

分野5

『物質と宇宙の起源と構造』の目指すもの —素粒子・原子核・宇宙の融合—

統括責任者 筑波大学・計算基礎科学連携拠点
青木慎也

次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2010および

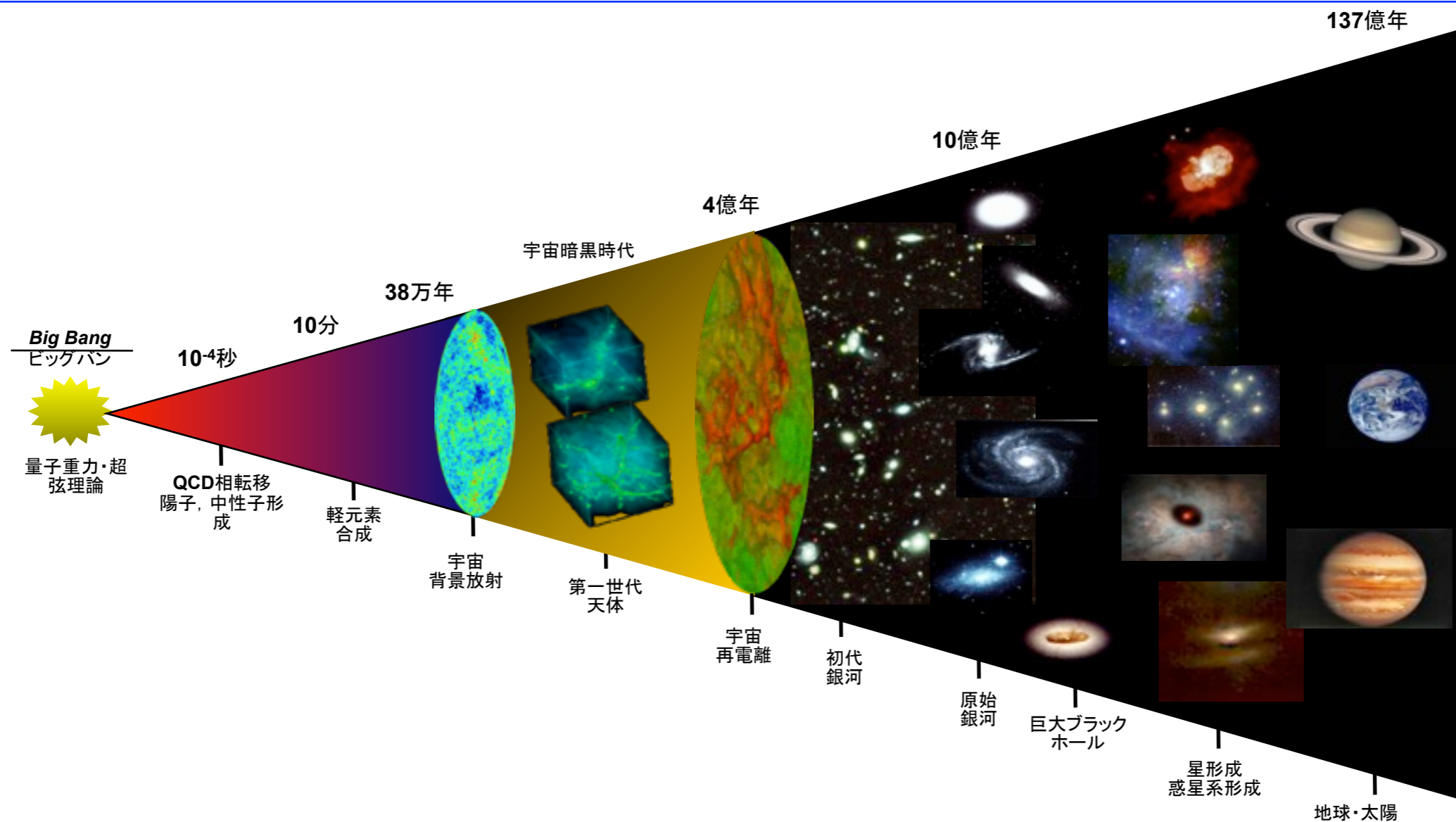
第1回戦略プログラム5分野合同ワークショップ

2011年1月17日、ニチイ学館神戸ポートアイランドセンター、神戸

戦略目標

ビッグバンに始まる宇宙の歴史に於ける、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。**

物理学の基本法則に基づいて、素粒子・原子核から星・銀河に及ぶ幅広いスケールのシミュレーションを実行し、宇宙が現在の姿を持つに至った歴史を、それぞれ定量的に理解する。



分野5と専用計算機

素粒子分野 90年代に世界各地で専用計算機の開発が盛んに行われた

CM5(USA)：ファイマン教授が関係。 GF11(USA)：ワインガルテン氏(IBM)が開発。

APEシリーズ(イタリア)

Columbia Machine -> QCDSPP->QCDOC->QCDCQ (USA)

QCDPAX -> CP-PACS -> PACS-CS (日本)

1996年にTOP500の1位を獲得

スカラー型超並列計算機のトレンドの決定

専用計算機が商用機に発展

CP-PACS-> SR2201 (日立)

QCDOC-> BlueGene/L (IBM), QCDCQ=BlueGene/Q(IBM)

宇宙物理分野

GRAPE(**GRA**vity **PI**PE)シリーズ(日本)：数々のゴードンベル賞を受賞。



GRAPE@天文台

GPGPUなどの演算加速器の先駆け

QCDPAX



CP-PACS



PACS-CS



「京」で実行する重点研究課題

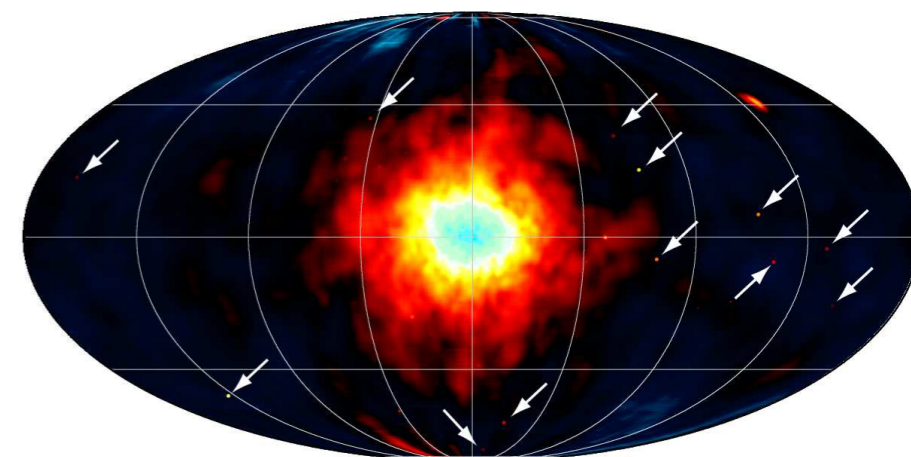
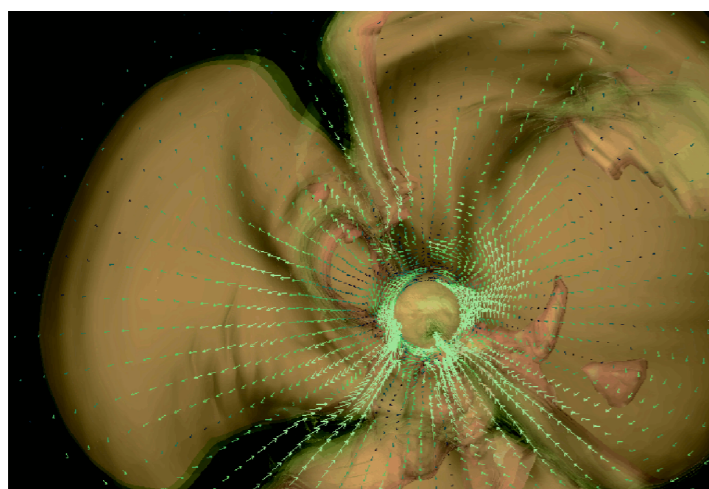
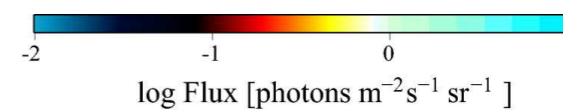
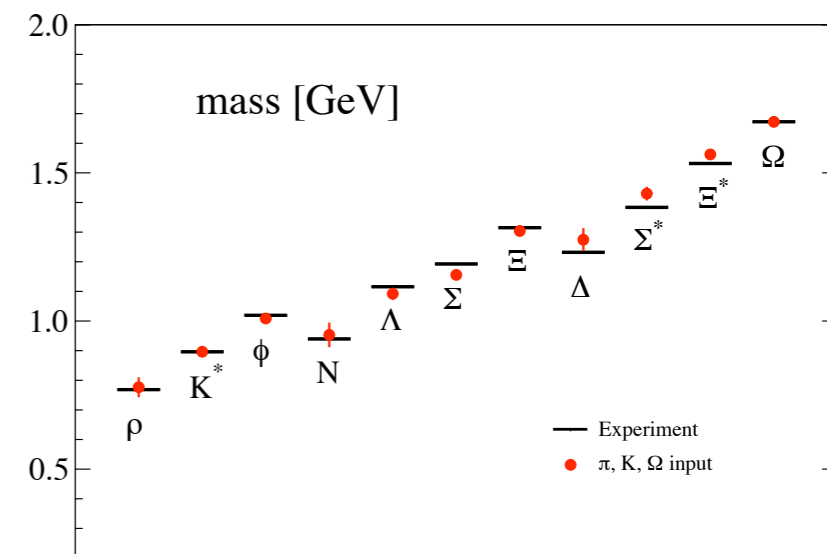
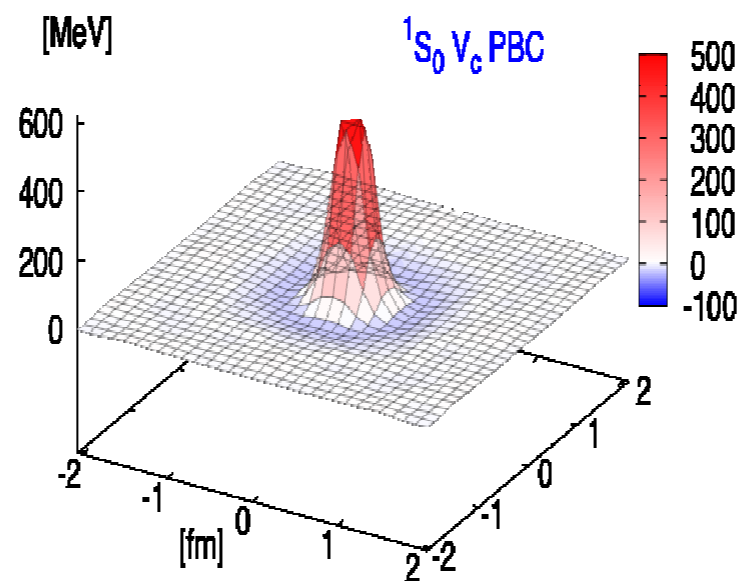
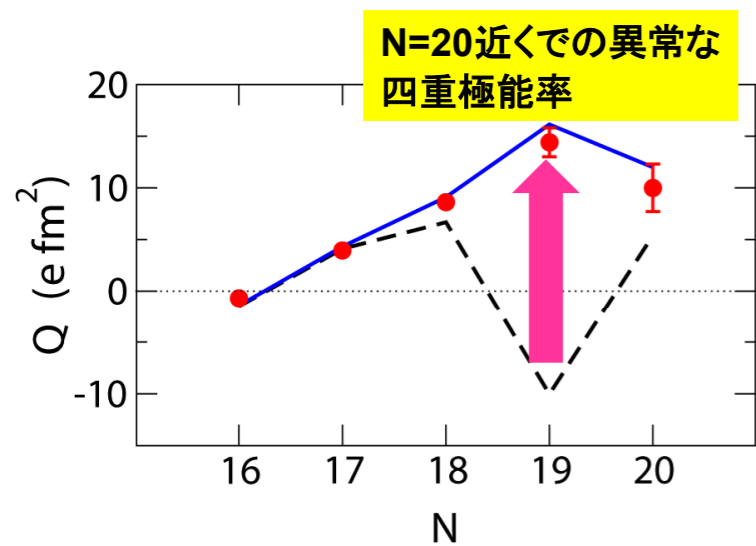
素粒子・原子核・宇宙分野の相互に関連する最先端の研究課題 4 テーマ

