

3. 分野連携による新しい科学の創出

3.1 基礎科学の連携と統一理解

基礎科学における知の探究は、科学技術を発展させるために不可欠なものである。細分化し分野ごとに発展・深化してきた基礎科学の各分野を計算科学の手法により強く連携させ、新たな学術フロンティアを切り開いていくことが期待される。各分野での基礎科学の詳細は4章に譲り、ここでは宇宙・物質・生命に関連する基礎科学分野における三つの連携事例を代表例として示す。

3.1.1 基礎物理における連携

(1) 課題概要

基礎物理における課題は大きく二つに分かれる。一つは究極的な物理法則を見つけていくことであり、もう一つはその物理法則を用いて様々な現象を理解することである。近年では、どちらのタイプの課題に対しても、計算機によるシミュレーションが欠かせない。その役割は年々増しており、要求される計算機能力も高度になってきている。ここではスーパーコンピュータ「京」を大きく超える能力を持つ計算機と素粒子・原子核・宇宙天体物理学分野の連携によって解明されうる研究課題の例をタイプごとに挙げる。

前者のタイプに相当する代表的な課題の一つは、究極的な物理法則の追求、特に素粒子標準理論を超えた物理法則の探求である。素粒子標準理論は、重力以外の三つの力（電磁気力・強い力・弱い力）の性質を記述することに大きな成功を収めた。1980年代までに基礎が確立された標準理論は、今のところ実験や観測による値との矛盾は認められない。しかし、もともとこの理論の中では重力の量子化（量子重力）が考慮されていないこと、近年の宇宙天文物理学と観測技術の発展により明確になった未知の重力源「ダークマター」や「現在の宇宙の加速膨張」については説明ができないこと、など不完全な部分が残っている。

これらを克服した新しい理論を見つけ出すためのヒントは、高エネルギー加速器や高輝度加速器を駆使した超精密実験による測定値と、標準理論を高精度に計算した結果との間の微妙な“ズレ”に現れる可能性が高い。標準理論から高精度の予言ができなければ、精密実験の意義は半減してしまう。この課題における計算科学の役割は、精密実験が計画されている2020年代までに標準理論に基づいた理論計算を高精度に行い、新しい理論の発見を促すことである。

もう一つのタイプに当たる代表的な課題は、自然界の元素の起源、特に重元素の起源を探ることである。水素やヘリウムなどの比較的軽い元素は、宇宙創成後にどのように生成されたかについて理論的にも定量的にも明らかにされている（ビッグバン原子核合成）。また、ヘリウムよりも重い元素は、恒星内の熱核融合反応によって合成され得ることがわかっている。しか

し、鉄（原子番号 26）より原子番号が大きい重元素は、貴金属やレアアースとして身近に存在するものであるにもかかわらず、自然界における合成の定量的過程はいまだ解明されていない。

重元素が合成されるには莫大なエネルギーを発生する何らかの“現象”が起こらなければならない。この“現象”として現在最も有力視されているのが、超新星爆発などの爆発的天体现象である。これらは実験により再現することは不可能であるため、説の真偽を知るには計算機によるシミュレーションによるしかない。例えば爆発時にどのような比率で各元素が生成されるのかを高い精度でシミュレーションする。この比率が自然界における観測値と一致すれば、重元素合成の一つのシナリオの確からしさを証明することにつながる。

超新星爆発は、多くの物理過程が複雑に絡み合っている。素粒子・原子核・宇宙天文学の連携による問題の定式化（方程式を立てること）と、計算科学を用いた数値的な解析が必要である。関連する分野は、星の重力（一般相対論）、電磁流体力学、熱・輻射輸送、原子核反応、核力・核物質状態方程式、ニュートリノ輻射輸送など多岐にわたる。詳細は 4.5 節に譲るが、概要としては、まずクォークとグルーオンの運動を記述する量子色力学（QCD）に基づく数値シミュレーションにより核力を導き、その核力を用いて関係する原子核の性質を多体系計算により求め、それを用いた統合シミュレーションにより星の中心部分の高温高密度核物質の性質や超新星爆発での元素合成を計算し、最終的に天体観測データと定量的な比較を行うことが目標となる。

