

### 4.5.3 原子核物理

#### (1) 現在行われている課題

原子核は強い相互作用によってフェムトメートル( $10^{-15}$  m)のスケールに自己束縛した有限量子多体系である。ラザフォードによるその発見から 100 年を経て、計算科学としての原子核物理は新しい時代を迎しようとしている。まず、構成要素である陽子と中性子(総称して核子)の間に働く核力の精密な性質が解明されつつあることが挙げられる。核力の性質は、日本初のノーベル賞受賞者である湯川秀樹とその後の研究から、その遠距離での性質は解明されているが、近距離および中間距離領域の性質はきわめて複雑であり、未解決部分が多く残されている。また 3 体力の必要性は古くから認識されながら、その解明には程遠い状態が続いていた。しかし近年、安定線から離れたエキゾチック核の観測と量子多体計算との比較、3 核子系におけるスピンに依存する物理量の測定などによって、テンソル力や 3 体力についての新たな情報が引き出されてきている。また、格子量子色力学(格子 QCD)による核力の直接的計算(4.5.2 節参照)に光が差したこと、原子核物理にとって新たな発展の契機となるであろう。

次に、核子多体系の量子力学的状態に関する計算手法における急速な進歩が挙げられる。よく知られる Faddeev 方程式などの少数系手法[1]では、4 体、5 体系を超えた原子核を計算することは難しいと考えられるが、近年のグリーン関数モンテカルロ法の発展により、10 核子程度までの原子核の構造を核力から直接計算することができるようになった[2]。また、もともと核物理で開発された結合クラスター法が近年見直され、更に、閉殻を仮定しない殻模型(No-core shell model)、カイラル有効場理論による格子計算等の新しい計算手法の開発などにより、p 殼(陽子・中性子それぞれ 8 粒子以下)を超えた原子核の直接計算も視野に入りつつある。このような軽い原子核の核力を用いた直接計算は、これまで米国の研究者が世界を牽引していたが、HPCI 戦略分野の重点課題として最近国内においても目覚ましい発展を遂げており[3]、海外を凌駕する成果が目前に迫っている状況である。また、ラムダ粒子をはじめとするハイペロンを含む軽い原子核の精密計算も、国内で大きく発展した分野である。ハイペロンが絡む相互作用は、核力(核子間相互作用)に比べて情報が非常に限られていて不定性が大きい。上記の核力の解明と合わせて、不定性を排除した核力を用いた多体理論計算が実現すれば、原子核の性質を高精度で予言・解明できるようになる。

これら粒子数の小さい軽い原子核の第一原理計算の発展と同時に、粒子数が 100 を超えるような重い原子核を対象にできる信頼性の高い計算手法の開発も求められている。これまで実験で観測された原子核はおよそ 3000 個であり、その 9 割以上が短寿命で崩壊する不安定なアイソトープ、更に未発見の原子核がまだ数千個存在すると考えられており(図 4.5.3-1)、これらの人工生成と未知の核現象の発見に向けたさまざまな技術開発・新施設建設が世界中で進められている。上記の第一原理的手法による計算では、とてもない革新的な計算技法・計算機の発展がない限り、10~20 年のスケールでこれらの重い原子核を対象にすることは不可能と思われる。このため別のアプローチを必要とするが、その一つとして密度汎関数理論が挙げられる[4]。この理論は、厳密かつ普遍的な汎関数の存在定理を基礎とし、1 体密度の汎関数で物理量が与えられる多体系の理論である。鍵となるものは高精度の普遍的エネルギー密度汎関数の構

築であるが、最近の発展により、原子核の束縛エネルギーを平均誤差 0.1 %以下で再現する密度汎関数が開発されつつあり、また反応や励起状態の計算などにも応用できるエネルギー汎関数の開発も進められている[5]。同時に汎用計算コードの開発・公開が進んでおり、大規模並列計算によって原子核の質量の系統的計算も現在では可能になっている。また、多体系の量子状態を記述するヒルベルト空間を、少数のバレンス粒子を記述する小さな空間に制限して計算する殻模型計算についても、より重い原子核の記述に向けた進歩が著しい。特に国内では、通常ランチョス法を用いる行列対角化の代わりにモンテカルロ技法を用いた方法が開発され、通常の直接的な行列対角化では到達できない巨大なバレンス空間を扱うことに成功している[6]。また、原子核の特徴の一つとして、基底状態からわずかに励起させることで、原子核をさまざまな単位に分割することができるため、その閾値近傍にクラスター（分子的）状態が出現し、核反応においても重要な役割を果たす。このような多中心的状態を微視的に記述する理論[7]、連続状態を離散化することで複雑な核反応を記述する理論等[8]が国内で発展している。これらの有効模型的アプローチは、状態方程式データテーブル構築、原子核の電子捕獲・光分解・ニュートリノ反応率などの系統的計算を通じて、数値一般相対論シミュレーションによるブラックホール形成・爆発天体シミュレーション計算等に貢献している。

原子核物理学では、核子多体系を扱うだけではなく、核子・中間子などのハドロン構造やハドロン反応をクォーク・グルーオンのダイナミクスから取り扱う計算が活発に行われている。そこでは、格子 QCD による大規模計算が中心となっており、原子核構造論の基礎となる核力やハイペロン力の第一原理計算のみならず、軽い原子核を直接格子 QCD で構成する試み[9]もある。このように、格子 QCD 計算を通じて素粒子物理と原子核物理の垣根がなくなりつつあるのが現状であるが、その詳細は 4.5.2 項の素粒子分野の中にまとめられているので、ここでは割愛する。ハドロン物理は、QCD による理論的な基礎づけに加えて、実験研究との連携が必須であり、そのためには散乱データからさまざまなハドロン状態の性質を引き出す必要がある。そこでは多くのハドロン状態は散乱状態に強く結合した共鳴状態として現れ、散乱振幅の詳細な解析が必要になる。これらはハイペロンや重いクォークを含んだハドロンの研究に加え、グルーボールやハイブリッド粒子の探索にも共通している。これまで異なる理論模型を用いて、ドイツ、アメリカ、日本のグループで独立に研究が行われ、お互いに比較してきた。その研究には現有スペコンを含め多くの計算資源が使われてきたが、特定のスーパーコンピュータを戦略的に利用するような研究はなされてこなかった。

