2021/9/10, 国際
23. 大規模殻模型計算による M1 バンドの解析 (口頭発表), 宇都野穰、角田佑介、清水則孝, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021/9/15, 国内
 24. 非イラスト領域における原子核の秩序の探求 (口頭発表), 宇都野穰, RCNP での次期計画検討会, 2021/9/27, 国内
 25. Cluster formation in nuclei from first-principles Monte Carlo shell model (口頭発表), 宇都野穰, 第 7 回クラスター階層領域研究会, 2021/12/27, 国内

査読論文

1. Moments and radii of exotic Na and Mg isotopes, T. Otsuka, N. Shimizu and Y. Tsunoda, Phys. Rev. C 105, 014319 (2022), 2022 年 1 月, 国際
2. Coexisting normal and intruder configurations in ^{32}Mg , N. Kitamura, ..., N. Shimizu, ..., Y. Utsuno, ..., Phys. Lett. B 822, 136682 (2021)., 2021 年 9 月, 国際
3. Ground-state properties of light $4n$ self-conjugate nuclei in no-core Monte Carlo shell model calculations with nonlocal NN interactions, T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, and J. P. Vary, Phys. Rev. C 104, 054315 (2021)., 2021 年 11 月, 国際
4. Generator-coordinate methods with symmetry-restored Hartree-Fock-Bogoliubov wave functions for large-scale shell-model calculations, N. Shimizu, T. Mizusaki, K. Kaneko, and Y. Tsunoda, Phys. Rev. C 103, 064302 (2021)., 2021 年 6 月, 国際
5. " α -Clustering in Atomic Nuclei from First Principles with Statistical Learning and the Hoyle State", T. Otsuka, T. Abe, T. Yoshida, Y. Tsunoda, N. Shimizu, N. Itagaki, Y. Utsuno, J. Vary, P. Maris, and H. Ueno, Nature communications, 13, 2234 (2022)., 2022 年 4 月, 国際
6. beta-decay half-lives of neutron-rich $N=82, 81$ isotones by shell-model calculations, N. Shimizu, Y. Utsuno and T. Togashi, EPJ Web of Conferences 260, 11049 (2022)., 2022 年 2 月, 国際
7. "Emerging Concepts in Nuclear Structure Based on the Shell Model", T. Otsuka, Physics 4, 258-285 (2022)., 2022 年 2 月, 国際
8. Electric monopole transition from the superdeformed band in ^{40}Ca , E. Ideguchi, ..., N. Shimizu and Y. Utsuno, Physical Review Letters, 印刷中, 2022 年 5 月, 国際
9. 準粒子真空殻模型と「富岳」で拓く大規模殻模型計算のフロンティア, 清水則孝、角田佑介, 原子核研究 第 66 巻 2 号 p.86, 2022 年 3 月, 国内
10. In-beam gamma-ray spectroscopy of ^{32}Mg via direct reactions, N. Kitamura, ..., N. Shimizu, ..., Y. Utsuno, ..., Phys. Rev. C 105, 034318 (2022), 2022 年 3 月, 国際
11. A first glimpse at the shell structure beyond ^{54}Ca : Spectroscopy of ^{55}K , ^{55}Ca , and ^{57}Ca , T. Koiwai, ..., N. Shimizu, Y. Utsuno, ..., Physics Letters B 827, 136953 (2022), 2022 年 4 月, 国際
12. Investigation of the ground-state spin inversion in the neutron-rich $^{47, 49}\text{Cl}$ isotopes, B. D. Linh, ..., N. Shimizu, ..., Y. Utsuno, ..., Phys. Rev. C 104, 044311 (2021), 2021 年 9 月,

国際

13. Constructing approximate shell-model wavefunctions by eigenvector continuation, S. Yoshida and N. Shimizu, Prog. Theor. Exp. Phys. <https://doi.org/10.1093/ptep/ptac057>, 2022年4月, 国際

(6) [中性子星合体]の研究

学会等発表

1. 木内建太, 重力波天文学時代における数値相対論による波源のモデリング (Invited), 日本物理学会シンポジウム (on-line), 2021年3月
2. 関口雄一郎, On kilonova AT 2017gfo - Current status and future prospects - (Invited), J-GEM Collaboration Kickoff Workshop (on-line), 2021年7月2日
3. Kenta Kiuchi, Recent progress of numerical relativity simulations of compact objects and its application to gravitational wave astrophysics (Invited), RESCEU SUMMER SCHOOL (on-line), 2021 Aug.
4. Kenta Kiuchi, Numerical modeling of gravitational wave sources in multi-messenger astronomy era (Invited) Institute for Advanced Study Colloquium (on-line), 2021 Nov.
5. Kenta Kiuchi, Numerical modeling of gravitational wave sources in multimessenger, astronomy era (Invited), The 30th Workshop on General Relativity and Gravitation in Japan (on-line), 2021 Dec.
6. Yuichiro Sekiguchi, Neutron Stars, black holes and gravitational waves (Invited), International School for Strageness Nuclear Physics 2021, RCNP, 2021, Dec. 16

(7) [時空生成]の研究

学会等発表

1. “A new phase in the Lorentzian type IIB matrix model and the emergence of continuous space-time”, Mitsuaki Hirasawa, The 38th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021), July 27, 2021, Online (MIT, USA).
2. “Relationship between the Euclidean and Lorentzian versions of type IIB matrix model”, Kohta Hatakeyama, The 38th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021), July 27, 2021, Online (MIT, USA).
3. 「タイプ IIB 行列模型におけるユークリッド的時空からローレンツ的時空への転移」, 平沢光昭, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月 14 日, オンライン開催.
4. 「タイプ IIB 行列模型におけるユークリッド的初期宇宙と回転対称性の破れ」, 畠山洗太, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月 14 日, オンライン開催.
5. “Signature change of the emergent space-time in the IKKT matrix model”, Jun Nishimura, Corfu2021: Workshop on Quantum Geometry, Field Theory and Gravity, September 22, 2021, Online (Corfu, Greece).
6. “Studies of the space-time emerging from the matrix model for superstrings”, 東武大, 第

8回 HPCI システム利用研究課題 成果報告会, 2021年10月29日, オンライン開催.