このような複雑な現象のシミュレーションは、現存する計算機の能力では近似的な結果しか得ることができず、爆発現象と重元素合成の本質に迫ることができていない。近似を極力取り除いた緻密なシミュレーションのためには、2020 年代に完成予定である、より高性能の計算機の稼働を待たなければならない。

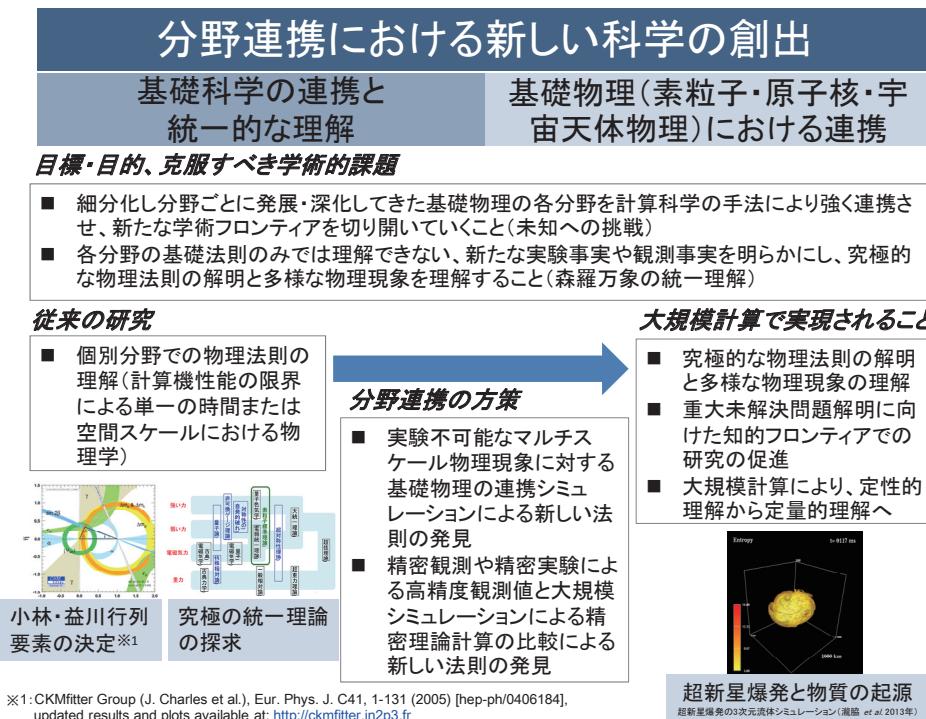


図 3.1.1-1 基礎物理における連携

(2) サイエンスの質的変化と長期的目標

素粒子・原子核・宇宙天文学分野は、宇宙と物質、そしてそれらを支配する法則を探求する学問分野である。この分野におけるこれまでの到達点と今後を概略したものを図 3.1.1-2 に示した。

歴史を振り返ると、20世紀中盤までは、基礎法則の発見と検証および新しい分野の開拓を繰り返してきたことがうかがえる。20世紀中盤から今世紀にかけては、素粒子・原子核・宇宙天文学それぞれの分野に属する基礎法則の確立と検証が行われてきた。今世紀に入り、実験や観測技術の向上によって新たな事実が明らかになり、基礎法則の理解と宇宙の理解に向けて新たな課題が出てきた。前述したダークマターの存在と現在の宇宙の加速膨張の発見は、現在われわれが理解している素粒子理論と一般相対性理論では説明できない。また、素粒子標準理論に内在するエネルギー階層性は、存在そのものは確実であるものの、階層性の起源やからくりは長年にわたり不明のままである。宇宙を支配する法則の理解のためには、素粒子・原子核・宇宙天文学それぞれの分野において個別に確立してきた基礎法則を連携させ、新たな課題に挑戦することが必要である。

これらの理解できていない「謎」の解明に向け、以下のようなフロンティアでの活動が進んでいる。

■ エネルギーフロンティア

高エネルギー加速器実験や高エネルギー天体现象から物質のミクロな構造を探り、物質の起源の理解や新しい物理法則の発見を目指す。

■ ルミノシティ（強度）フロンティア

非常にまれな事象や不安定な現象を捉えるため、高強度のビームによる加速器実験や大規模な観測実験を行って大量の観測データを取得する。高エネルギーとは相補的に、低エネルギーでかつ精密な実験により、物質の起源の理解や新しい物理法則の発見を目指す。