(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明

(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代星形成



分野5で使われる物理法則

宇宙物理：（主に）古典物理

ニュートン重力、一般相対論、電磁気学、流体力学、ニュートリノ輻射

原子核物理：（主に）量子力学

（多体）シュレディンガー方程式

素粒子物理：（主に）場の量子論

QED, QCD, Weinberg-Salam model

(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

QCD(Quantum ChromoDynamics: 量子色力学)

クォークとそれを結びつけるグルーオンの力学



ハドロン：クォークの束縛状態

例：陽子(uud)、中性子(udd)

π 中間子 ($u\bar{u}$, $d\bar{d}$, $u\bar{d}$, $d\bar{u}$)



10^{-13} cm = 1 fm

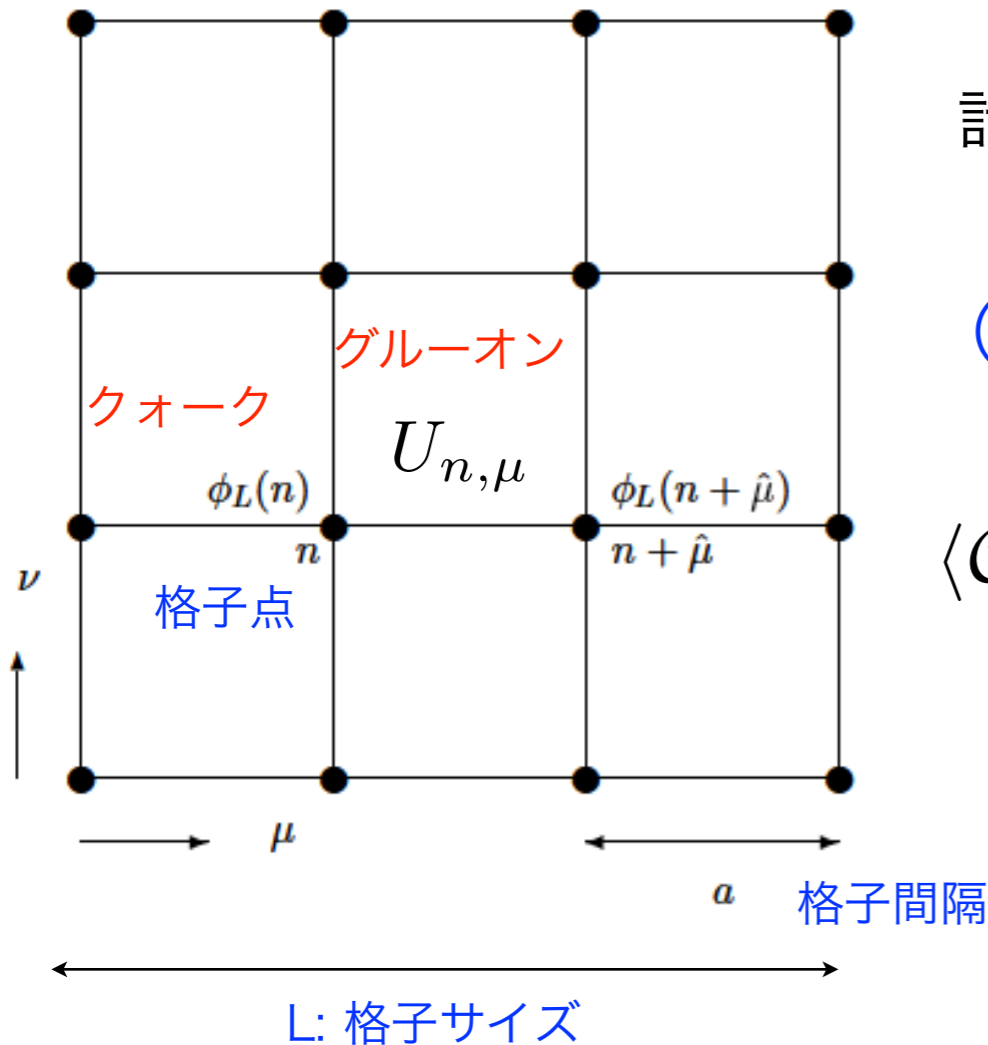
QCDの性質

- 相互作用はクォークの種類に依らない (相互作用の普遍性)
- 近距離／高エネルギーで相互作用は弱くなる (漸近的自由性)
- 遠距離／低エネルギーでは相互作用が強くなる (クォークの閉じ込め)

相互作用しないクォークを基礎におく摂動展開は使えない。
新しい計算方法が必要。

格子QCD

連続な時空間を、離散的な格子空間に置き換え、そこにQCDを定義したもの。



計算すべき量：“物理量”の期待値

確率的（量子力学的性質）

（経路）積分表示

$$\langle \mathcal{O} \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int \prod_{n,\mu} dU_{n,\mu} \mathcal{O}(\{U\}) \frac{\det D(\{U\}) e^{-S_G(\{U\})}}{\text{確率分布}}$$

物理量

$$Z \equiv \int \prod_{n,\mu} dU_{n,\mu} \det D(\{U\}) e^{-S_G(\{U\})}$$

$\{U\} = \{\forall U_{n,\mu}\}$ すべてのグルーオン（ゲージ）の集合

“ゲージ配位”

自由度の数（実数として） $\left(\frac{L}{a}\right)^4 \times 4 \times 8$

Uの数値的な区分求積は不可能

例 $\frac{L}{a} = 10$ メッシュ10の区分求積 \Rightarrow $10^{3.2 \times 10^5}$ Flop

10 Peta Flopsの計算機で 10^{319975} 年必要!

積分に効く部分のみを計算 することが必要 (important sampling)

もう1つの問題

$$\det D(\{U\})$$

$$D(\{U\}) : \left[\left(\frac{L}{a} \right)^4 \times 24 \right] \times \left[\left(\frac{L}{a} \right)^4 \times 24 \right]$$

大規模 (疎) 行列、行列式の評価には膨大な計算量が必要。

計算手順 (モンテカルロ法)

1. ゲージ場 U を以下の確率で生成(important sampling)

$$P(\{U\}) \propto \det D(\{U\}) e^{-S_G(\{U\})} \quad \text{一番計算時間がかかる部分}$$

2. 物理量を計算。 $\mathcal{O}(\{U\})$

3. 1に戻り、繰り返す $\{U_1\} \rightarrow \{U_2\} \rightarrow \dots \rightarrow \{U_N\}$

4. たくさん集めたら平均(期待値) を計算。

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(\{U_i\}) \longrightarrow \frac{1}{Z} \int d\{U\} \det D(\{U\}) e^{-S_G(\{U\})} \mathcal{O}(\{U\})$$

実際には、 $\det D(\{U\})$ ではなく $D^{-1}(\{U\})$ を計算する。

”格子QCDのモンテカルロ・シミュレーション”

ハドロン質量の計算

ここでは質量の軽いup,down,strangeの3つを考える。ただし、質量は $m_l = (m_u + m_d)/2, m_s$ として、upとdownの質量差は考えない。 (最近は質量差は取り入れる試みあり。)

自由にとれるパラメタは3つ ゲージ結合定数 (格子間隔を決めることに対応), m_l, m_s

3つのハドロン質量の実験値を格子QCDの計算が再現するという条件で、 a, m_l, m_s が決まる。しかしながら、 m_l を物理点に取るのは難しい。 "物理点"のクォーク質量と呼ぶ

$m_l \sim \frac{1}{25} m_s \Rightarrow D^{-1}(\{U\})$ の計算コストはクォーク質量の逆数に比例

物理点での計算コストは膨大。

モンテカルロ・シミュレーションにおけるいろいろな条件

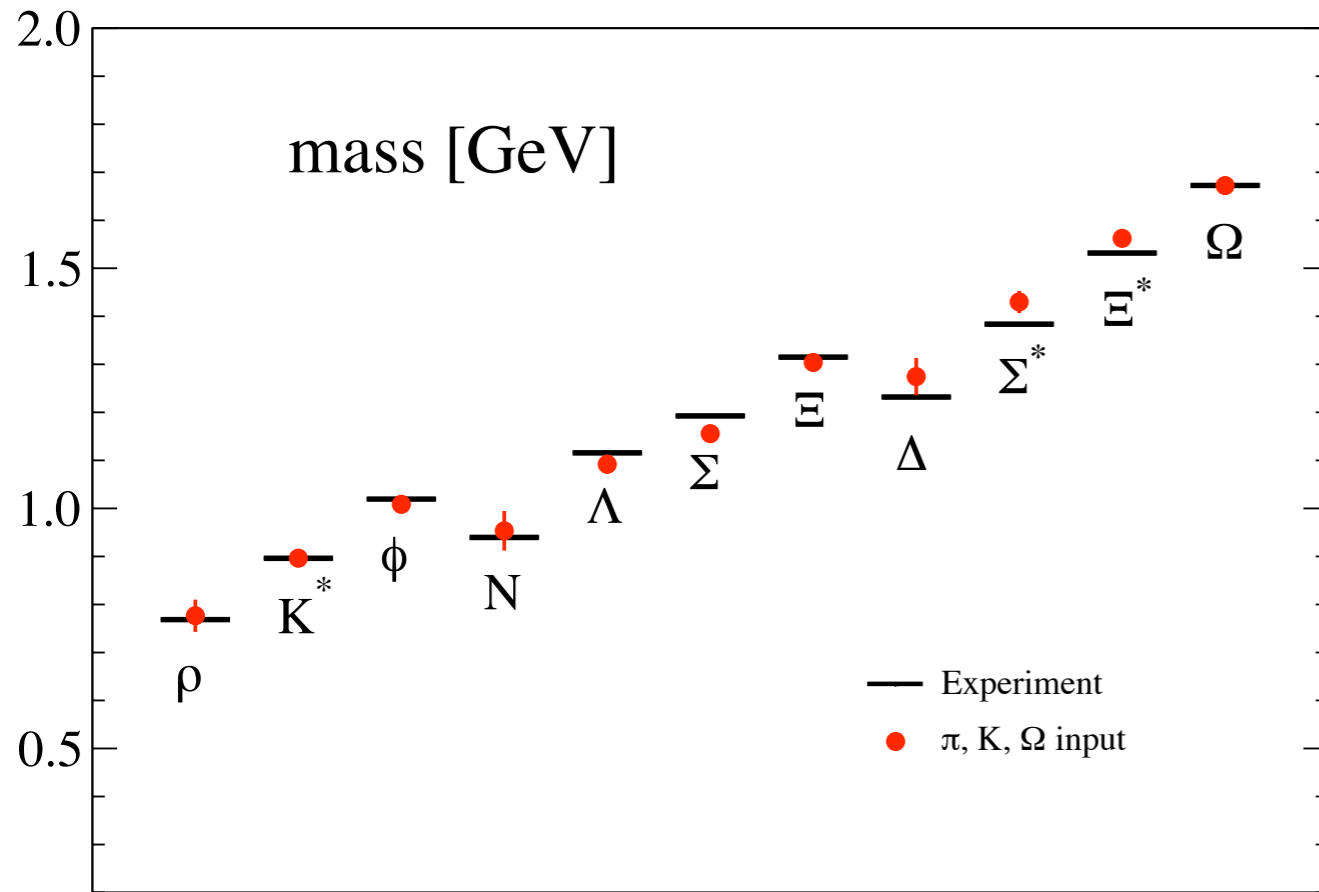
1. 独立なゲージ配位の数 N : 統計精度と関係
2. 格子サイズ L : 大きい方が良いが、計算コストが増える

$m_\pi L \geq 4 \sim 5$ なら系統誤差は小さい (経験的)

物理点では、 $L=6\text{fm}$ 以上が必要。

π 中間子の質量 (系の中で一番軽い。物理点では140MeV)

3. 格子間隔 a : 現在は、 $a=0.1-0.05$ fm程度。ゼロへの外挿が必要 (連続極限)
4. クォーク質量を物理点に取る。取れない場合は、重いところから外挿。