7. “The emergence of space-time in a matrix model formulation of superstring theory”, Jun Nishimura, YITP workshop Recent Progress of Quantum Cosmology, November 8, 2021, Online (YITP, Japan).
8. “Complex Langevin studies of the emergent space-time in the type IIB matrix model”, Kohta Hatakeyama, East Asia Joint Symposium on Fields and Strings 2021, November 25, 2021, Osaka City University, Japan.
9. “Signature change of the space-time in the type IIB matrix model”, Kohta Hatakeyama, KEK Theory Workshop 2021, December 9, 2021, Online (KEK Theory Center, Japan).
10. 「超弦理論の非摂動的定式化における時空生成の数値的研究～これまでの経緯について」, 平沢光昭, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム, 2022年1月18日, オンライン開催 (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).
11. 「超弦理論の非摂動的定式化に対する新しい付加項の導入と実時間・実空間の出現」, 畠山洗太, 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム, 2022年1月18日, オンライン開催 (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).
12. “Complex Langevin studies of the signature change of spacetime in the type IIB matrix model”, Takehiro Azuma, The 4th R-CCS International Symposium, February 7, 2022, Online (RIKEN Center for Computational Science (R-CCS), Japan).
13. 「超弦理論の数値シミュレーションにおける時空の創発」, 畠山洗太, 「富岳」成果創出加速プログラム シンポジウム「富岳百景」研究交流会, 2022年3月14日, オンライン開催 (主催: 一般財団法人高度情報科学技術研究機構).
14. 「タイプ IIB 行列模型における時空の符号変化」, 畠山洗太, 日本物理学会第 77 回年次大会(2022年), 2022年3月15日, オンライン開催.

(8) 格子量子色力学コードの富岳向け最適化

学会等発表

1. Issaku Kanamoari, Ken-Ichi Ishikawa and Hideo Matsufuru, “Multigrid solver for Lattice QCD on Fugaku”, The 4th R-CCS International symposium (Feb. 7-8, 2022), Poster by I. K. Feb 8.
2. Issaku Kanamori, Ken-Ichi Ishikawa, and Hideo Matsufuru, “Object-Oriented Implementation of Algebraic Multi-grid Solver for Lattice QCD on SIMD Architectures and GPU Clusters”, In: Computational Science and Its Applications - ICCSA 2021, Lecture Notes in Computer Science, vol 12953. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-86976-2_15; (Sept 13-16, 2021), Talk by I. K. Sept 15.
3. Ken-Ichi Ishikawa, Issaku Kanamori and Hideo Matsufuru, “Multigrid solver on Fugaku”, PoS(LATTICE2021)278, arXiv:2112.00501 [hep-lat], the 38th International Symposium on

Lattice Field Theory (Lattice 2021), 26-30 July, 2021, Zoom/Gather@Massachusetts Institute of Technology, Talk by I.K. July 28.

4. Ken-Ichi Ishikawa, Issaku Kanamori, Hideo Matsufuru, Ikuo Miyoshi, Yuta Mukai, Yoshifumi Nakamura, Keigo Nitadori, Miwako Tsuji, “102 PFLOPS Lattice QCD quark solver on Fugaku”, e-Print arXiv:2109.10687 [hep-lat], submitted to Computer Physics Communications.
5. Yutaro Akahoshi et al. (Bridge++ Project), “Lattice QCD code set Bridge++ 2.0 and its performance tuning on Fugaku”, The 4th R-CCS International symposium (Feb. 7-8, 2022), Poster by H.M. Feb 7.
6. Yutaro Akahoshi et al., “General purpose lattice QCD code set Bridge++ 2.0 for high performance computing”, 32nd IUPAP Conference on Computational Physics (CCP 2021) (1-5 August 2021, Online, United Kingdom), Talk by I.K., August 3; Proceedings in J. Phys.: Conf. Ser. 2207 (2022) 012053, e-Print arXiv:2111.04457 [hep-lat].
7. 赤星友太郎, 青木慎也, 青山龍美, 金森逸作, 金谷和至, 松古栄夫, 滑川裕介, 根村英克, 谷口裕介 (Bridge++ project), 「格子 QCD 共通コード Bridge++ 2.0」, 日本物理学会 第 77 回年次大会 (2022 年 3 月 15 日-19 日、オンライン) .

公開ソフトウェア:

1. Ken-Ichi Ishikawa, Issaku Kanamori, “jacobi2d: Test program for Double Buffering for stencil applications”, <https://github.com/RIKEN-LQCD/jacobi2d>
2. Yoshifumi Nakamura, Yuta Mukai, Ken-Ichi Ishikawa, Issaku Kanamori, “QWS: Lattice quantum chromodynamics simulation library for Fugaku and computers with wide SIMD”, <https://github.com/RIKEN-LQCD/qws>