■ コズミックフロンティア

地上では実験できない、重力現象や高エネルギー現象を引き起こす天体现象の理解から、宇宙と物質の起源の理解を目指す。

これらのフロンティアで扱う現象には二つの特徴がある。一つには、現象が複数の物理現象の相互作用によっていることである。もう一つは、長さや時間のスケールが大きく異なる現象が複数連携していることである。このことから素粒子・原子核・宇宙天文学間の連携による実験・観測事実の総合理解が必要である。

これらのフロンティアにおいては、さまざまな実験と理論的アプローチがとられている。実験や観測においては、マルチスケール・マルチフィジックスの徵候を捉るために高精度な観測値を得ることが目標となっている。その成果を生かすには、計算科学的手法による理論計算においても実験精度に匹敵する精度を達成することが不可欠である。

(例)

■ SuperKEKB/BelleII 実験計画による B 中間子の物理を通じた標準模型の精密検証

- J-PARC でのミューオン異常磁気能率の精密測定を通じた標準模型の精密検証
- 理研の放射性同位元素 (RI) ビームファクトリーによるエキゾチック原子核の生成と原子核理論によるその性質の解明

複数のスケールと物理過程を連携したマルチスケール・マルチフィジックスに対する計算科学的手法は長年にわたり試みられてきたが、主に計算機性能の理由から、多くがさまざまな近似を含んだ形に留まっていた。「京」の登場により、ようやく現実的に計算できる範囲が広がってきたところである。

(例)

- クオークを要素としたヘリウム原子核の計算
- 超新星爆発の計算における流体力学計算と流体中の核反応計算を結合した計算

今後 10 年の基礎物理分野における計算科学（計算物理学）においては、従来の個々の課題の精密化と計算科学的手法の高度化に加え、素粒子・原子核・宇宙天文学が連携し、マルチスケール・マルチフィジックスに対する計算を発展させていくべきである。

図 3.1.1-3 に、基礎物理分野における数値計算とフロンティアの関連をロードマップとして示した。現在行われている数値計算は、2020 年以降、各フロンティアでの課題を解決するための基礎となるものである。4.5 節「基礎物理」では、各フロンティアに位置する計算機を用いたシミュレーションがサイエンスターゲットとともに具体的に説明されている。なお、学問としての本分野の動向については参考文献[1-4]に詳しい。

宇宙を理解するという壮大な目標に向けては、すぐには解決できない課題が数多く残っている。「京」や更に高性能な計算機の登場により、未知の部分が徐々に明らかになっていくと期待している。

