

2.8 計算核物理

Computational Nuclear Physics

根村英克	NEMURA Hidekatsu	代表、筑波大学・数理物質科学研究科
清水則孝	SHIMIZU Noritaka	副代表、東京大学・原子核科学研究センター
阿部喬	ABE Takashi	東京大学・原子核科学研究センター
江尻信司	EJIRI Shinji	新潟大学・自然科学研究科
古本猛憲	FURUMOTO Takenori	理化学研究所・仁科加速器研究センター
堀内渉	HORIUCHI Wataru	理化学研究所・仁科加速器研究センター
板垣直之	ITAGAKI Naoyuki	京都大学・基礎物理学研究所
藏増嘉伸	KURAMASHI Yoshinobu	筑波大学・数理物質科学研究科
中務孝	NAKATSUKASA Takashi	理化学研究所・仁科加速器研究センター
佐々木勝一	SASAKI Shouichi	東北大学・理学研究科
住吉光介	SUMIYOSHI Kosuke	沼津工業高等専門学校・教養科、
大西明	OHNISHI Akira	京都大学・基礎物理学研究所

2.8.1 はじめに

原子核は、強い相互作用によって核子が互いに結合した有限量子多体系である。低エネルギー領域の原子核物理は、核子を基本的な自由度として記述する枠組みが伝統的に取られており、大きな成功をおさめている。一方で、重イオン衝突など高エネルギー領域の実験の解析から、量子色力学 (QCD) が強い相互作用の基礎理論であることは疑いのないものとなっている。原子核物理の理論的研究は、クォーク・グルーオンの力学を直接扱うものから少数核子多体系、安定核での魔法数の出現、クラスター物理、中性子・陽子過剰核（不安定核）の存在、高密度核物質（中性子星）、ストレンジネスなど、強い相互作用にまつわる多様な現象を、各階層に応じて多様な手法を駆使して進められてきた。

近年コンピューターの急速な発展と新しい計算アルゴリズムの開拓などに伴い、各分野の研究は、精密化の方向に進むとともに、各分野をまたいだ研究も活発に行われつつある。今後の計算核物理が進むべき重要な方向のひとつは、こうした各階層での物理現象を、より密接にかつ定量的に紡いでいくことによる、QCD を基礎理論とした核子および核子多体系の理解を通じて、宇宙の進化における元素合成や超新星爆発現象の理解を確立していくことにある。この報告書では、とりわけ日本で活躍する研究者を中心とした視点で、現在および将来の原子核物理の理論的研究の動向を検討した内容を示す。まず第 2 節では現状分析を行い、第 3 節において今後 5～10 年の間に特に推進すべき課題を 4 つの小区分に分けて挙げ、続く第 4 節ではそれ以外の推進すべき課題を、やや長期的視野で取り組むべき課題も含めて示していく。第 5 節では、今後の研究に必要な計算機資源の見積りに加えて、高性能計算機を必要とするような研究成果を継続的にあげていくための、研究体制の整備、構築の必要性について、計算基礎科学連携拠点 (JICFuS)[1]、HPCI 戦略分野 5 などの紹介も交えて報告する。最後に第 6 節でまとめと今後の展望を述べる。

2.8.2 現状分析

2.8.2.1 クォーク・グルーオン多体系

■ 格子 QCD によるハドロン構造

原子核とは、有限個の核子の自己束縛系であり、その核子同士を結び付けている相互作用の基礎はクォークとグルーオンの力学を記述する量子色力学 (QCD) であると考えられている。高エネルギーの原子核反応における QCD の摂動的解析の成功に対して、原子核の基底