一方、高エネルギー重イオン衝突実験により急速に研究が進展しているクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) については、その物性に関する理論的予言と膨大な実験データを結びつけるための数値シミュレーションが重要な課題である[10]。特に、衝突初期のカラーグラス凝縮から始まり、クォーク・グルーオン・プラズマへの熱化とその時空発展、そしてクォーク・グルーオンがハドロンに転換して観測に至るまでの非平衡ダイナミクスの統合シミュレーションの構築は急務の課題である。また、非平衡過程にともなう量子揺らぎ、熱揺らぎ、およびその緩和過程を取り入れた理論・計算手法の開発も必要となっている。

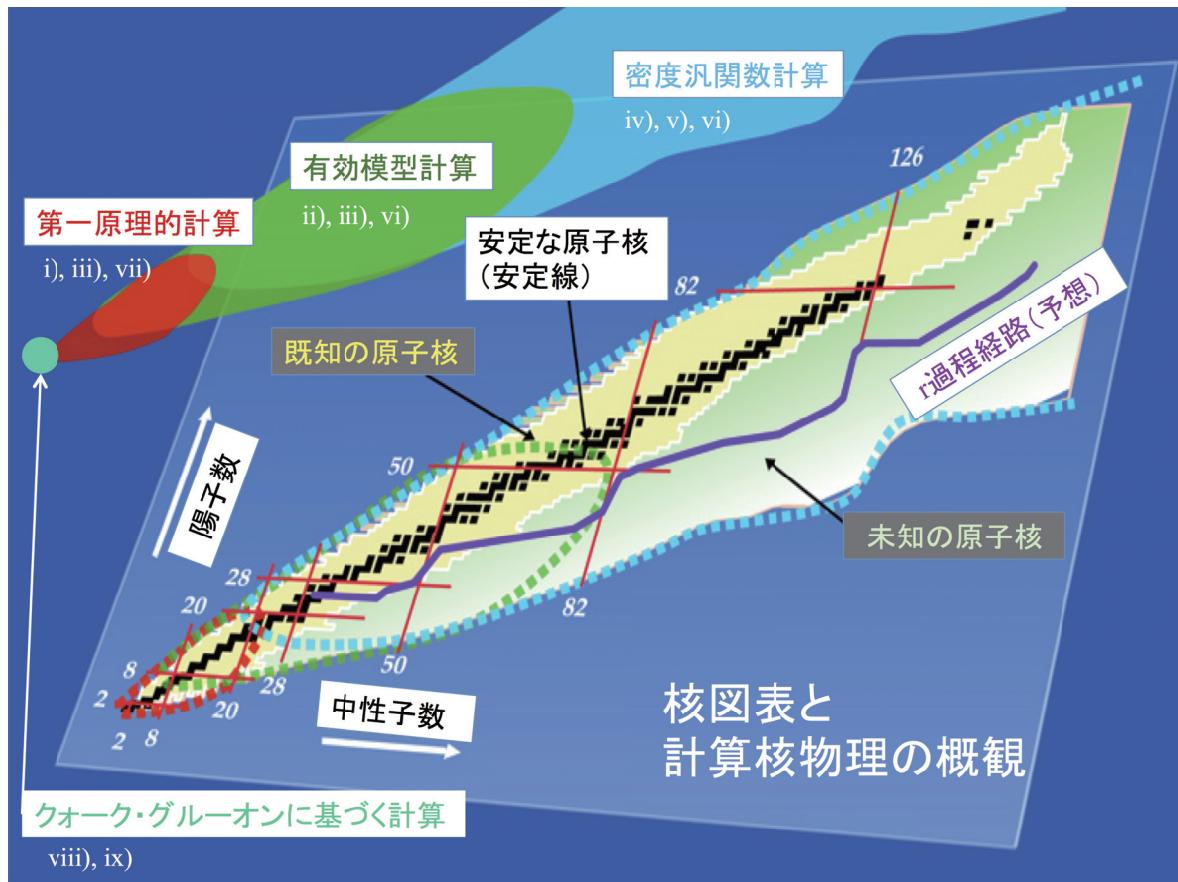


図 4.5.3-1 計算核物理学の分類と核図表<sup>1</sup>

「G.F.Bertsch, D.J.Dean, W.Nazarewicz, SciDAC Review (UNEDF collaboration) より引用」

## (2) 長期的目標

自然界に存在する原子核は、単体の陽子・中性子から核子数（質量数）240程度までの比較的小数の粒子で構成された系であるが、その微視的な記述には多くの困難がともなう。原子核が強い量子性を示す有限フェルミ多体系であるということに加えて、核力の特異性・複雑性がこの問題をより困難にしている。このため、核力から多体系の波動関数を直接計算する方法では、核子数10程度の原子核が現在のスーパーコンピュータの能力の限界である。限られたこの計算可能な領域を拡大することでその微視的構造を解明し、更に核反応断面積の第一原理計算につなげていく。究極的には、陽子・中性子数を指定されれば、その原子核が核力に基づいた計算によって計算機上に構成され、そのさまざまな性質が解明されることが計算核物理学の目標であると言えよう。このためには、計算機性能の向上のみならず、量子多体系の理論・計算手法・計算アルゴリズムなど、多方面からの発展が求められる。更に、多数の原子核に対して核力に基づいた第一原理計算が可能になることにより、散乱実験等で解明が困難な核力の性質を（帰納的に）明らかにすることも可能であろう。例えば、3粒子が直接相互作用する3体

<sup>1</sup>核図表上の2,8,20,⋯といった数字は原子核が安定化する魔法数に対応する。i), ii), iii), ⋯は「(3)次世代に解決するべき課題」の中の課題の番号に対応する。

力には、3核子散乱データが存在しないため不定性が大きいが、第一原理核構造計算および少數核子系の反応計算と対応する実験データによって、その性質を定量的に明らかにしていくことができる期待される。

核力に基づく軽い原子核の構造計算が進むと、空間的に局在化した束縛状態の波動関数の情報が得られるようになるが、これを更に一步進め、低エネルギー核反応理論の開発とその精密第一原理計算が期待される。原子核同士の反応を計算で完全に決定するには、励起・融合・分解・移行反応といったさまざまな終状態が現れることを考慮し、量子散乱ダイナミクスを正確に扱わなければならない。これは、束縛状態の構造計算とは比較にならない程の莫大な計算量を必要とする研究であり、例えば重陽子同士の反応( $d+d$ )といった簡単な計算ですら、核力に基づいて厳密には解かれていない。一方で、星の中での元素合成反応では、実験での直接測定が非常に困難な低エネルギー核反応の反応率が求められているが、ごく微小な断面積を正確に計算する必要があり、この第一原理計算は困難な挑戦的課題である。