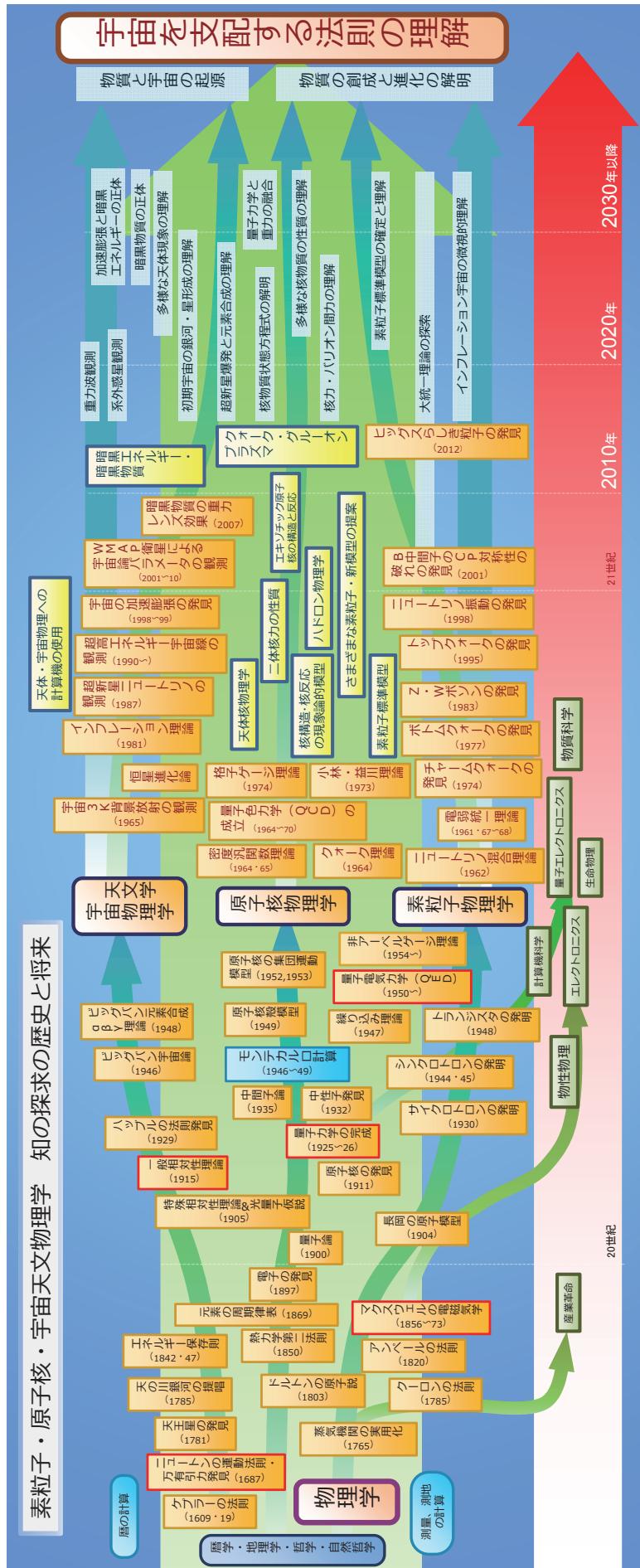


図 3.1.1-2 素粒子・原子核・宇宙天文物理 知の探求の歴史と将来

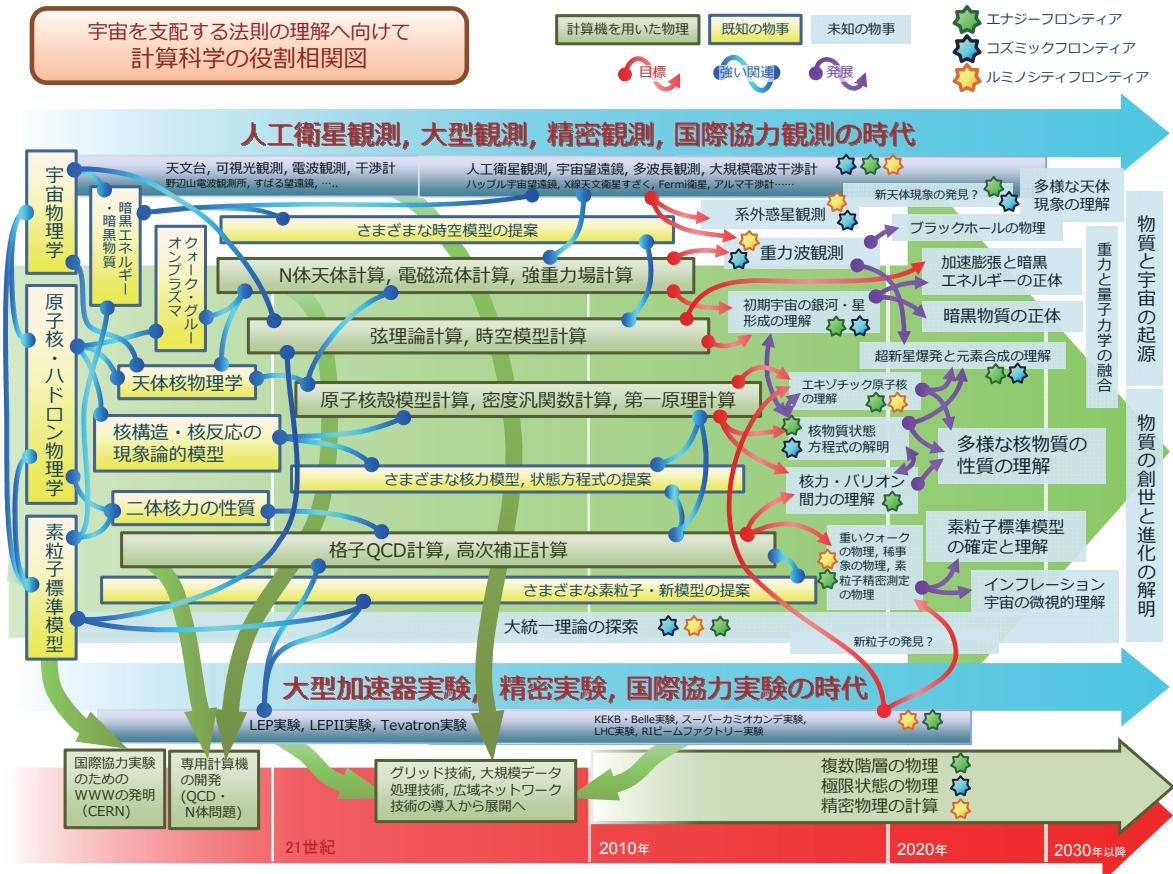


図 3.1.1-3 計算科学の役割相関図

(3) コミュニティからの意見

基礎物理分野の研究は、世界の研究者との協力と競争により進んでいる。計算物理学も例外ではない。一方、最先端の計算機の利用は国境を越えることは難しく、日本の研究者は国内の計算資源を利用する。これまでの国内の計算機資源の整備状況を振り返ると、計算機需要の傾向が十分に考慮されたものとは必ずしも言えなかった。

近年、国内の最先端計算機は1台の大きな計算機を単発で、かつ7~10年に一度のペースで整備する形がとられている。単発の整備により一時的に計算能力は飛躍するが、世界的には計算機性能は3~5年で約十倍のスピードで向上しているため、現行の国内の更新ペースでは研究競争力を常には維持することができない。

このような問題を排除し各分野での研究活動を推進していくためには、途切れることなく連続的に最先端レベルの計算機資源を供給する体制が必要である。基礎物理分野におけるアプリケーションの性質はさまざまである。それらを汎用計算機1台で賄うのではなく、複数台(2、3台)の計算機を計算アプリケーションの性質ごとに割り当て、それぞれが常に世界最先端に近い性能を保つよう整備するといった戦略的な工夫が必要である。その場合、1台の最高性能にこだわるのではなく、国全体での実行性能の合計が世界最高レベルになることを目指すのがよい。

(4) 必要な計算機資源