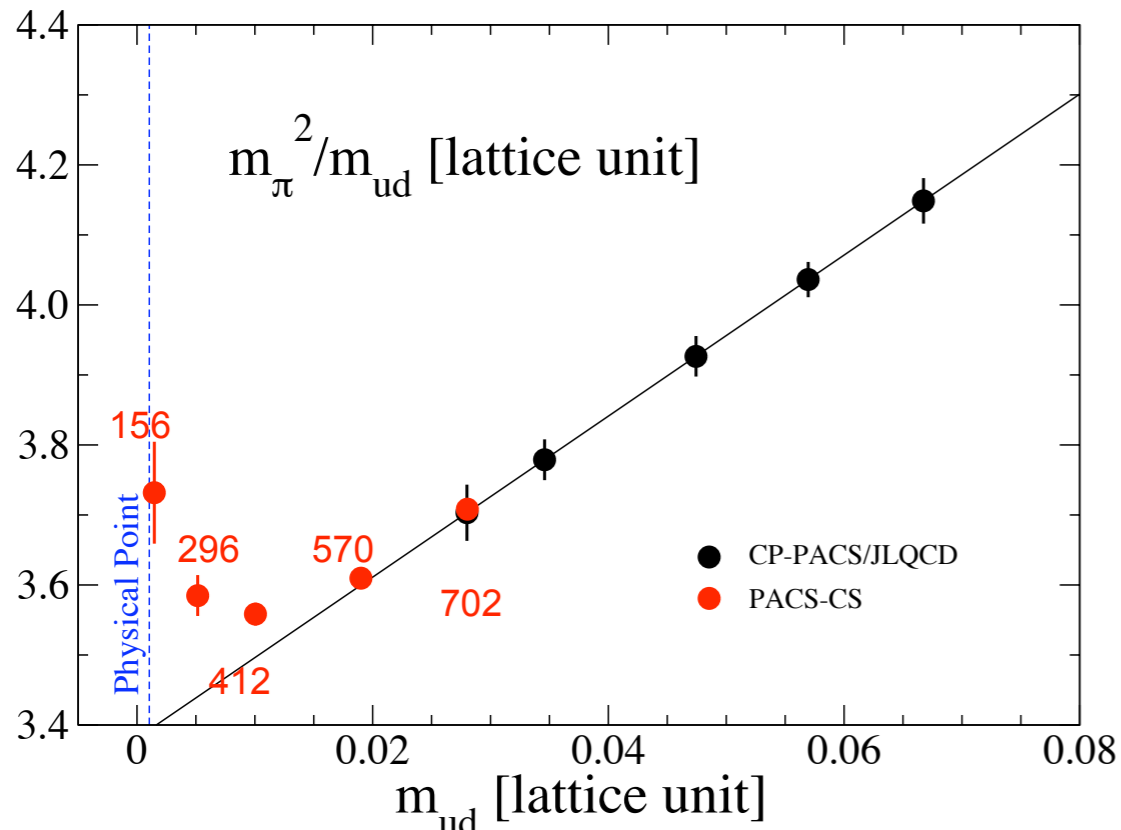
$a = 0.09 \text{ fm} \quad L = 2.9 \text{ fm}$

$m_\pi^{\text{min.}} = 156 \text{ MeV} \quad m_\pi L = 2.3$

ほぼ物理点上での計算が可能
(外挿不要)

10の予言値が実験値をほぼ再現。

カイラル外挿の様子



振る舞いは単純ではない

$m_\pi L > 4$

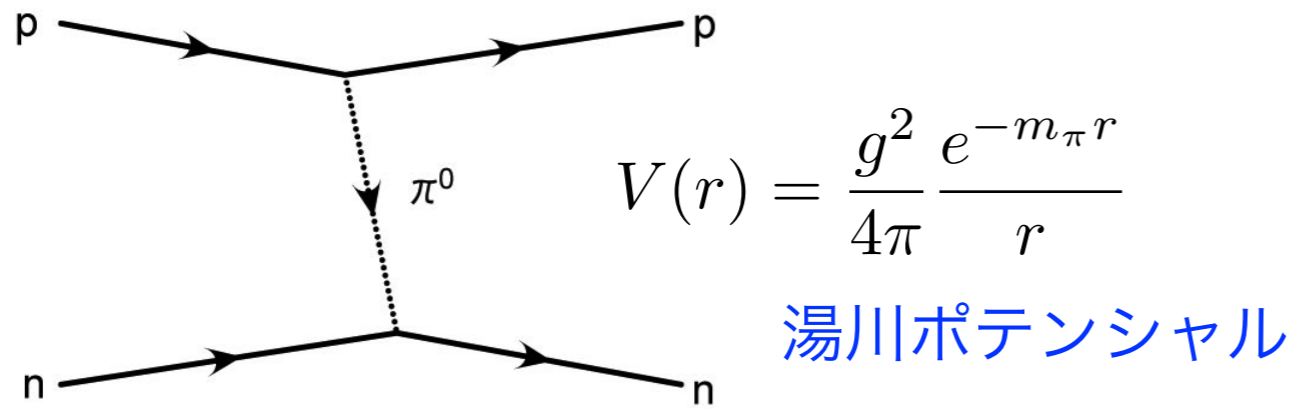
現在、大きな体積 $L=5.8 \text{ fm}$ かつ
 $m_\pi \simeq 140 \text{ MeV}$ の計算が進行中

“真のQCD計算”