上記の核力に直接基づくアプローチは当然長期的課題として位置づけられるべき重要課題であるが、質量数の大きな開殻配位の相関が強い原子核においてこれを実現することは10年スケールでは難しい。したがって、第一原理アプローチに並行して、現実の原子核におけるさまざまな物理量の計算を目的とした有効模型的アプローチも不可欠である。モンテカルロ殻模型、クラスター模型、あるいはそのハイブリッド的模型などの手法を用いるためには、その手法に最も有効な模型空間の切り出しが必要であり、その切り出した空間と矛盾しない有効相互作用の構築は重要な課題である。現在、実用的な有効相互作用には現象論的補正が必要とされているが、上記の第一原理計算の発展は、高精度かつ微視的な有効相互作用の構築にも大きく貢献すると期待される。これは、精密科学として発展するうえで避けて通れない課題だと言える（図4.5.3-2参照）。

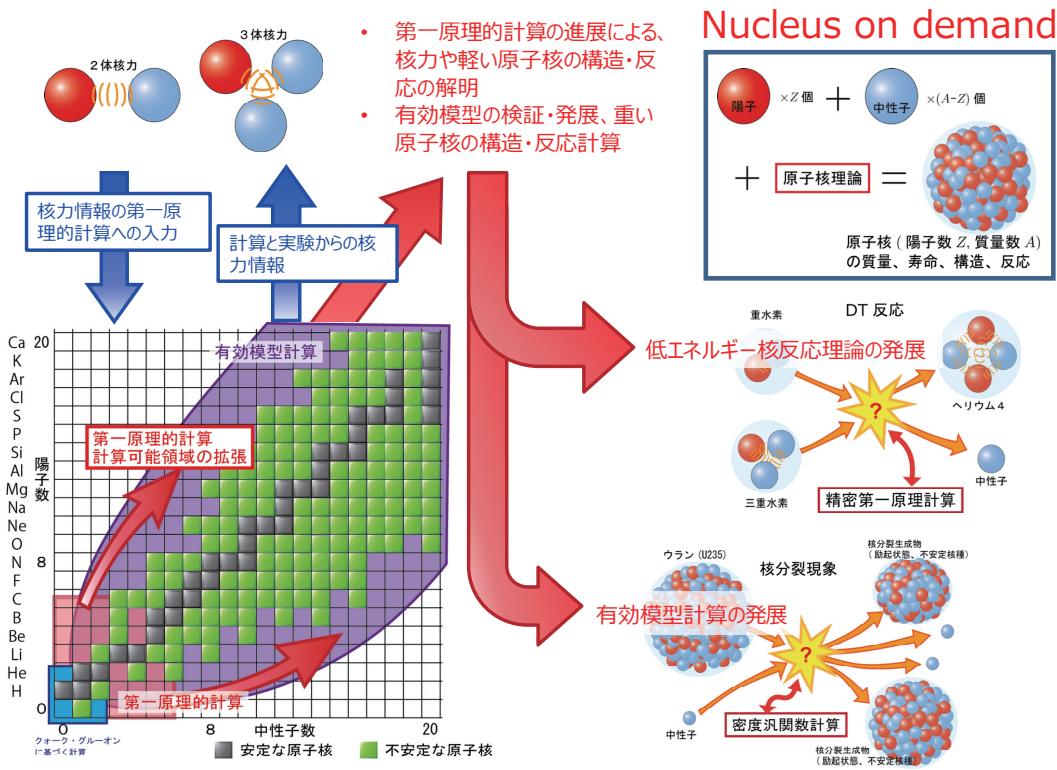


図 4.5.3-2 長期的目標のイメージ図(その 1)

強い相関を持つ複雑な原子核においては、有効模型アプローチにおいても莫大な計算量が必要とされ、あらゆる原子核を対象とし得るアプローチを確立することは容易ではない。現在は、対象とする現象や核種などによって異なる有効模型が用いられており、複雑な構造に基づいた核反応の直接計算などには、まだ手が付けられていない。しかしながら、この方向に向けた努力は絶え間なく続いており、理論や計算技法の発展が今後も進んで行くと考えられ、将来的には統一的な記述を目指すべきである。このような統一的な模型・計算手法の確立は、基礎科学としての核物理学だけでなく、天体核物理、原子力工学等、応用の面においても非常に重要である。特に、低エネルギー核反応の理論的解明は、元素起源、星や宇宙の進化の解明、計算核データの構築などに寄与し、そのインパクトは大きい(図 4.5.3-3 参照)。廃棄物処理を含む核変換テクノロジーに必要なマイナー・アクチナイト核を含む核反応データ、核融合炉プランケットでの中性子捕獲反応など、工学的応用に耐え得る高精度の理論核データが求められている。