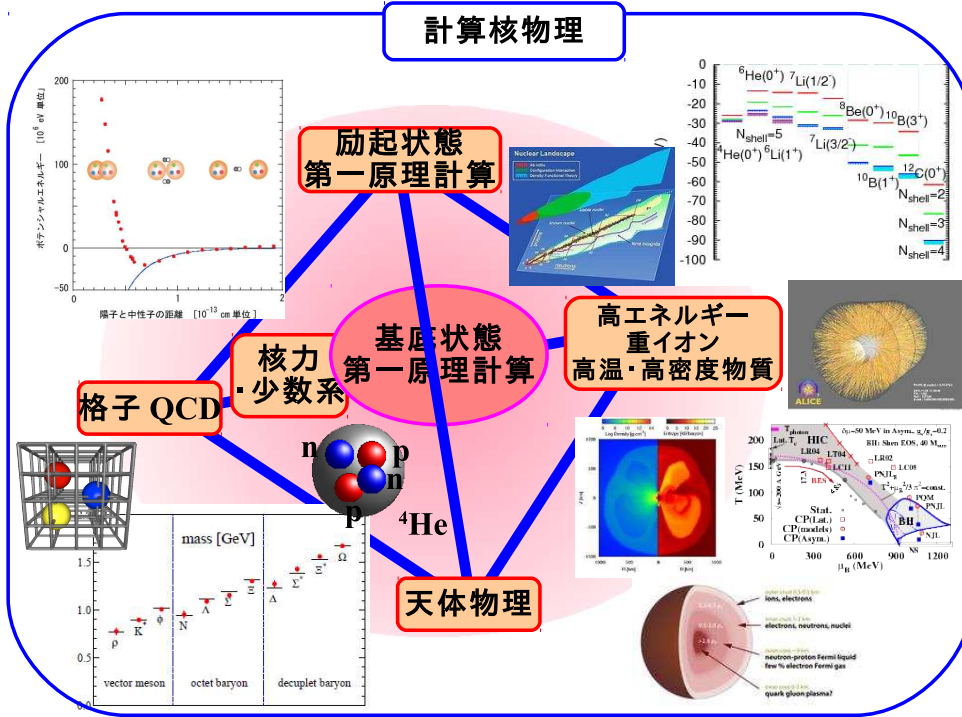


図 2.8.1 計算核物理が対象とする研究領域とそれぞれの相互の関係を模式的に示す。なにかにはめ込んである図は、文献 [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] から引用。

状態近傍の現象に対する QCD の直接的な解析は、摂動論が使えないために非常に難しい。そのため、低エネルギーの原子核現象を理論的に調べるためには、有効模型もしくは QCD 和則、格子 QCD 計算が用いられる。このうち、格子 QCD は Wilson によって提案された、QCD を解析する強力な手法である。ミンコフスキー 4 次元連続時空上の非可換ゲージ理論である QCD を、ユークリッド化した 4 次元格子点上のクォーク場とその格子点をつなぐリンク上にゲージ場を配置することにより、ゲージ対称性を保持した有限自由度の場の理論として定式化する。こうして QCD が正則な理論として定義されるだけでなく、経路積分法により非摂動的な計算を可能とした。その一つの重要な応用が、高性能の計算機を駆使することによって様々な物理量を QCD を基礎として数値解析することである。この節ではこの格子 QCD 計算の最近の成果を概説する。

格子 QCD の具体的な数値計算を実行するためには、いくつか克服すべき課題がある。

- (i) 計算機の演算速度及びメモリ容量の制限から、時空点の数（格子サイズ）を大きくとることができない。
- (ii) クォーク伝搬関数を求めるための線型方程式の解の収束性を良くするた

め (条件数を大きくしないため) クォーク質量を軽くすることができない。(iii) 動的クォーク (クォークの真空偏極) の効果を正しく評価するためには数値計算のコストがかかる。これらの課題は、様々な工夫を凝らすことにより、次第に克服されて、現在では、ストレンジ (s) クォーク質量を現実の値 (物理点) に固定し、アップ (u)・ダウン (d) クォーク質量は s クォークよりも軽かつ互いに等しいとし、これらのクォークの真空偏極も正しく評価した $2+1$ フレーバ格子 QCD 計算が主流となっている。

例えば、物理的な空間サイズ約 $2-3$ fm (格子間隔を 0.1 fm 程度としたときは格子点の数は 16^3 から 32^3 程度に相当する)、 u 、 d クォークを π 中間子の質量に換算して $200-300$ MeV 程度の軽さまで近づけたシミュレーションが 2006 年の時点で筑波大学のグループにより先駆的に報告されている [10, 2]。動的クォークの取り扱いについても、格子上でのクォークの定式化は、元々ウィルソンが提案したウィルソン型と、計算コストが少ないが理論的には問題が指摘されているスタッガード型の従来からある二種類の他に、現在では、ウィルソン型に比べ数値計算のコストが、さらに 5 倍から 10 倍にはなるが、格子上で厳密なカイラル対称性を持つ、オーバーラップ形式 [11] やドメインウォール形式 [12, 13] によるクォーク定式化による数値計算も行なわれるようになった。さらに、最近では、 u 、 d クォークの質量差まで考慮し、3 種類の動的クォーク u 、 d 、 s を全て物理的なクォーク質量上 (物理点) で扱ったシミュレーションも可能となりつつある [14]。