具体的な計算量を見積もるため、代表例として示した元素合成の例のうち、重力崩壊型超新星爆発による元素合成を理解するために必要な計算資源に関して述べる。

超新星爆発時の元素合成を理解するには以下の3つのスケールでの物理計算が必要である。

1) 素粒子標準理論から核力やニュートリノと原子核の間の相互作用を導くこと。

素粒子スケール (10^{-15}m 未満) の情報を基にし、原子核スケール (10^{-15}m) での核力の値や原子核の性質をアウトプットする (素粒子物理学と原子核物理学の連携)。

核力は、素粒子標準理論の強い力に関する部分を格子 QCD の方法を用いて計算することができる。

2) 核力から原子核構造や核反応率、高温高密度物質の状態方程式を導くこと。

原子核スケール (10^{-15}m) の計算を行う。

超新星爆発時には、多様な原子核が高温高密度プラズマ状態の中で中性子を吸収し、質量数が大きい中性子過剰なエキゾチック原子核に変換されていくと考えられている。これらのエキゾチック原子核は不安定であり、次第に安定な原子核に移り変わっていく。このような過程を経て鉄よりも原子番号の大きい元素が宇宙空間に広がっていくと考えられている。この一連の反応過程を理論的に取り扱うためには、高温高密度プラズマの状態方程式、原子核の存在限界、核反応率や反応ネットワークの詳細が必要である。

核力に基づく状態方程式の解明には、格子 QCD から導き出された核力を用了計算も視野に入る。また、原子核の核反応率は、反応に関与する原子核の性質を原子核物理の手法を用いて計算し、それらの性質を反応理論と組み合わせて計算することができる。