## 原子核物理が鍵となる宇宙の疑問

- ・鉄より重い重元素の起源は？
- ・星の燃焼・爆発のメカニズムは？
- ・中性子星内部で核子(バリオン)はどうなっている？

**第一原理的計算・有効模型計算・密度汎関数計算などの理論や計算手法の発展が必要**

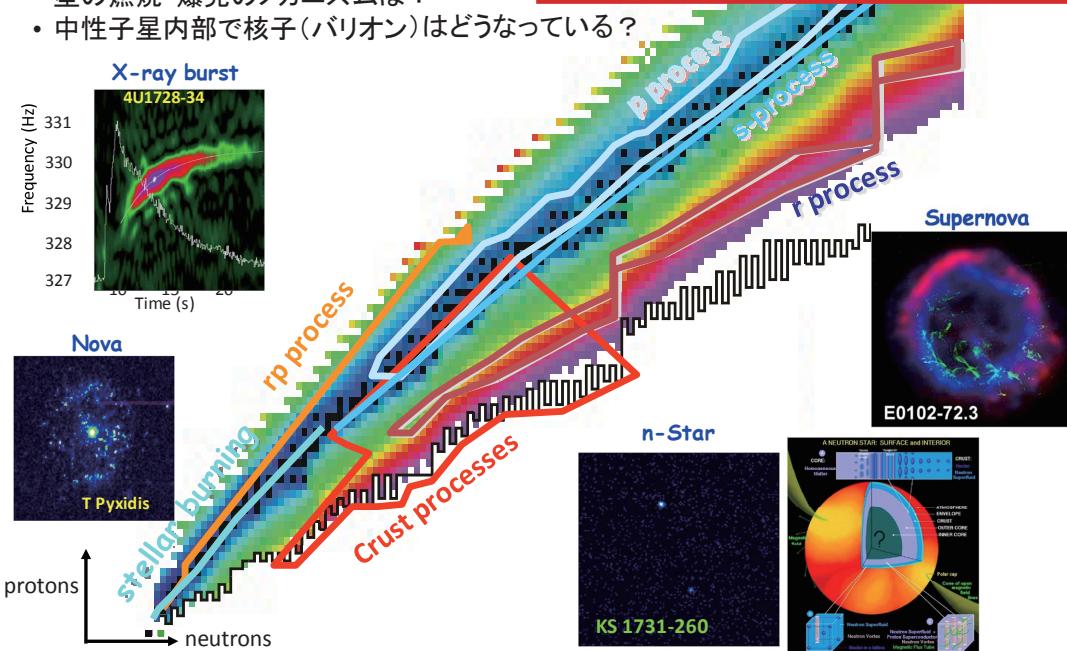


図 4.5.3-3 長期的目標のイメージ図(その 2)

(H.Schatz, W.Nazarewicz 氏の好意による)

ハドロン物理の興味の一つは、より高いエネルギー領域に向かっている。多くの共鳴状態が現れると同時に、QCD の動力学が非摂動から摂動領域に移っていくところである。そこでは多粒子生成をともなう散乱振幅の解析が必要となる。更にそれら多粒子の一部が共鳴をつくるなどして、多くのチャンネルが寄与してくれる。このような散乱振幅は複雑な解析的な構造をもち、その解明には多変数積分方程式の解が持つ複素解析関数としての性質を明らかにする必要がある。実験研究が進み、より包括的なデータが蓄積されるにつれてこのような研究は必須のものとなる。そこでは明らかに現在のスケールを超えた計算を実現していく必要がある。物理としては、K 中間子生成をともなう反応からはハイペロン相互作用を引き出すなどの重要な課題が存在している。将来的には、ストレンジネスにとどまらず、チャームなどのより多彩なフレーバーの生成領域に発展させ、ハドロン生成機構とそこから引き出せるハドロン状態の理解へと発展していくことが期待される。

高エネルギー重イオン衝突の物理で生成される高温物質は、他の量子多体系には見られないほど強く相關したクォークとグルーオンからなる強結合プラズマであることが示唆されている。このプラズマの性質の解明には、圧力・エネルギー密度・エントロピー密度などの熱力学量だけでなく、その時間的空間的揺らぎにともなう動的性質の理解が必須となっている。熱力学量について大きな成功を収めつつある格子 QCD 計算も、クォーク・グルーオン・プラズマの動的性質の定量的計算を行うには、さまざまな困難が存在し、新しい手法の開発が待ち望まれている。また、強結合プラズマの動的性質がどのように実験データに影響するかを知るため

には、衝突初期から生成されたさまざまな粒子が観測にかかるまで、統合的かつイベントごとのシミュレーションを行う必要があり、それを可能にする理論的手法の開発と大規模計算の実行が重要な課題となっている。これらの計算が可能になれば、宇宙初期に存在した強結合クオーカ・グルーオン・プラズマの詳細な性質が理論計算と実験データから明らかになる（図 4.5.3-4 参照）。

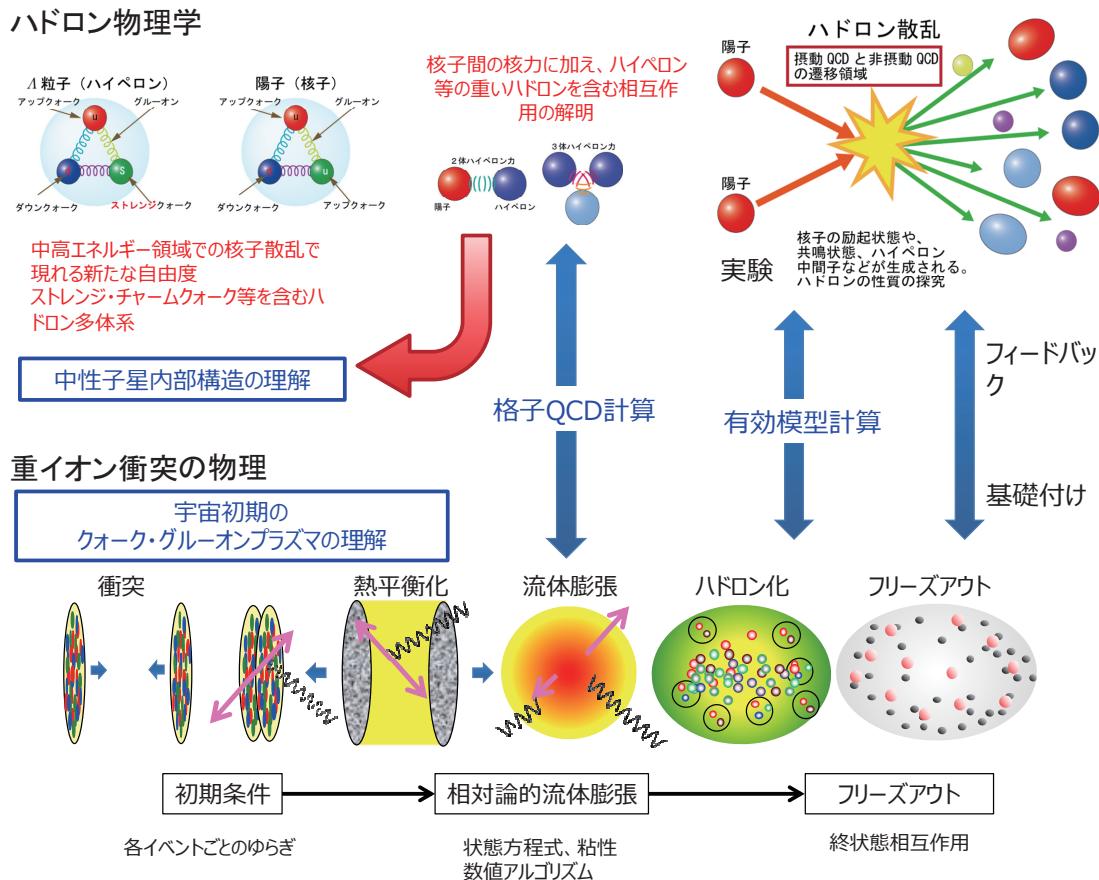


図 4.5.3-4 長期的目標のイメージ図(その 3)