より複雑な物理量の計算

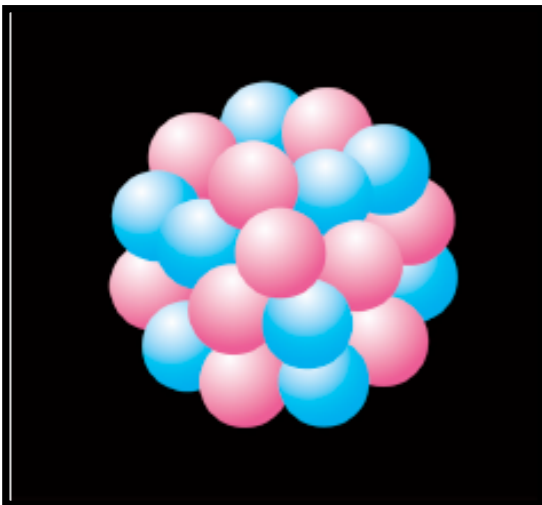
核力：核子（陽子や中性子）を原子核内に束縛する力

1935年：湯川博士は、仮想的な粒子（ π 中間子）を導入して核力の起源を説明した。

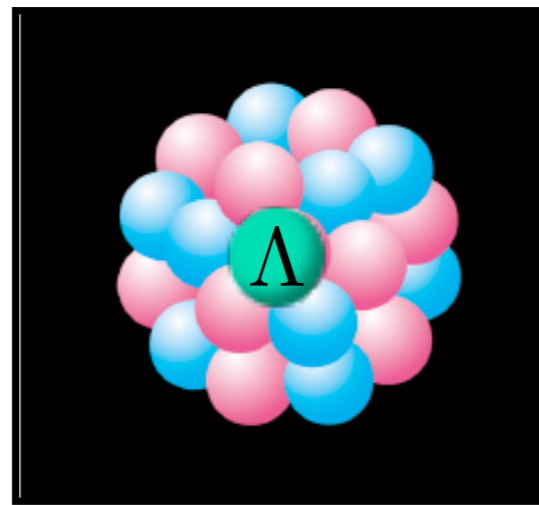


1949年にノーベル賞受賞

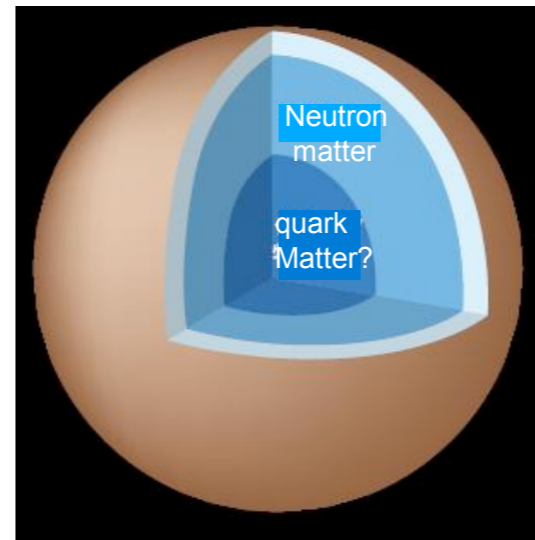
核力の重要性



原子核やハイパー原子核の構造



ハイペロン(Υ):ストレンジクォークを含んだバリオン



中性子星の最大質量
や内部構造



超新星爆発の起爆

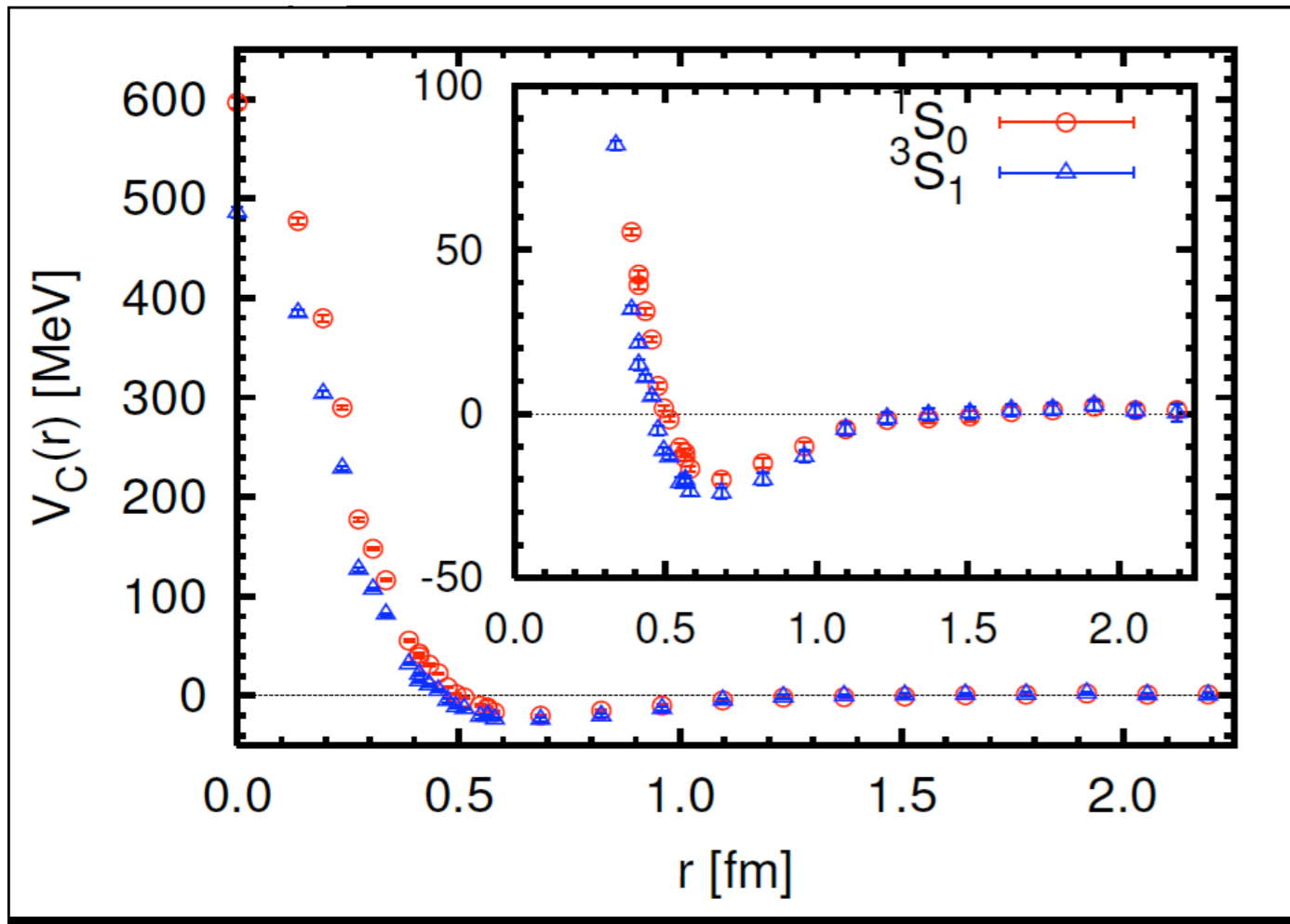
核力ポテンシャルの格子QCDによる計算

クエンチ近似の格子QCDで得られた
核力ポテンシャル

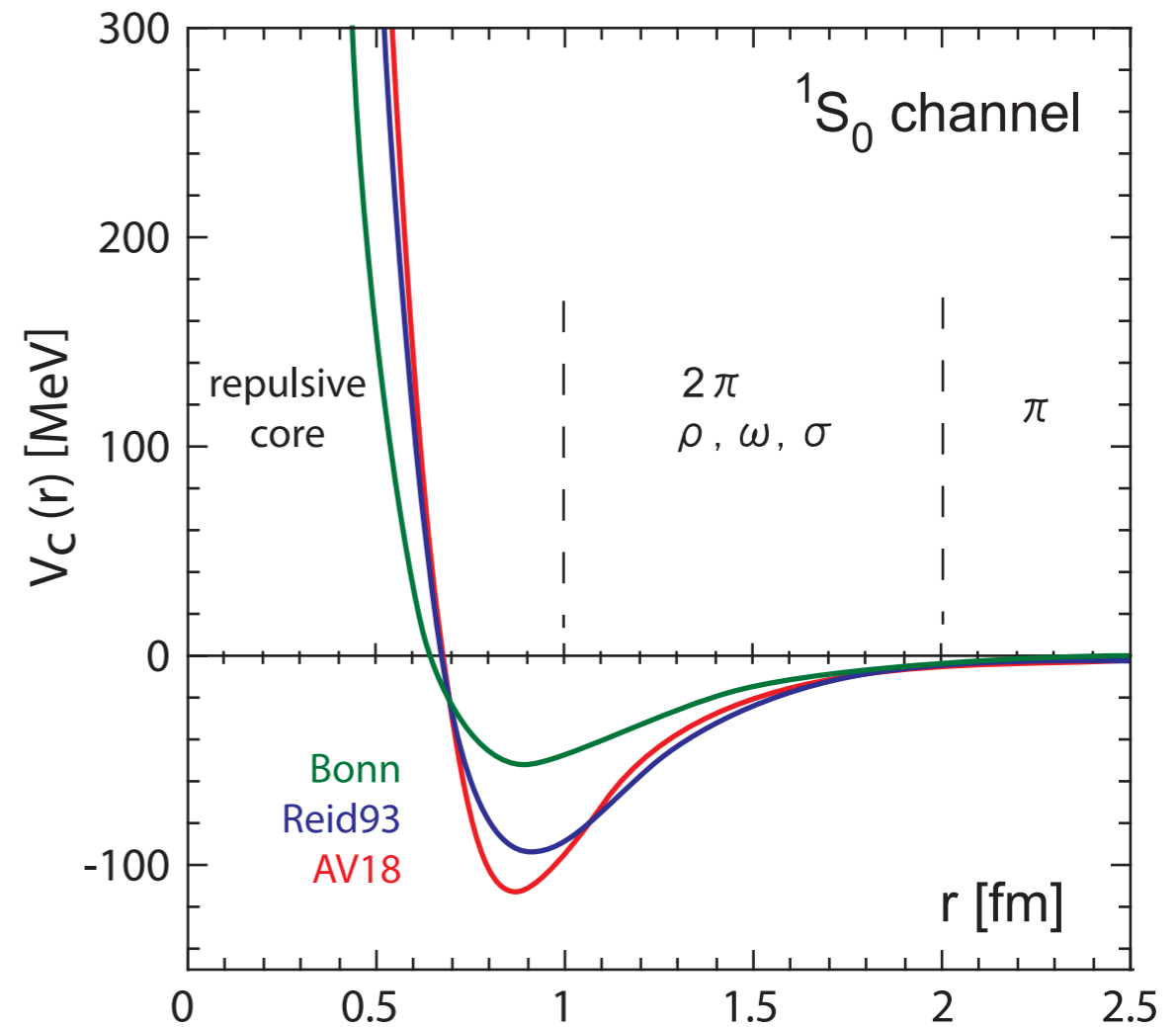
$m_\pi \simeq 0.53 \text{ GeV}$

$a=0.137 \text{ fm}$

$L=4.4\text{fm}$



実験から決められた
現象論的核力ポテンシャル



核力ポテンシャルの定性的な性質が再現された！

Ishii-Aoki-Hatsuda, PRL90(2007)0022001

Nature Research Highlights 2007 の 21 論文の 1 つに選ばれた。

「京」での計算の目標

1. 物理点での格子QCD計算の完成

高精度、大体積、連続極限

u,dの質量差、電磁相互作用

軽い原子核の直接計算

2. 物理点の格子QCDを使った核力、バリオン間力の決定

重陽子が束縛することを示せるか？

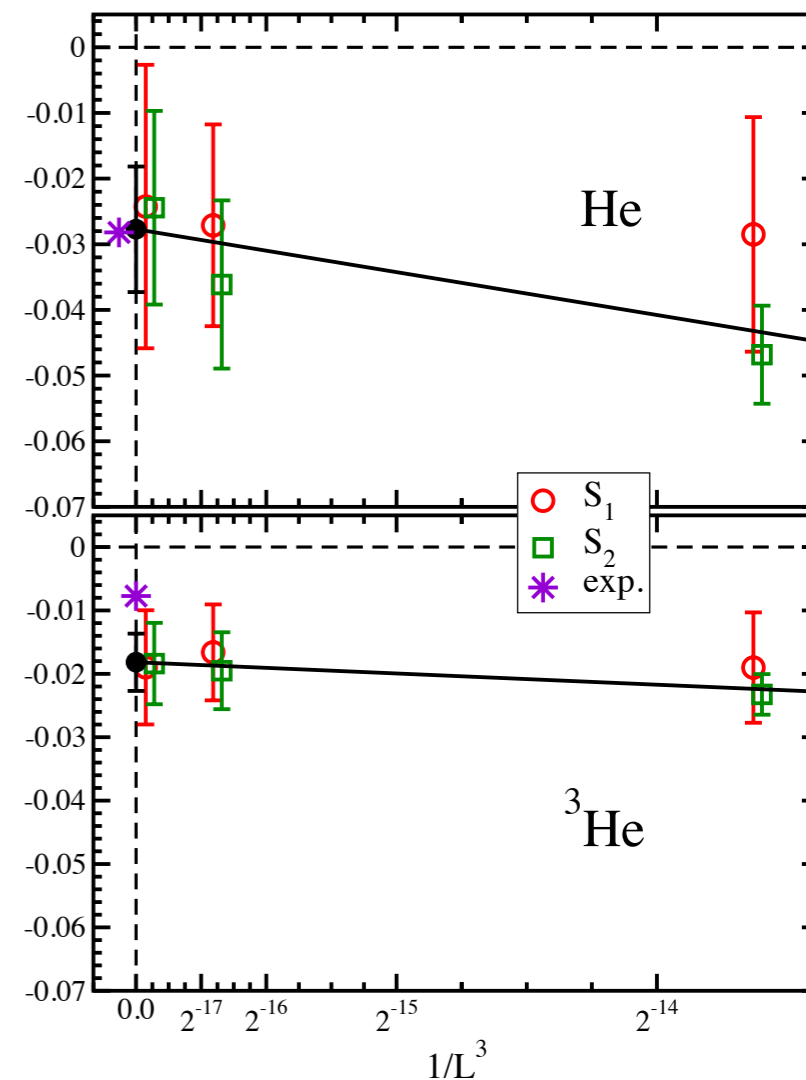
ハイペロンを含んだポテンシャル
の精密決定

→ハイパー原子核の構造決定

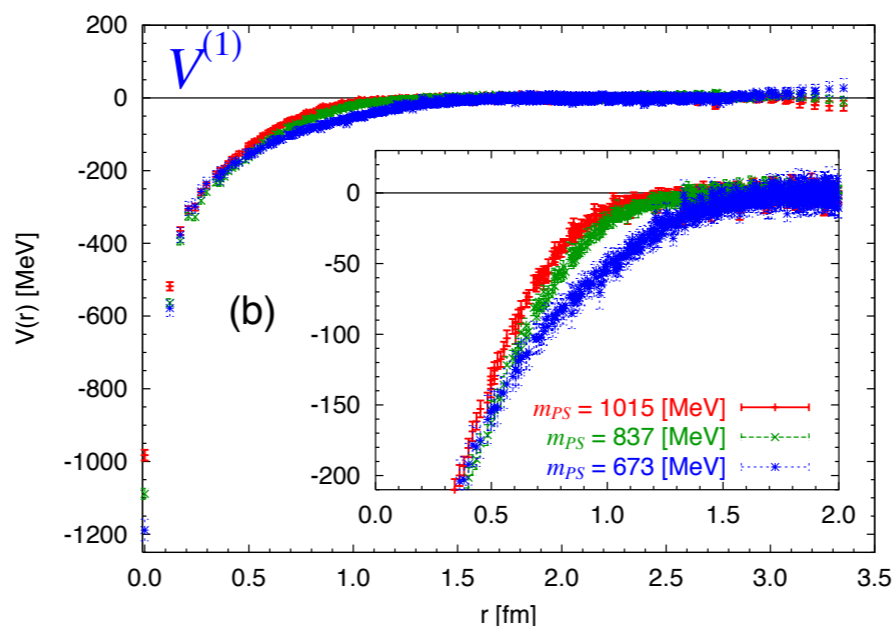
3体力の決定

新しい束縛状態や
共鳴状態の予言