3) 超新星爆発と元素合成をシミュレートすること。

1)、2)で得られた原子核スケール (10^{-15}m) の情報を基にし、恒星中心部スケール (数千 km) の値をアウトプットする (原子核物理学と宇宙天文物理学の連携)。

超新星爆発で鍵となる物理過程として、中性子コアでの跳ね返りで発生した衝撃波の中の高密度物質がニュートリノにより加熱されることで、爆発を助け全体を吹き飛ばすという機構が考えられている。この機構の解明には、ニュートリノ輻射輸送と高温高密度プラズマの流体計算が必要になる。ニュートリノ輻射輸送と高温高密度プラズマの流体計算の計算には、2)に関連する高温高密度プラズマの組成の詳細と状態方程式、およびニュートリノとの反応率が必要である。元素合成では、2)で得られた原子核の核反応率と反応ネットワークを、超新星爆発する恒星内部に適用する。

2020年頃に、超新星爆発による元素合成の理解のための足掛かりとなるシミュレーションや理論計算群に必要とされる計算資源は、以下のとおりである。

1) に関して、2008～2009年にクォークの多体系としての陽子や中性子などの質量を計算できるようになっており、また先行して2007年頃から核力をクォークから理解する取り組みが

始まっている。格子 QCD の方法で陽子 1 個の質量を精度よく計算するための計算量はおよそ 100TFLOPS 年であった。これは 100TFLOPS 相当の計算機を 1 年間使用する量に相当する。核力の計算を行うには最低でも 2 個の核子（陽子や中性子など）を同時にシミュレーションする必要がある。このときの計算量は 16 倍以上（陽子 1 つが入る時空の大きさに比べ、2 核子が入る時空の大きさは一辺当たり 2 倍必要）となる。高温高密度環境における核力では、更に 3 つの核子が存在して初めて現れる 3 体力や、ストレンジクォークを含む核子についても考慮することが重要と考えられている。現在、「京」を使用した 2 体力と 3 体力の計算が始まっている。「京」では現実的に使用可能な計算量の範囲での精度で計算を行っており、必要な計算量は数百 TFLOPS 年以上であると見込んでいる。また 3 体力の計算では 3 核子の波動関数の詳細な形が必要であるが、すべての波動関数を解析するとおよそ 40EByte のストレージ容量が必要であり、まだ現実的ではない。「京」では 3 核子の波動関数の一部を解析することで 3 体力の概形と一部の詳細についての計算にとどめる予定である。この場合のストレージ容量は 10～100 TByte を予定している。しかしこのような精度では 3 体力核力の理解は定性的なものにとどまる。

2020 年頃には格子間隔を細かく（「京」に比べ 3/4 倍）することで、3 体力の定量的な計算ができるようになると予想している。格子 QCD 計算による 3 体力の計算量については、3 体力の計算に必要な精度と計算手法の詳細から以下のように見積もっている。

総計算量：数百 PFLOPS 年

ストレージ容量は、3 核子の波動関数のデータサイズが 4 次元時空の空間の格子点数の 2 乗に比例するので、2020 年代でもすべてのデータを解析することは現実的でない。3 体力核子の波動関数の解析のための計算は 4 次元時空の空間の格子点数に比例するため、「京」で解析するデータのおよそ 2 倍に増加する。2020 年代では「京」に比べ 100 倍高速にデータを解析できるので、解析可能な波動関数のデータサイズは「京」での 50 倍である 0.5～5 PByte と見積もっている。

2) に関して、原子核の構造はヘリウムなどの少数の陽子・中性子から構成されたものから、金やウランのように数百個の陽子・中性子からなるものまで幅広い種類がある。これらを統一的に理解することは原子核物理学の夢である。現在は核子の数（質量数）の領域ごとに別の計算手法を用いて原子核の性質を調べている。質量数の小さい領域では、第一原理的に原子核の性質を調べることができる。現在、原子核殻模型計算の手法と「京」を用いて、質量数が 16 程度までの原子核の精密な構造と反応率の計算を実行しており、およそ 200 TFLOPS 年の計算量が必要と見込まれている。質量数 16～40 程度までの計算を行うためには、原子核の取り得る状態の数が増えるため、外挿すると計算量はおよそ百倍弱になると見込まれており、2020 年頃には計算可能になると予想されている（ストレージ容量は小規模であるので省略する）。