### (3) 次世代に解決すべき課題

上記の長期的課題を達成する過程において、今後 5~7 年程度において計算核物理学の発展の方向性について、その代表例を挙げることにする。同一の理論手法・計算手法がさまざまな物理の解析に利用できることが多くあるため、実験による新発見等によって、10 年スケールで目標が変更されることもあるであろう。

#### (i) 原子核構造の第一原理的解明

核力に基づく第一原理的アプローチでは、p 裂殻を超えて sd 裂殻（陽子・中性子 20 以下）の原子核を対象にした研究が大きな目標になっていくと考えられる。これにより軽い原子核の基底状態および低エネルギー領域の励起状態について、微視的な構造の解明が進み、核力が果たしている役割も明らかになっていくであろう。少数系の直接的解法やグリーン関数モンテカルロ法では、空間次元の著しい増大によって、この領域に到達することは非常に困難であると予想

されるが、結合クラスター法では、陽子・中性子数が魔法数に対応する閉殻配位の原子核の計算を得意としており、すでに一部の sd 殼核に対して計算が試みられている。これに対して国内では、閉殻を仮定しない殼模型とモンテカルロ・サンプリング技法を組み合わせた新たなアプローチを現在日米共同で開発中である[3]。次に述べる通常の殼模型計算は、バレンス粒子間の有効相互作用を出発点にする配置間相互作用（CI）計算のことを指すが、閉殻を仮定しない殼模型は、現実的核力を出発点に全核子の多体系波動関数を計算する。sd 殼のさまざまな原子核を核力に基づいて計算機上に構成できる時代が現実のものになると期待される。調和振動子基底による多粒子系波動関数を用いた配置間相互作用計算によって、「京」スーパーコンピュータで p 殼核（陽子・中性子 8 以下）へ、更にエクサに向けて sd 殼核（陽子・中性子 20 以下）へと進めていく。更に大きな質量領域では、微視的な有効相互作用の構築を目指すとともに、エキゾチックな核構造に関する有効相互作用を用いた CI 計算を行う。

### (ii) 原子核殼模型計算の適用領域の拡張

閉殻を仮定した従来の原子核殼模型計算では、有効相互作用の精密化と模型空間の拡大による重い原子核への適用が課題となる。これまでには、模型空間を 1 主殻（major shell）とすることが主流であったが、これを 2 主殻以上に拡張することで、その汎用性は飛躍的に向上すると期待される。また、拡張した模型空間における有効相互作用の構築も課題となるが、最近の研究から、3 体力の効果等を考慮して精密化することの必要性が示唆されている。爆発的に増大する計算コストを抑える計算手法と適切な有効相互作用の開発によって、pf 殼（陽子・中性子数 40 以下）を超えて、質量数 100 の領域に迫ることが期待される。これにより、謎とされる重元素合成過程の解明、特に r 過程の第 3 ピークに至る核種の精密な殼模型計算が可能になり、ベータ崩壊寿命を含めたさまざまな物理量が明らかにできる。

### (iii) 原子核構造・反応の統一的解明

原子核理論で発展してきた生成座標法（GCM）は、もともと核分裂現象の記述を目的として提案された理論であり、核構造のみならず核反応の記述にも応用できる。この特性を生かして、複雑な相関を取り入れた核構造を記述するとともに、その構造がどのように反応に反映されるのかを解明することが期待される。核構造計算に通常用いられる調和振動子基底表示とは相補的なガウス基底[11]や実空間・平面波基底を用いることで、核反応ダイナミクスの解明が可能になる。この理論手法は、原子核の基底状態とその近傍の状態の記述を得意とした有効模型と、分解反応やその閾値近傍の状態の記述を得意とする模型との融合を目指したアプローチだと言える。このようなアプローチの重要性は、1 つの原子核の中に異質な性質の状態が混在することからも理解できる。例えば、炭素や酸素の励起 0+ 状態を、特定のクラスターの存在を仮定せずに核子自由度だけから記述することは、現在でも難しい課題として残っている。将来的には、有効模型から脱却し、現実的な核力に基づいた方法、“ab-initio GCM” といった理論への発展を目指す。

#### (iv) 原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築

密度汎関数理論の強みの一つは、同じエネルギー汎関数を用いて、特定の質量領域ではなく、ほぼすべての原子核を対象にできることである。この性質を生かして、核図表全体にわたった系統的な計算が行われており、微視的質量公式などはその代表例である。最近では、時間依存密度汎関数理論（TDDFT）を用いた核応答計算のためのプログラム開発が世界中で進められている。すでに線形応答レベルでは、変形核や超流動核を扱えるコードが開発済みであり、光吸収断面積等の系統的計算が進行中である[12]。これによって、実験データの取得が困難な莫大な数の計算核データが蓄積され、将来のさまざまな応用に資することになる。今後、基底状態の性質に関する制限を取り除いた計算、連続状態を厳密に扱う線形応答計算、1体密度の線形効果を超えた高次効果を取り扱った計算などが遂行すべき課題である。

#### (v) 核分裂現象の微視的記述

多粒子が関与する大振幅集団的運動が重要な役割を果たすような低エネルギーの核反応の代表として核分裂反応が挙げられる。その微視的な記述は非常に困難であり、ポテンシャルエネルギーの計算以外は、これまで巨視的（マクロ）な模型による記述がほとんどである。核分裂には、中性子や光によって引き起こされる誘起核分裂と、有限の寿命で自ら壊れる自発核分裂とがあるが、双方ともに現在密度汎関数理論によって微視的にそのダイナミクスを記述しようとする試みが活発化しており[5]、5~7年程度で大きな進歩が期待される分野である。上記の巨視的模型による記述において、分裂経路、ポテンシャルエネルギー、集団質量パラメータ、散逸(摩擦)係数など、微視的な計算によるインプットが必要とされており、これらに対して密度汎関数理論に基づいた計算を行う[4]。また、TDDFTを用いた実時間計算の発展も近年目覚ましい。低エネルギーの大振幅集団運動に非常に重要な対相関を取り入れたTDDFTにより、誘起核分裂現象の直接的シミュレーションに向けた開発が現在進行中である。