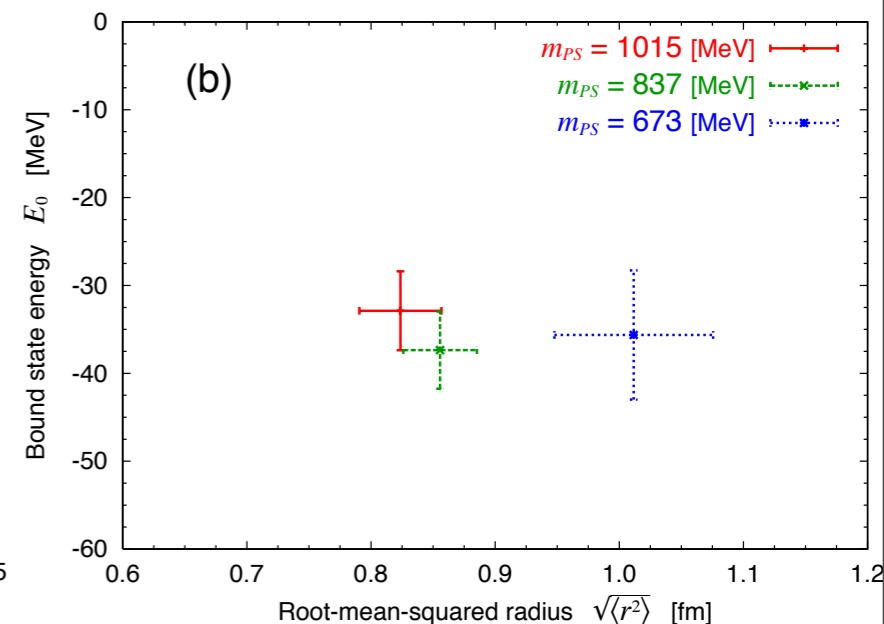
格子QCD計による
ヘリウムの束縛エネルギー



ハイペロン間の
引力ポテンシャルの例



H粒子の束縛エネルギー

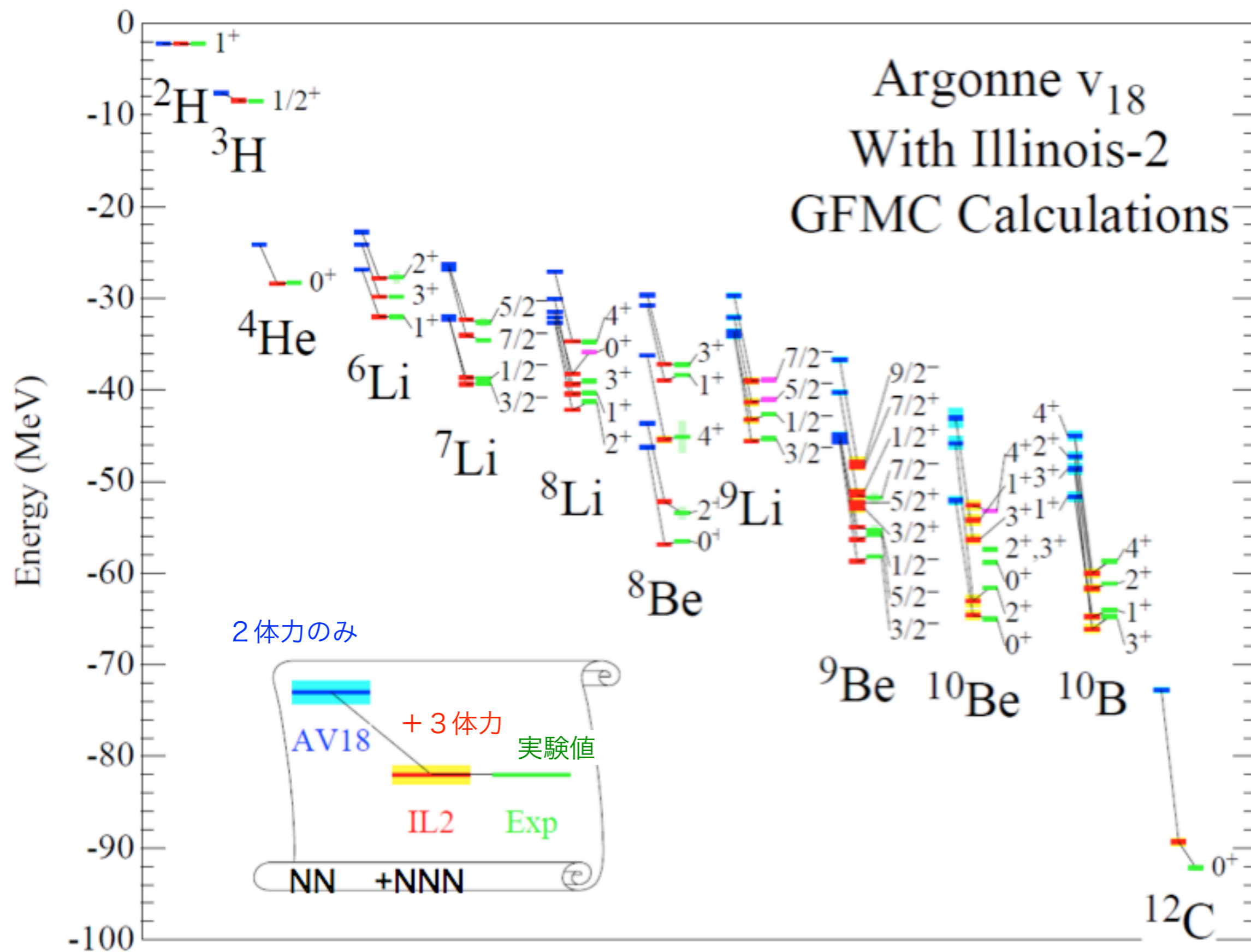


(2)大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

原子核理論：核力ポテンシャルにより相互作用する核子の多体系の量子力学



グリーン関数モンテカルロ法による束縛エネルギーの計算

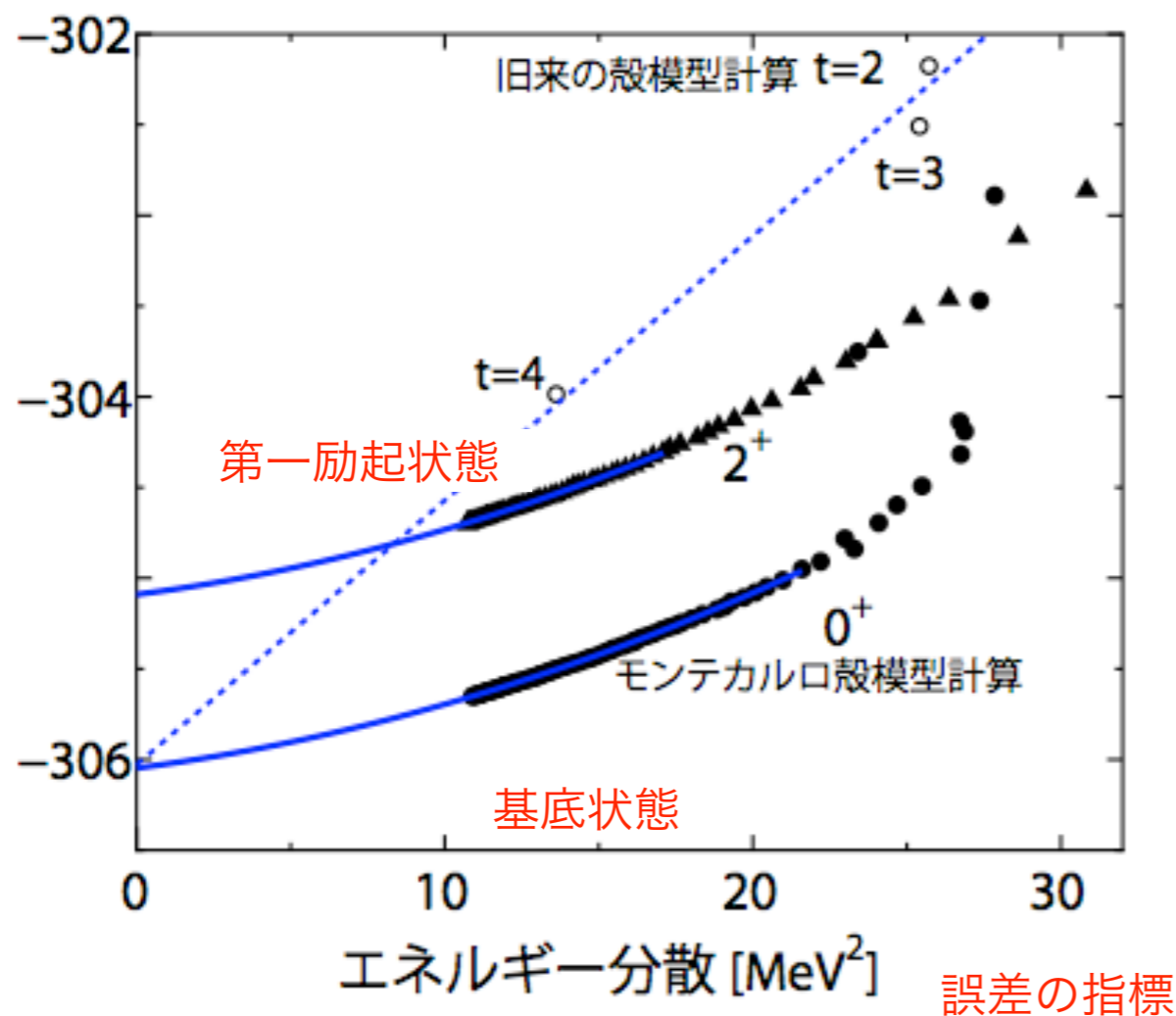


この課題での戦略

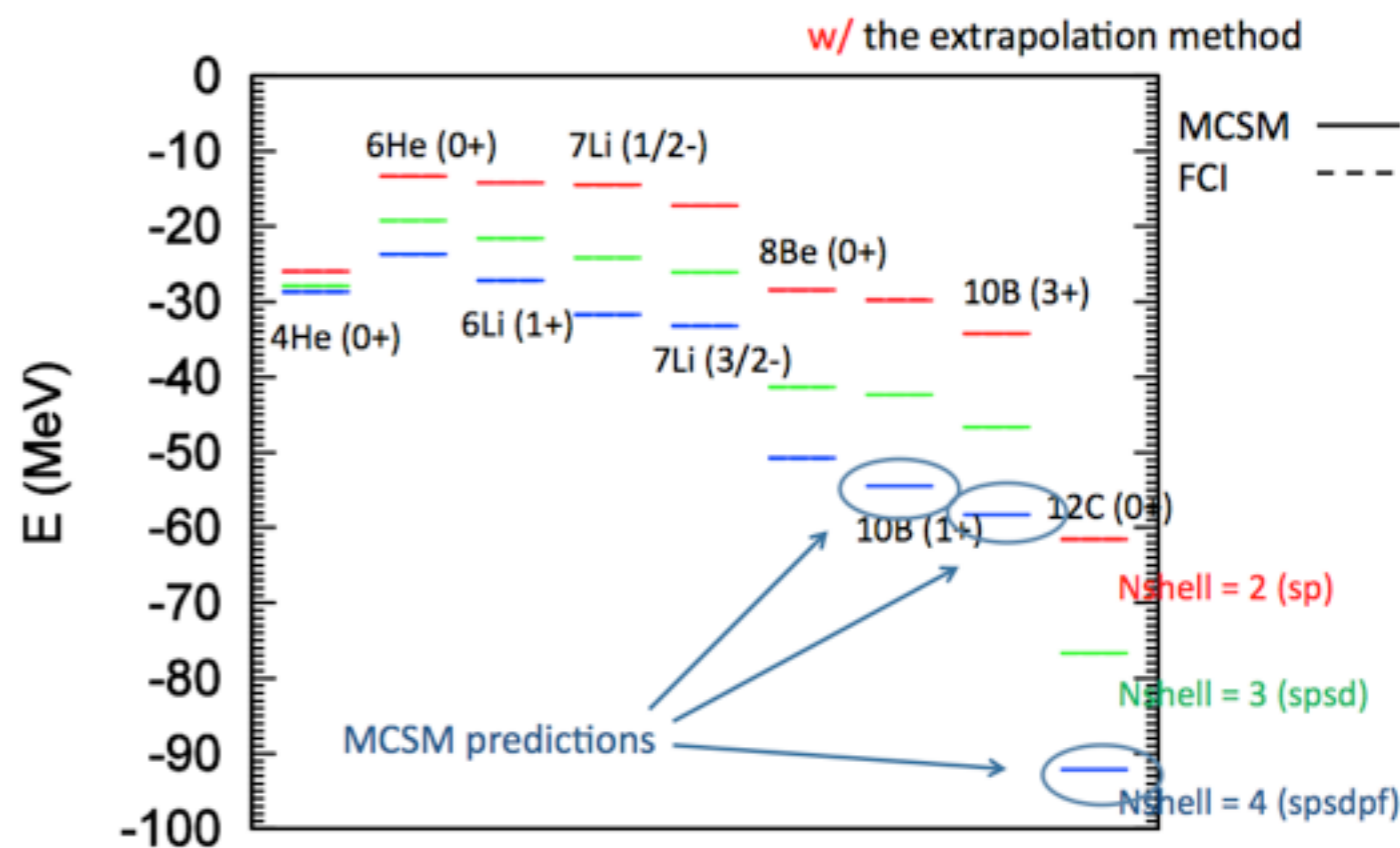
モンテカルロ殻模型計算(MCSM)

モンテカルロ法と変分法を組み合わせることでエネルギーの計算に効率の良い状態空間を生成し、その空間でハミルトニアンの対角化を行う。誤差を評価できるので、ほぼ厳密な答えが得られる。

ゲルマニウム64のエネルギー準位



軽い原子核のエネルギー準位



阿部、大塚、清水、宇都野

清水、宇都野、水崎、大塚、阿部、本間
PRC82(2010)061305(R)

1. 芯無しのモンテカルロ殻模型計算(NoCoreMCSM)

質量数40程度まで

ほぼ厳密な答え

2. 芯有りのモンテカルロ殻模型計算(MCSM)

ジルコニウム($Z=40$)から鉛($Z=80$)まで。将来はウラン($Z=92$)を目標。

近似の範囲では、ほぼ厳密な答え

特徴、意義

(将来的には) 格子QCDで求めた核力が使える。特に三体力の情報は極めて重要。

中性子過剰核などのエキゾチック原子核の構造予言や存在限界の探求

爆発的天体現象での元素合成の解明

応用

(簡単には) 実験できない原子核の性質を解明

原子炉中の核分裂により天然に存在しない多種類の核分裂生成物が生成。

それらの性質は安定核に比べてはるかに不確定。

一方、放射性廃棄物の処理や次世代原子炉の設計に重要。

例： ^{79}Se (セレン-79)