総計算量：数十 PFLOPS 年

原子核殻模型による精密計算と実験で得られるデータを比較することで核力の情報を引き出すことができ、原子核殻模型による計算は格子 QCD と相補的な役割もある。このようにして得られた精密な核力の情報は金などの重い元素に対して用いられる原子核理論への入力と

なり、超新星爆発での元素合成に関連する重い元素や中性子過剰核の構造や反応の解明に寄与する。

3) に関して、現在、高温高密度プラズマの動きを計算する流体計算については3次元計算が行われるようになってきた。ニュートリノ輻射輸送については、近似的ではあるが3次元空間で流体計算とニュートリノ輻射（1次元近似）を連携させることが、「京」によりようやく可能となってきた。2020年頃には、ニュートリノ輻射流体の完全な6次元の取扱いが可能になると予想している。この計算に必要な計算資源は以下のようになると見積もられている。星の最内部のような高密度の空間ではニュートリノの散乱の時間スケールが超新星爆発の爆風のタイムスケールより十分速いため、ニュートリノの輻射輸送の計算は陰解法で行う必要がある。陰解法は行列反転をともなうが、その時の反転行列のサイズが演算量を決める。空間解像度 $512 \times 64 \times 128$ 、位相空間解像度 24^3 の場合には、

総計算量：数十 PFLOPS 年

であると見積もっている。出力されるデータは約13PByteが出力されるが、I/O頻度は低い。この計算により太陽の十倍以上の質量を持つ星の最期である超新星爆発が再現され、爆発の物理過程の全貌を明らかにすることができる。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ リバンド 幅 (PB/s)	メモリ 量/ ケー ス (PB)	ストレージ 量/ケー ス (PB)	計算時 間/ケー ス (hour)	ケー ス数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模	備考
カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	510	390	0.066	0.5	880	10	16000000	格子QCD (カイラル5次元型),ハイブリッドモンテカルロ法,CG法	問題規模 格子点： $128^3 \times 32$ 、格子間隔:0.1 [fm] 以下	ノード数を 16^4 ノードを仮定し、ノードあたり性能を、オンチップメモリ容量 200MB, オンチップメモリバンド幅 6TB/s, ネットワークレイテンシ $1\mu\text{sec}$ 程度、ネットワークバンド幅 128GB/sを想定。
閉殻を仮定しない殻模型計算	100	10	※ 1	※ 0.0001	28	100	1000000	モンテカルロ殻模型法に空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。 よる原子核の構造計算、軽い核	メモリ量は $10000/\text{ノード} \times 100\text{GB}$ 10^9 ステップ。	メモリ量は $10000/\text{ノード} \times 100\text{GB}$ 10^9 ステップ。
相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究	18	70	1.6	1.3	1200	10	780000	ニュートリノ輻射輸送計算(超新星爆発)	空間 $512 \times 64 \times 128$ 位相空間 24^3 で1秒分の時間を計算	100Tflops/ノード $\times 10000/\text{ノード}$ 、 主記憶100GB/ノード、主記憶バンド幅 20TB/s/ノード、オンチップメモリ容量 2MB/コア、1000コア/ノード、通信速度60GB/s/ノード

※印の値は未だ精査中である。より精度の高い数値はWeb版（→「1.2. 本文書の構成」）を参照のこと。

参考文献

- [1] 報告「理学・工学分野における科学・夢ロードマップ」日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会（2011）
<http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-21-h132-00.pdf>
- [2] 高エネルギー物理学将来計画検討小委員会答申」委員浅井祥仁他（2012）、高エネルギー物理学研究者会議 <http://www.jahep.org/>
- [3] 記録「天文学・宇宙物理学の展望と長期計画」日本学術会議物理学委員会 天文学・宇宙物理学分科会長期計画小委員会（2010）
<http://www.scj.go.jp/ja/member/iinkai/kiroku/3-0319.pdf>

- [4] 記録「基礎物理学の展望—素粒子原子核研究の立場から—」日本学術会議物理学委員会
素粒子・原子核物理分科会（2008）<http://www.scj.go.jp/ja/member/iinkai/kiroku/3-0909.pdf>