#### (vi) 核物質の相構造・状態方程式の解明

クオーク・グルーオン・プラズマ等が議論される高温かつバリオンの密度がゼロである系に対しては、格子QCDを用いた第一原理計算が進展しているが、低温・有限密度における計算は符号問題が深刻で困難である。さまざまなアイデアが提案されているが、決定的な解決法は見いだされていない。一方で、低温・低密度では核子自由度からその熱力学的性質を計算することが有効であるため、核力に基づく一様核物質の多体計算も進展している。この場合、3体力などの核力の不定性が大きな問題であり、軽い核の第一原理計算が進められることで、この問題の解決にも光が差すと期待される。また、低温の低密度核物質では、原子核がクラスターとして存在すると考えられるため、分子動力学的アプローチを用いた計算が国内で発展している[7]。このアプローチは現実的核力に基づく計算ではないが、同じアプローチによって重イオノ反応シミュレーションが可能であり、実験データとの比較からその妥当性を検証することが可能である。中性子星の構造や超新星爆発など、天体现象においても核物質の相構造・状態方程式の解明は求められており、原子核物理においても重要な課題として位置づけられている。

#### (vii) ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明

ラムダ粒子をはじめとするハイペロンを含む原子核（ハイパー核）の研究は、核子自由度の世界をストレンジネスを含む世界に拡大する。ここでは、核子・ハイペロン多体系としての多体問題を、 $p$ 殻ハイパー核にまで適用できる計算手法の確立が課題となる。基本となる相互作用に関する情報が核力に比較すると圧倒的に不足しているため、格子 QCD 計算による相互作用に関する情報がこれを補うことが期待される。ハイパー核ではラムダ粒子とシグマ粒子との結合が重要であり、模型空間によっては 3 体力効果として記述されるこれらの結合効果の定量的な理解を進める必要がある。これらの解明は、中性子星の内部構造の理解にも大きな影響を与える可能性がある。

#### (viii) 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明

重イオン衝突実験における精密測定は、宇宙初期のクォーク・グルーオン・プラズマに対する詳細な理解を得る絶好の機会を与えている。膨大な実験データからクォーク・グルーオン・プラズマの物性を引き出すためには、衝突の非平衡ダイナミックスに対する数値シミュレーションが不可欠である。特に、衝突初期から最終段階までのさまざまな段階での量子揺らぎと熱揺らぎの効果を取り入れた統合シミュレーションが重要課題である。衝突初期条件のイベントごとの揺らぎの効果、前平衡過程を記述するカラーグラス凝縮を取り入れ、相対論的粘性流体力学とハドロン凍結後のボルツマン方程式を統合した重イオン衝突シミュレーションを実行する。

#### (ix) 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開

現状では、パイ中間子を 2 個取り込むようなチャンネルの解析が現実のものになったところである。当面はパイ中間子を 2 個含むチャンネルを取り込み、閾値から 1 GeV 程度の領域での散乱振幅の解析を完成させる。次の段階はストレンジネス生成に向かう。ハイペロンと核子の相互作用を引き出すためにも重要な研究であるが、理論的な基盤が十分整備されていない。そこでその基盤の構築から検討し、実験データとの定量的な比較を目指す。その結果として、K 中間子を最大で 3 個まで生成するプロセスの解析を目指し、オメガ粒子まで含めた uds ハドロンの生成反応を記述することを目指す。

### (4) 課題を解決するために必要なアプリケーション群

#### (i) 原子核・無芯殻模型計算

##### 計算の概要

核力のみをインプットとした核子多体系としての原子核の構造を、量子多体計算により解明する。粒子数は 30 程度、模型空間の一粒子軌道は調和振動子の主殻 (Nshell) にして 6 主殻から 8 主殻を目標にする。従来型の直接対角化の方法では、指數関数的な配位の増加があるため、ここでの計算方法はモンテカルロ殻模型 (MCSM) 法を採用する。波動関数を角運動量射影し変形の効果を考慮したスレーター行列式の線形結合で記述し、その変分パラメータを変分原理に基づいて決定する。

## 基本要求性能

核力の多体基底ベクトル間の行列要素の計算が最も時間がかかり、全体の約 50%を占める。波動関数のストアのために必要なデータ容量は、数十から 100 GB 程度であり、比較的小さい。演算量は、7 主殻での計算で 1 つの準位に対して、およそ  $30 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  で、1 つの原子核に対して数個の準位を計算し、更に数十種の原子核に対して計算を実行すると、全体で  $10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$  程度の演算量となる。6、7 主殻の計算を中心に、特に重要な場合にはおよそこの 10 倍の演算量となる 8 主殻の計算を考えると、全体で数  $10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$  となる。

中重核領域における計算では、設定を変更し有効相互作用を用いた殻模型計算となる。この場合、前述の閉殻を仮定しない計算の 5~6 主殻に相当するので、 $1 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  程度の計算を合計して数百準位分する。有効相互作用の構築のため、更に同程度の計算機資源が必要とされるため、全体で数  $\text{PFLOPS} \times \text{year}$  となる。必要とされる計算機性能は以下のとおりである。

- 1 ノードの演算性能 : 100TFLOPS
- 1 ノード当たりのネットワークバンド幅 : 10~数 10GB/s
- ネットワークレイテンシ :  $1\mu\text{s}$  程度
- 1 ノード当たりのメモリ容量 : 10 GB~100 GB
- 1 ノード当たりのメモリバンド幅 : 1 TB/s
- 1 ノード当たりのオンチップメモリ容量 : 100 MB~1 GB
- I/O 量は大きくない

### (ii) 核構造・核反応 GCM 計算

#### 計算の概要

有効相互作用、あるいは現実的核力から低運動量空間に繰り込まれた相互作用等を用いて、多スレーテー行列式の重ね合わせによって原子核を記述することを目標とする。ランダムに生成した配位の取捨選択による最適化を行い、CI 計算によって波動関数を決定する。スレーテー行列式を記述する基底として実空間表示または平面波基底を採用し、生成座標法 (GCM) を用いて、核構造とともに、クラスター崩壊等の核反応の記述を同時に目指す。

## 基本要求性能

$^{16}\text{O}$  の実空間格子計算を想定。現在行っている接触型（相互作用レンジがゼロ）の有効相互作用を用いた計算で演算量はおよそ  $10^{17}$  FLOP 程度。これを有限レンジの現実的核力にすることでおよそ 100 倍、更に生成配位の最適化を入れることで 40 倍程度と見積もると、 $10 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  程度の演算量になる。必要とするメモリ量、データ量は大きくない。将来的には、核反応への応用を考える。そのためには、ここで想定したものよりはるかに大きな空間を必要とするため、 $100 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  以上の演算量になると考えられる。