高レベル放射性廃棄物の処理後1万年から10万年後の放射能レベルがこれで決まる。

その半減期は不明で、実験は困難。

原子核物理学の最新の理論と大型計算により、20万年弱 (誤差は ファクター2程度) という結果が得られた。

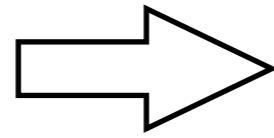
廃棄物処理で鍵となるがデータが揃っていない原子核： ^{93}Zr , ^{126}Sn , ^{135}Sc , ^{182}Hf

「京」での計算に大きな期待

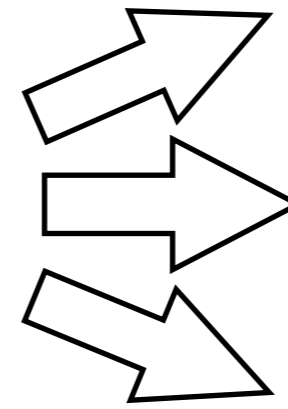
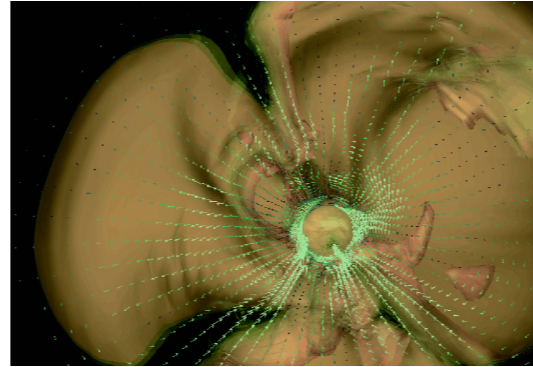
(3)超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明

大質量星
(太陽の8倍以上)
の最後

重力崩壊



超新星爆発



ブラックホール

中性子星

ガンマ線バースト?

宇宙の高エネルギー・強重力現象には、4つの力（重力、電磁気力、強い力、弱い力）の全てが重要。物理法則の総合的理解が必要。

重力崩壊および超新星爆発シミュレーションを完全に第一原理的に行うには？

一般相対論の効果（アインシュタイン方程式）
を取り入れた磁気流体方程式

6次元（実空間+位相空間）のボルツマン
方程式によるニュートリノ輸送

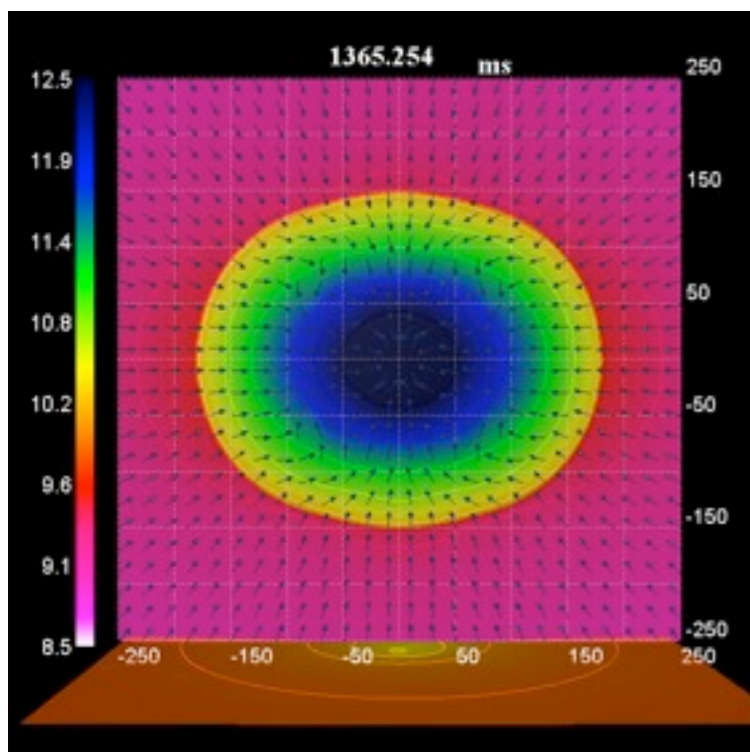
陽子、中性子、ヘリウム、原子核、電子な
どの密度分布の発展（弱い力、強い力）

すべてを取り入れるのは
「京」でも不可能

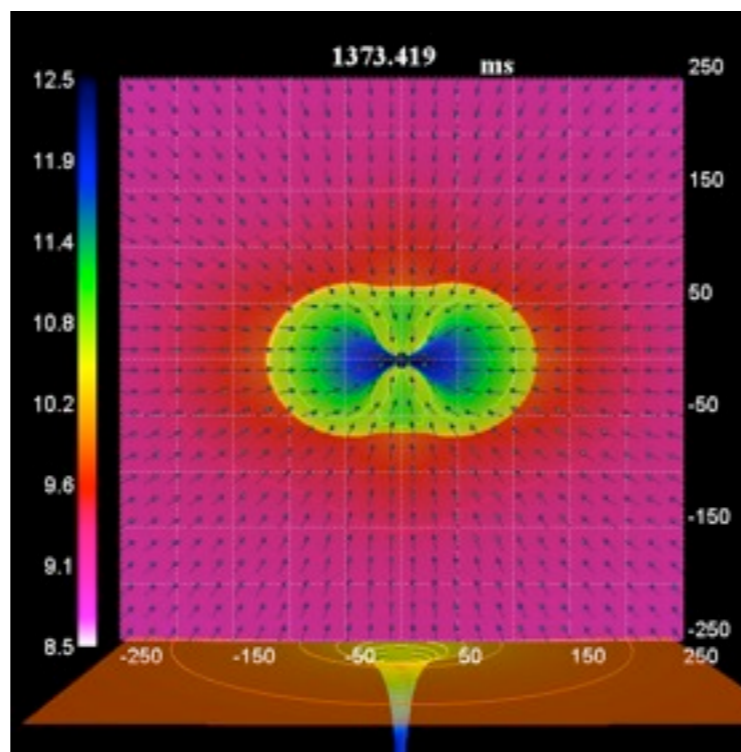
高速回転する大質量星の重力崩壊でブラックホールと降着円盤が出来る様子

密度（色）、速度（矢印）、ブラックホール（中心の黒丸）、時空の歪み（下部の図）、長さはkm

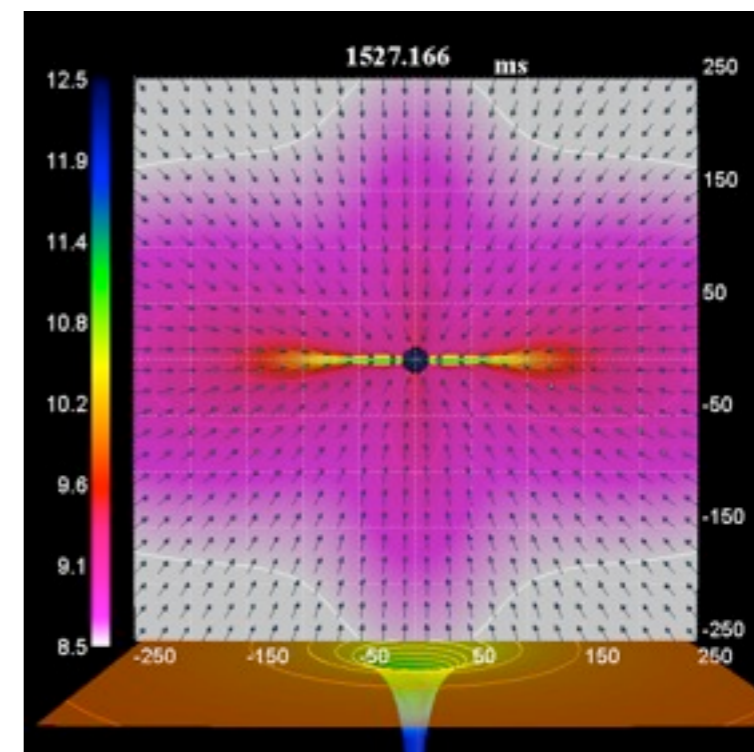
関口、柴田



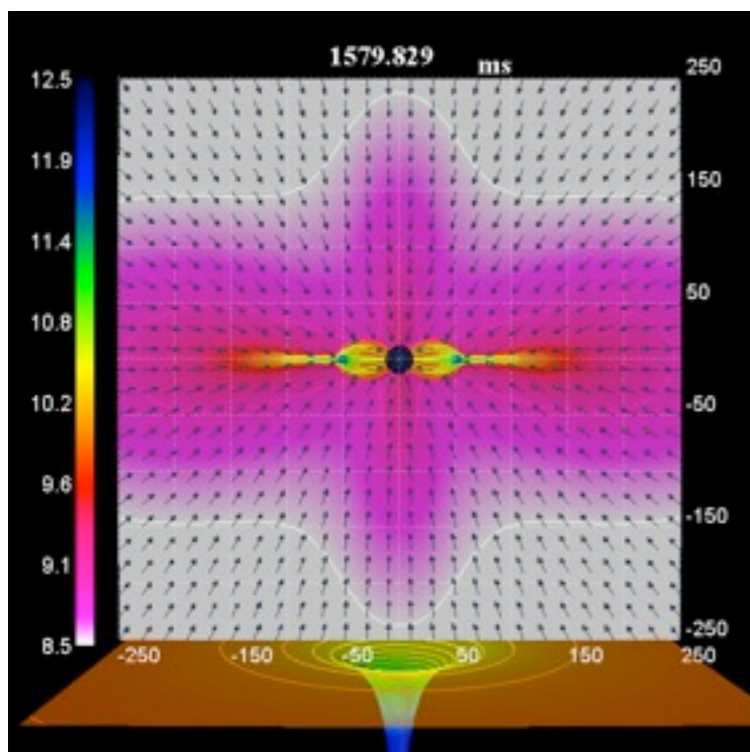
1. 降着衝撃波の形成



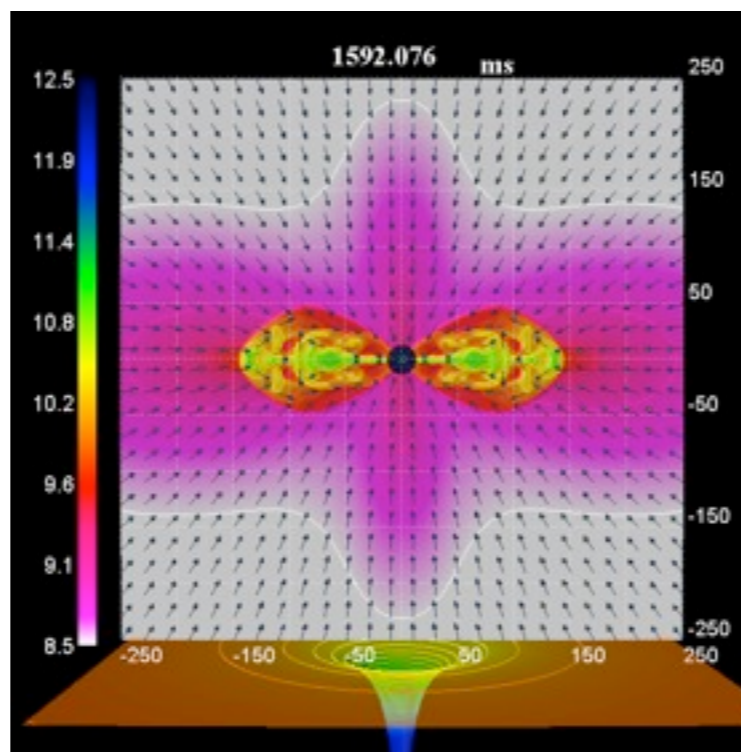
2. ブラックホールへの崩壊



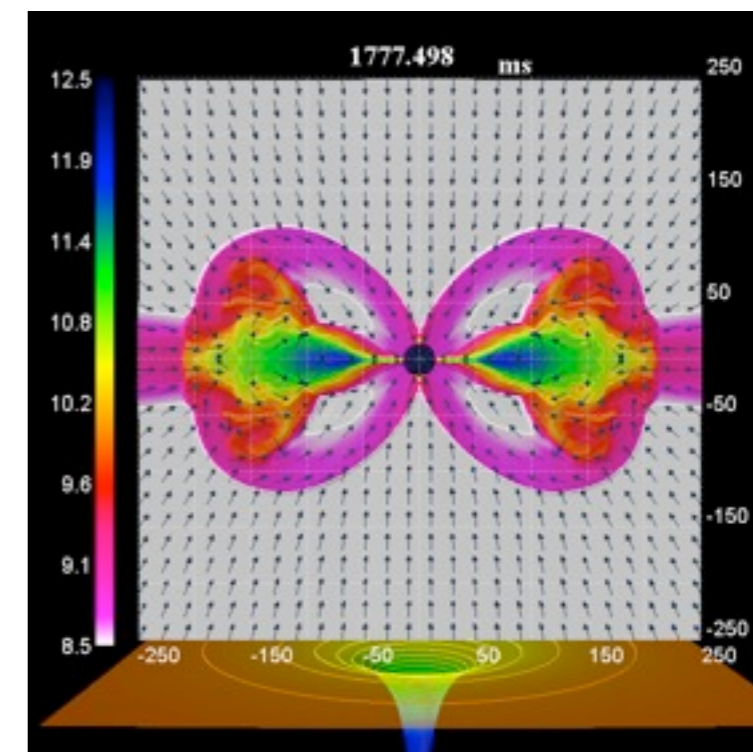
3. 薄い降着円盤の形成



4,5. 衝撃波の形成と降着円盤の膨張



5,6. 降着円盤内の激しい対流現象



「京」での計算目標

究極的目標に向けた現実的な目標を設定

1. 実空間3次元・エネルギー位相空間1次元の輻射流体計算

4次元の近似的ボルツマン方程式、高分解能輻射流体計算

世界初の3次元輻射流体シミュレーション

ニュートリノ加熱機構に基づく超新星爆発機構の解明

2. 実空間3次元磁気輻射流体計算 世界初

現実的物理過程（ニュートリノ輻射）を取り入れる

磁気流体不安定性の効果の解明

γ 線バーストなどのジェット形成過程へのヒント

3. 一般相対論的3（空間）+1（ニュートリノ）+1（時間）次元シミュレーション

世界初、試みすらない 対称性の少ない時空の一般相対論

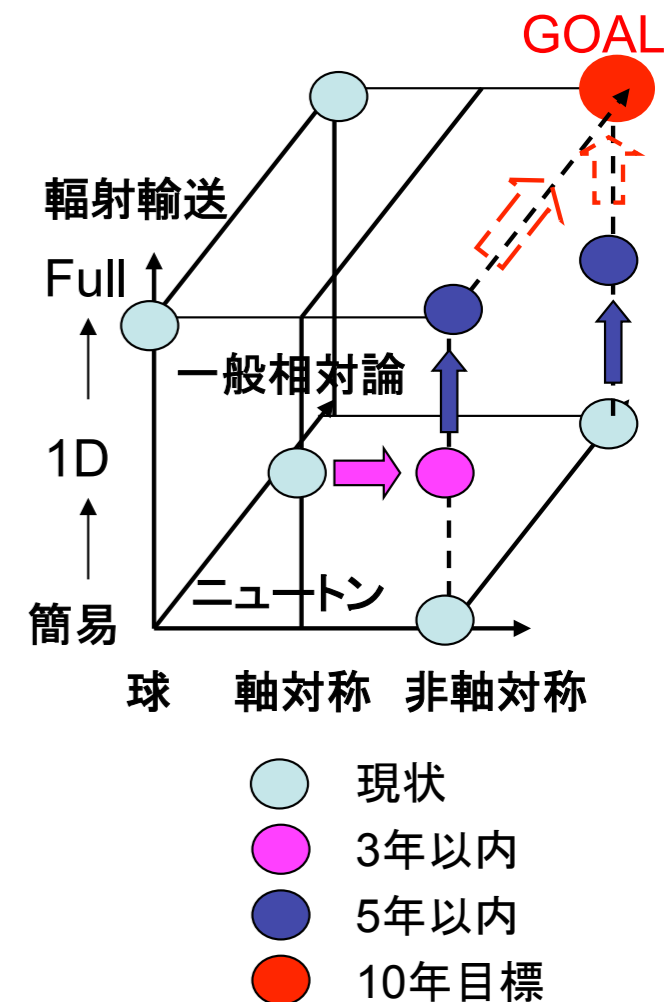
ブラックホール形成過程、ガンマ線バーストの中心源の誕生過程

4. 3（空間）+3（位相）+1（時間）次元の輻射流体シミュレーション

完全なニュートリノ輻射輸送方程式

世界初、計画すらない

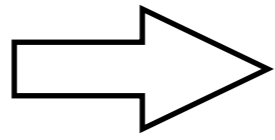
他分野を含め、世界的に強烈なインパクト



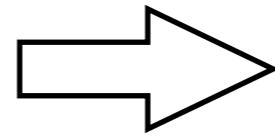
(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代星形成

標準宇宙モデル

ダークマターの
密度ゆらぎ



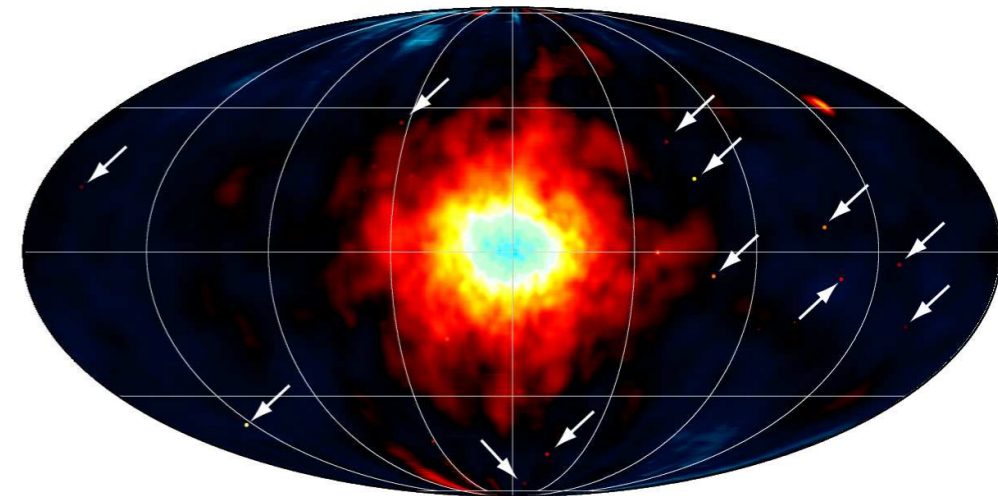
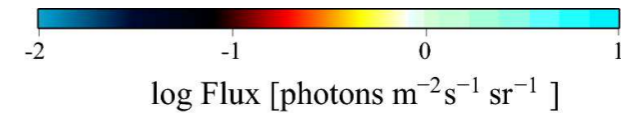
ダークマターの
構造形成



銀河や星の形成

重力不安定性により成長

強い非線形性： 計算機シミュレーションが必須



ゆらぎの強度のスペクトル (観測)

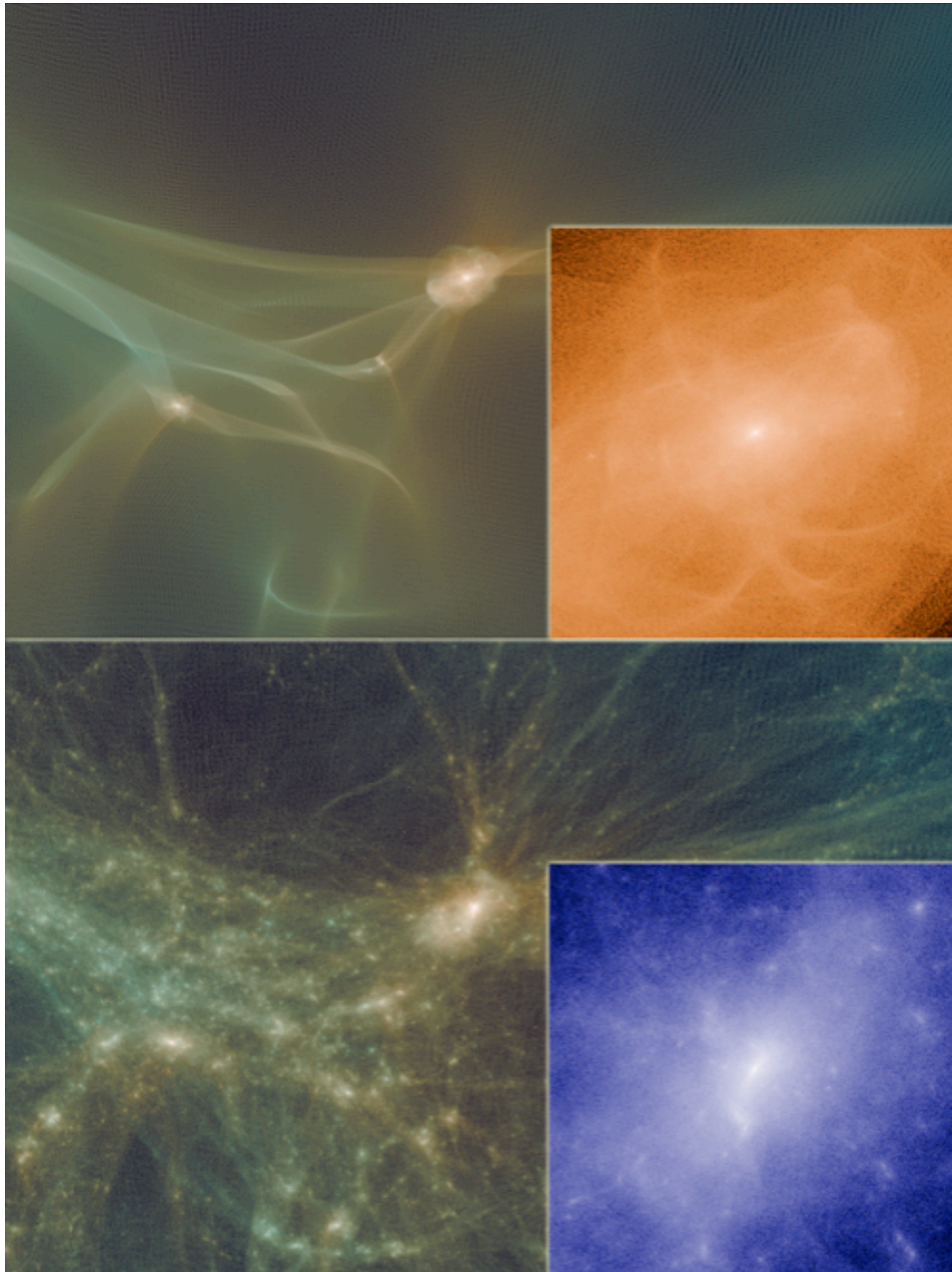
地球質量から太陽の100万倍までフラット (同程度に重要) 12桁

カットオフ波長 (これより細かい構造は見ない)