### (iii) TDDFT 実時間実空間シミュレーション

#### 計算の概要

時間依存密度汎関数理論を用いた実時間シミュレーション計算である。現状では線形応答関数計算、核融合反応計算等に用いられているが、誘起核分裂を対象にしたシミュレーション計

算に応用することを想定する。重い原子核において重要な核子超流動性を扱う密度汎関数を用いて、実空間格子表示によって準粒子軌道を表現し、実時間発展を計算する。

### 基本要求性能

想定する計算のサイズは、空間格子点、準粒子数、時間ステップ数がすべて  $10^5$  程度であり、理想的な並列化効率が得られれば演算量はこれらと比例関係にある。現状の計算量から単純にスケールすると、約  $10 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  に相当すると推定され、これを異なるエネルギー点・核種で行う必要があるため、実際にはこの数十倍程度が必要とされる。更に将来的には、これに確率的分岐の効果を導入した計算を目指したい。これには、 $1 \sim 10 \text{ PFLOPS} \times \text{year}$  の演算量になると考えられる。データ容量は、準粒子波動関数の時間発展をすべてストアすると  $10 \text{ PB}$  程度が必要であるが、選択的に保存することで 100 分の 1 かそれ以下に減らすことが可能であり、 $100 \text{ TB}$  程度と予想する。

必要とされる計算機性能は以下のとおりである。

- 1 ノードの演算性能 :  $100 \text{ TFLOPS}$
- 1 ノード当たりのネットワークバンド幅 :  $10 \text{ GB/s}$
- 1 ノード当たりのメモリ容量 :  $100 \text{ GB}$  程度
- 1 ノード当たりのメモリバンド幅 :  $1 \text{ TB/s}$
- I/O 量は最大で  $10 \text{ PB}$  のストレージ容量が必要とされるが、 $100 \text{ TB}$  程度でも対応可能

### (iv) 多次元模型パラメータ計算

#### 計算の概要

核分裂の記述において現在主流なアプローチは巨視的模型アプローチであり、ポテンシャルや集団質量がそのインプットである。拘束付平均場（CHFB）と局所準粒子乱雑位相似似（LQRPA）の計算によってこれらを微視的に決定する。5 次元の変形空間上に対応する拘束条件をつけた平均場状態を計算し、そのうえで LQRPA 方程式を解くことでパラメータが決定される。

### 基本要求性能

CHFB 計算を核変形 5 次元空間中の  $10^3$  点で実行し、そのうえで LQRPA 計算を実行する。準粒子を表現するヒルベルト空間の次元は実空間表示とすれば約  $10^5$  次元であり、不定性があるものの CHFB+LQRPA を 1 点で収束させるのに  $1 \text{ PFLOPS} \times \text{hour}$  程度が必要である。したがって、全体でおよそ  $100 \text{ TFLOPS} \times \text{year}$  の演算量となる。空間点の数を増やしてこれを更に精密化した計算は、エクサの先の課題になると考えられる。データ容量は大きくない。

| 課題                              | 要求性能<br>(PFLOPS) | 要求メモリ<br>リバンド<br>幅 (PB/s) | メモリ量<br>ケース<br>(PB) | ストレージ<br>量/ケース<br>(PB) | 計算時間/<br>ケース<br>(hour) | ケース<br>数 | 総演算量<br>(EFLOP) | 概要と計算手法                                                                  | 問題規模                                                                           | 備考                                                                                                                            |
|---------------------------------|------------------|---------------------------|---------------------|------------------------|------------------------|----------|-----------------|--------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 原子核構造の第一原理的解明                   | 100              | 10                        | 1                   | 0.0001                 | 28                     | 100      | 1,000,000       | モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、軽い核                                                | 空間を調和振動子基底で展開し、7~8主殻までを考慮。                                                     | メモリ量は10000ノード X 100GBで計算                                                                                                      |
| 原子核殻模型計算の適用領域の拡張                | 2.2              | 0.001                     | 0.32                | 0.0001                 | 10                     | 800      | 63,000          | モンテカルロ殻模型法による原子核の構造計算、中重核領域                                              | 模型空間は、パレンス殻2主殻や、一部それを超えるものを想定。                                                 | メモリ量は10000ノード X 32GBで計算                                                                                                       |
| 原子核構造・反応の統一的解明                  | 53               |                           | 0.03                |                        | 100                    | 50       | 950,000         | 生成座標法を用いた第一原理的CI計算                                                       | 空間格子点1万点、配位数100程度                                                              |                                                                                                                               |
| 原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築          | 32               |                           | 0.03                | 0.1                    | 0.1                    | 10,000   | 120,000         | 実空間表示準粒子による線形応答行列対角化                                                     | 10000核種に対して特定の一による計算核データ構築が現実的体場に対する応答関数を系                                     | 1核種あたり10分以内での計算が可能になれば、系統的な計算による。現在、反復解法などが改良されており、将来的には行列対角化に頼らない方法になる可能性あり。                                                 |
| 核分裂現象の微視的記述                     | 35               | 0.3                       | 0.04                | 10                     | 24                     | 100      | 300,000         | 実空間・実時間発展計算                                                              | 空間格子点数、準粒子数、時間ステップ数、それぞれ10万                                                    | 時間発展1ケースあたり、 $3 \times 10^{21}$ FLOP                                                                                          |
| 核物質の相構造・状態方程式の解明                | 23               |                           |                     |                        | 24                     | 100      | 200,000         | 分子動力学法による熱平衡の計算                                                          |                                                                                |                                                                                                                               |
| ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明            | 21               | 10                        | 0.4                 | 0.00001                | 4                      | 200      | 60,000          | 量子少数多体系の厳密計算                                                             | 7体系への応用                                                                        |                                                                                                                               |
| 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明 |                  |                           |                     |                        |                        |          |                 | 高エネルギー重イオン衝突実験の流体シミュレーション計算                                              | 実験においても初期状態の揺らぎが注目されるなど、理論の枠組み自体の発展も激しい。現在確立している物理状況を取り入れた模型における計算を目指している。     | (課題解決に向けた現在の取り組み) 衝撃波を扱った相対論的粘性流体方程式解法のアルゴリズム開発。数値解の安定性、初期条件等の吟味。(手法確立に必要な知識) 粘性が有限の場合の低温での数値不安定性の回避が必要。                      |
| 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開     | 1                | 0                         | 0.0002              | 0.000005               | 720                    | 10       | 29000           | 大量の散乱現象のデータと理論計算とを比較することで、励起バリオンに関する知見を得るための計算。微視的な多チャンネル動的反応模型を用いた数値計算。 | chi-2乗値を計算するために1000次元の複素行列の逆行列を6000回計算する。そのchi-2乗値の計算を $2.5 \times 10^7$ 回繰り返す | (課題解決に向けた現在の取り組み) 誤差評価を含めたchi-2乗最適化への収束の問題解決。(手法確立に必要な知識) 多次元パラメータ空間上での極小値サーチの効率的手法。chi-2乗計算の高速化。(実計算への見込み) 現在のチームで4~5年程度と予想。 |