その上ではゆっくりとゆらぎが小さくなる

銀河スケールの構造形成の理解には、18桁程度の質量分可能が必要

「京」をもってしても不可能



上：ダークマター粒子の質量を
100GeVとしてそれに対応するゆらぎ
のカットオフを入れたもの。
カットオフ以下ではスムーズになる。

下：カットオフなしのベキ乗ゆらぎを
初期条件としたもの。より小さな構造
が出来る。

右下のハメコミは、最大質量のハロー
を拡大したもの。

カットオフによって結果が変わる。
カットオフは物理により決めるべき。

「京」での計算目標

1. ダークマターの重力ゆらぎによる構造形成

カットオフスケールを考慮したモデル化手法の構築

現在より2桁高い分解能の計算 ダークマターの正体に迫る

2. 第一世代天体形成・銀河形成

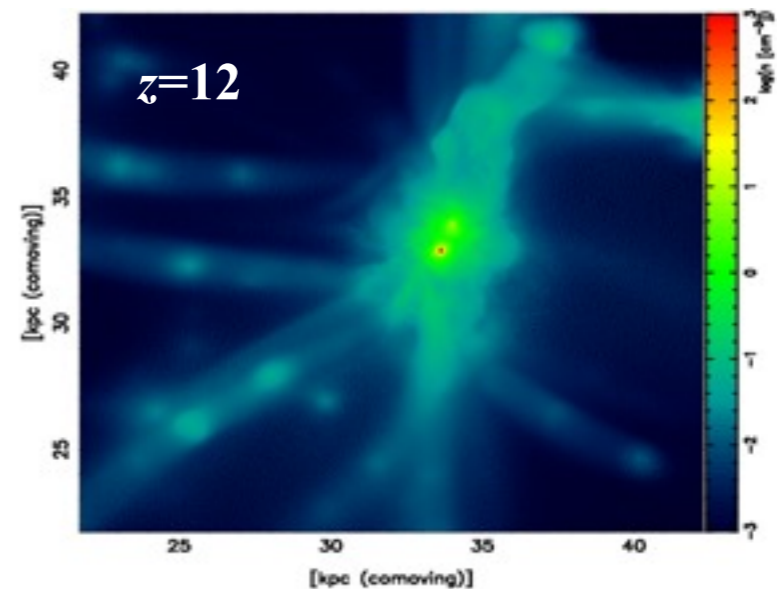
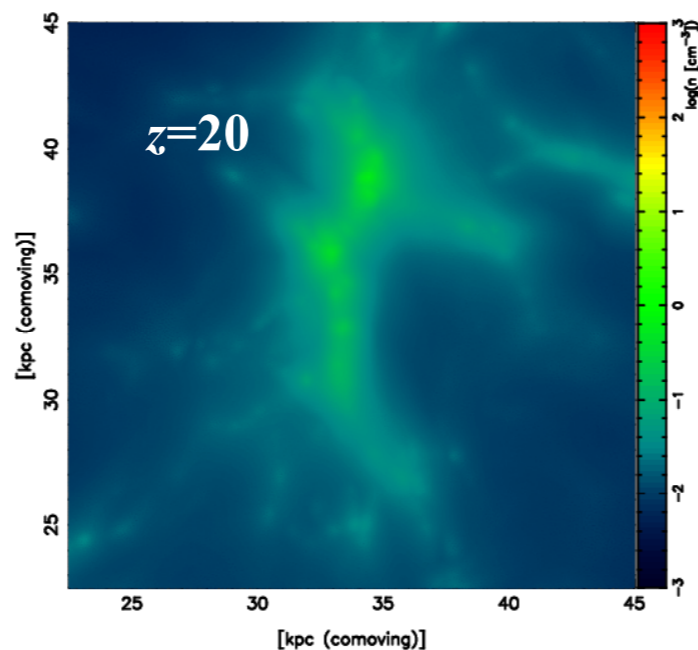
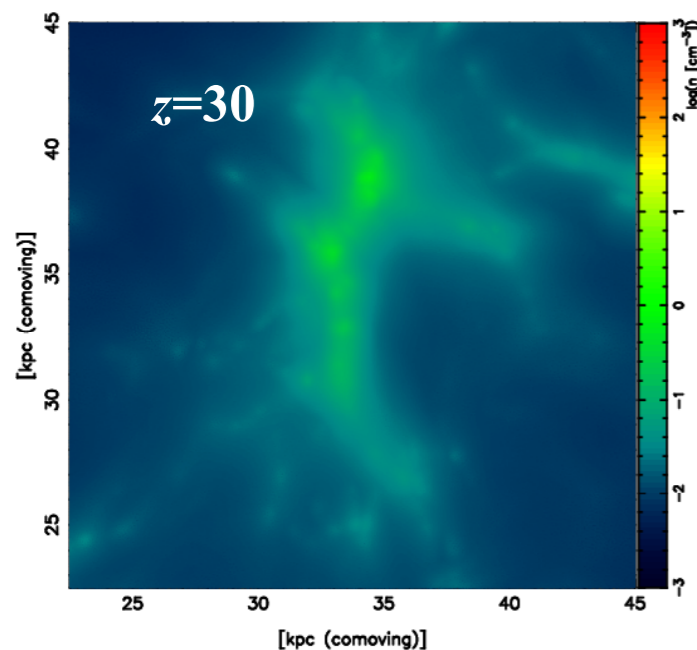
モデル化を取り入れた星形成、銀河形成シミュレーション

現在より3桁高い分解能の計算

星から銀河全体にまで及ぶ形成過程の解明

初期銀河(宇宙誕生からわずか数億年後)

第一世代天体と現在の天体形成、元素合成



「京」で実行する重点研究課題

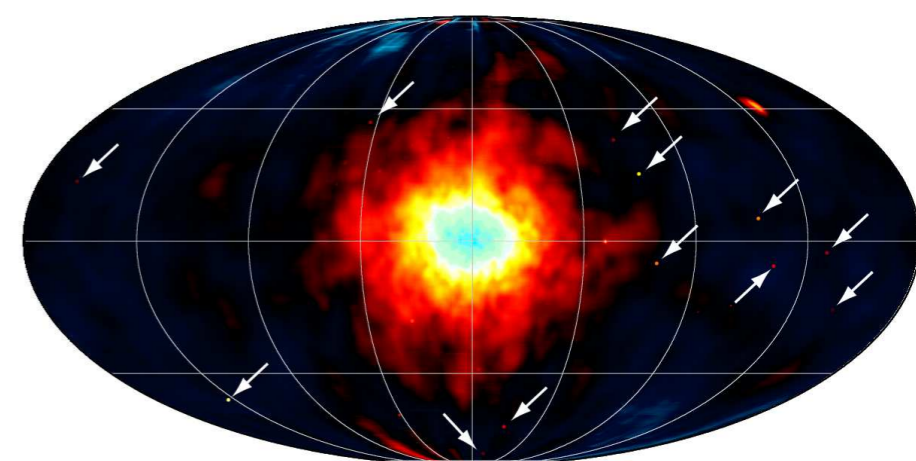
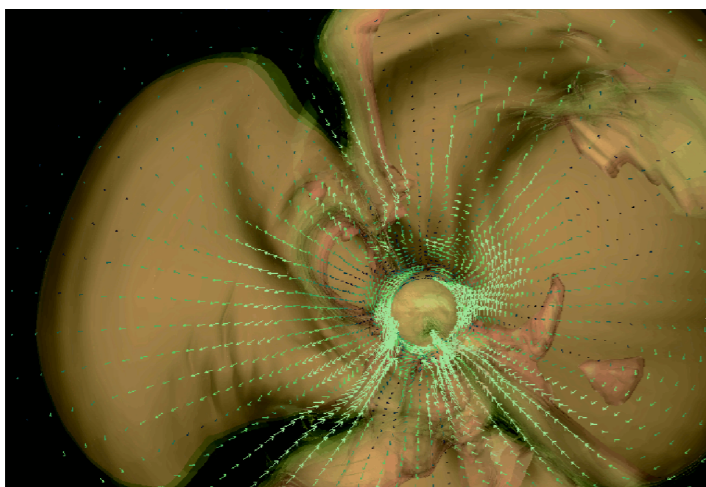
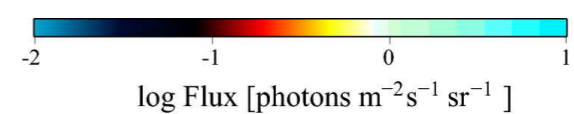
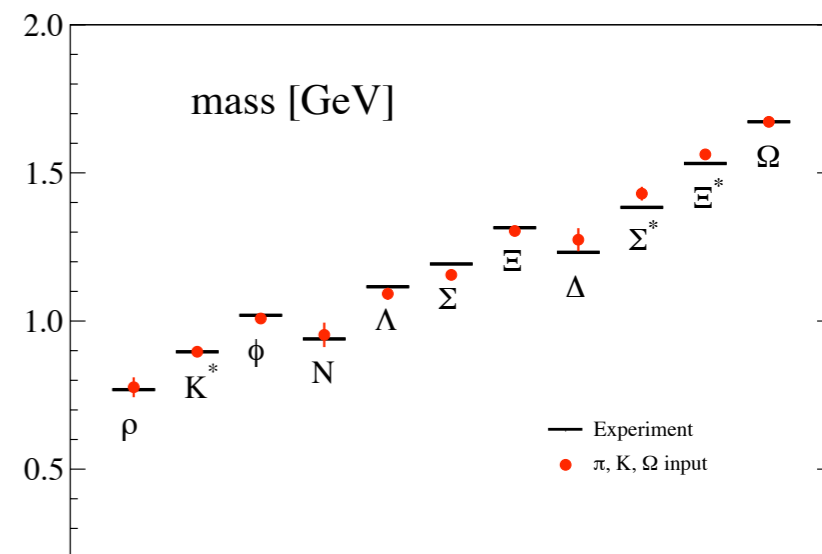
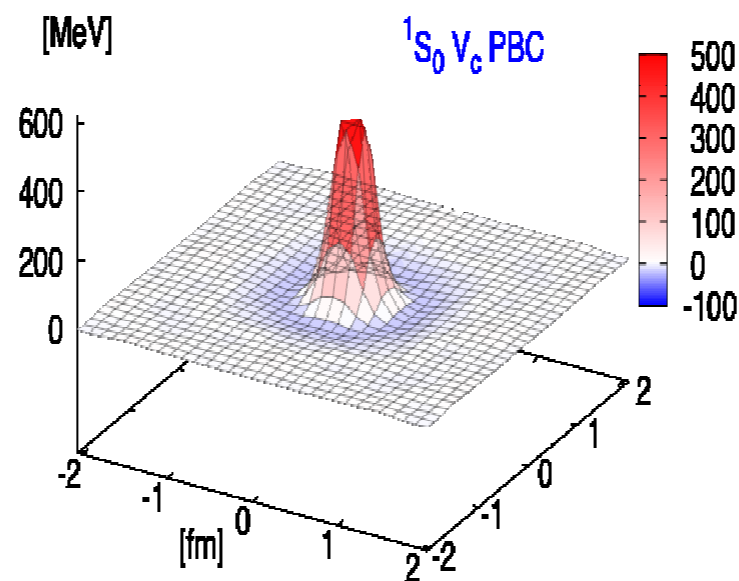
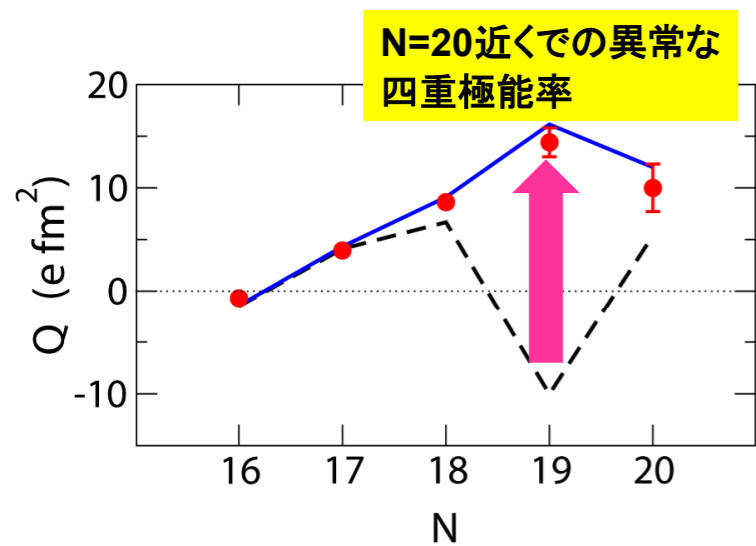
素粒子・原子核・宇宙分野の相互に関連する最先端の研究課題 4 テーマ

(1) 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

(2) 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

(3) 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明

(4) ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代星形成



合同ワークショップの今後の進め方

1. 本日：各戦略分野の概略の説明。
2. 次回以降：毎回各分野1つずつの重点課題を詳しく説明してはどうか？
3. 担当は持ち回りで。次回を決めておく。
4. 場所は神戸で。なるべく気楽にやる。
5. 5回終わったら、やり方、テーマなどを再検討。