※本見積もり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。

## (5) 他分野との連携

原子核分野においては、HPCI 戦略プログラム「戦略分野2 新物質・エネルギー創成（以下、分野2）」における物性分野、量子化学分野と、量子多体系の解法という軸を通して多くの共通点があり、密接な交流がおこなわれている。例えば、結合クラスター法は、原子核理論においてかつて開発された理論であるが、その後、量子化学の分野で大きく花開いた手法であり、最近になって再び原子核構造・反応の第一原理的記述の手法として見直され発展している[13]。また、強相関系の物理における経路積分繰り込み群法と、原子核構造計算におけるモンテカルロ殻模型法は、当初独立に発展してきたものの、後に類似性が判明し、比較検討がおこなわれた。この作業をとおして、原子核分野で発展してきた量子数射影法の凝縮系分野への応用[14]、凝縮系分野で導入されたエネルギー分散外挿法や変分モンテカルロ法の原子核分野への応用[3,15]など、分野間をまたがった計算手法が発展してきた。密度汎関数理論も分野2と接点の強い共通な理論手法であり、密度汎関数にどのように長距離相関を取り込むかといった共通の課題も見えている。今後、量子多体系計算手法の発展、共通化を見えた連携強化を図っていく予定である。

## (6) 公的な意見交換会とそのサマリー

2011年1月24～25日、理化学研究所において、研究会「大規模計算による原子核研究の展開」を開催し、その中でユーザー支援の説明と、原子核物理分野における萌芽的課題の提案、エクサフロップ級計算機におけるアプリケーションの募集について説明した。その後、約10名程度から萌芽的課題に関する提案を受けることができた。本書にも、その内容が一部生かされている。

2012年9月13日、日本物理学会におけるインフォーマル・ミーティング「核理論懇談会総会」において、計算科学ロードマップ白書作成に至る経緯、アプリケーションの募集等を説明した。その場では特に意見はなかったが、後日、メーリングリストを通して再度案内を周知させることにした。

2012年9月21日、素粒子論・原子核理論合同のコミュニティである素粒子論グループのメーリングリスト(sg-l)、原子核理論・実驗合同のコミュニティである原子核物理懇談会のメーリングリスト(ml-np)に上記の案内を送付し、核物理分野については、同時にアプリの募集をアナウンスした。その後、核物理実験の大規模データを扱った解析に関して、HPCIとの協力が得られないか相談があり、その内容を簡単にまとめてもらうこととした。

2013年3月27日、日本物理学会年次大会（広島大学）における素粒子論領域・理論核物理領域・（物性）領域11,9,8,7,3,4,5,6,12合同シンポジウムにて宇宙分野の平成24年度版計算科学ロードマップについて説明し意見交換を行った。

## (7) ロードマップ

代表的な課題のロードマップを以下に示す。ここで、i)、iii)等の番号は、「(3) 次世代に解決すべき課題」の中の番号に対応している。

| 年代<br>課題                              | 2012 ~                           | 2014 ~ | 2016 ~                                    | 2018 ~            | 2020 ~ | 2022 ~ |
|---------------------------------------|----------------------------------|--------|-------------------------------------------|-------------------|--------|--------|
| i) 原子核構造の第一原理的解明                      | $p$ 裂核(陽子・中性子数8以下)の多粒子系波動関数のCI計算 |        | $p$ 裂核を超えて sd 裂核(陽子・中性子数20以下)へ            |                   |        |        |
| iii) 原子核構造・反応の統一的解明                   | 4、5体系の第一原理核反応計算                  |        |                                           | 6体系以上へ            |        |        |
| v) 核分裂現象の微視的記述                        | 核分裂を記述する集団運動パラメータの微視的計算          |        | $p$ 裂核のGCMを用いた核構造・核反応ダイナミクスの統一的計算         |                   |        |        |
| vi) 核物質の相構造・状態方程式の解明                  | 重イオン反応シミュレーション計算と実験データによる3体力等の検証 |        | 核変形空間を多次元化し、非対称分裂を含めた現実的な記述へ              |                   |        |        |
| viii) 相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明 | 衝突後の時間発展のそれぞれにおける数値シミュレーションの精密化  |        | 衝突初期から最終段階までの量子・熱揺らぎを取り入れた統合シミュレーション計算    |                   |        |        |
| ix) 多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開       | $\bar{p}$ 中間子を複数含む散乱振幅           |        | ストレンジネス領域に拡張された、 $k$ 中間子とハイペロンの生成を取り入れた解析 | $k$ 中間子チャーム領域への拡張 |        |        |

図 4.5.3-5 原子核物理ロードマップ

## 参考文献

- [1] H. Kamada et al., Phys. Rev. C 64, 044001 (2001); E. Hiyama, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A204 (2012).
- [2] S. C. Pieper and R. B. Wiringa, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 51, 53 (2001); J. Carlson et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A209 (2012).
- [3] N. Shimizu et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A205 (2012).
- [4] T. Nakatsukasa, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A207 (2012).
- [5] SciDAC-2 UNEDF project; <http://www.unedf.org/>
- [6] N. Shimizu et al., Phys. Rev. C 82, 061305(R) (2010).
- [7] Y. Kanada-En'yo et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A202 (2012).
- [8] M. Yahiro et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A206 (2012).
- [9] T. Yamazaki et al., Phys. Rev. D 81, 11504(R) (2010).
- [10] T. Hirano and Y. Nara, Prog. Theor. Exp. Phys. 2012, 01A203 (2012).
- [11] K. Arai et al., Phys. Rev. Lett. 107, 132502 (2011).
- [12] T. Inakura et al., Phys. Rev. C 80, 044301 (2009); Phys. Rev. C 84, 021302 (2011).
- [13] G. Hagen et al., Phys. Rev. Lett. 109, 032502 (2012).
- [14] T. Mizusaki M. Imada: Phys. Rev. B 69, 125110 (2004).
- [15] T. Mizusaki and N. Shimizu, Phys. Rev. C 85 021301(R) (2012).