こうした格子 QCD の大規模数値計算が掲げる大きな課題のひとつは、原子核を構成する核子や中間子などのハドロン粒子の基本的な性質を QCD に基づいて再現することである。現在、擬スカラー中間子やベクター中間子、並びに重粒子 8 重項、10 重項などの比較的に質量の軽いハドロンの基底状態に関して、その質量を格子 QCD 計算によって数 % の精度で再現されることが示されており、QCD がその低エネルギー領域においても、強い相互作用の基礎理論として検証されるに至った。

さらにハドロンの質量のみならず、例えば、中間子の弱崩壊に関するハドロン遷移行列 (π 、 K 中間子のレプトン崩壊や非 CP 対称な弱崩壊に関係する中性 K 中間子の非レプトン崩壊) においては、非常に高い精度で実験値との比較もなされている [15, 16]。また小林-益川理論のユニタリティの精密検証においても格子 QCD 計算の結果が決定的な役割を果たしている [17, 18]。現在の段階で前述のような中間子系において達成されてきた精度に匹敵する精密計算には至っていないが、原子核を直接構成する、核子やその他の重粒子の構造に関する研究も、着実に成果をあげている [19, 20, 21]。

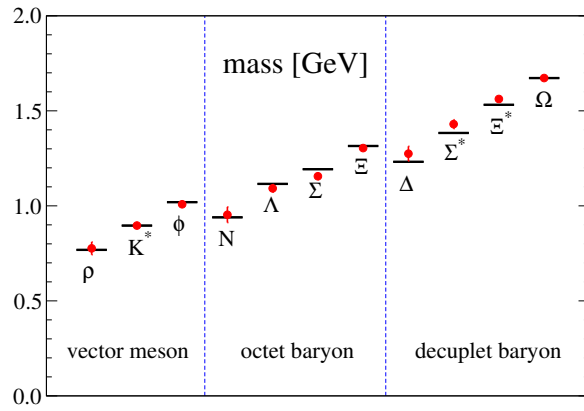


図 2.8.2 筑波大学 PACS-CS グループによる 2 + 1 フレーバ格子 QCD 計算による軽いハドロンのスペクトルの結果。 m_π, m_K, m_Ω の実験値をインプットとして使っている。文献 [2] より引用。

■ 格子 QCD によるハドロ少数多体系

ハドロには多様な励起状態がこれまで実験で観測されてきたが、最近ではクォーク模型を使って分類ができていない、エキゾチックなハドロンの存在も実験的に報告されている。このようなエキゾチックなハドロンも含めて、ハドロンの励起状態の研究においては、これまでの基底状態の研究のように、単なるハドロ 1 粒子状態に留まらず、ハドロ 2 粒子の共鳴状態として取り扱う、より複雑な解析方法が必要となる。

もちろん、ハドロ 2 粒子の共鳴状態の生成の有無は、考えているハドロ 2 粒子間に働くハドロ間相互作用に強く支配されており、QCD に基づくハドロ間相互作用の理解の深化は、自ずと格子 QCD を用いたハドロ少数多体系を対象とする研究への発展に繋がるものである。

まず、ハドロ 2 粒子からなる系については、有限体積中での 2 粒子系の相対エネルギーの有限サイズ効果から 2 粒子間の散乱位相を求めることが可能である [22, 23]。このようなハドロ間相互作用における散乱位相の研究は、筑波大グループを初めとして日本の研究者によって精力的に行われ、現在では世界中のグループでも行われるようになっている。最近の特筆すべき研究としては、散乱位相の研究を進展させ、 ρ 中間子を強い相互作用で 2 つの π 中間子に崩壊する不安定粒子（共鳴状態）として取り扱い、その崩壊幅を計算することにも成功している [24]。

また別の発展としては、ハドロ 2 粒子の南部・ベレー・サルペーター散乱振幅から定義される波動関数を格子 QCD により数値的に求め、その波動関数からハドロ間相互作用の

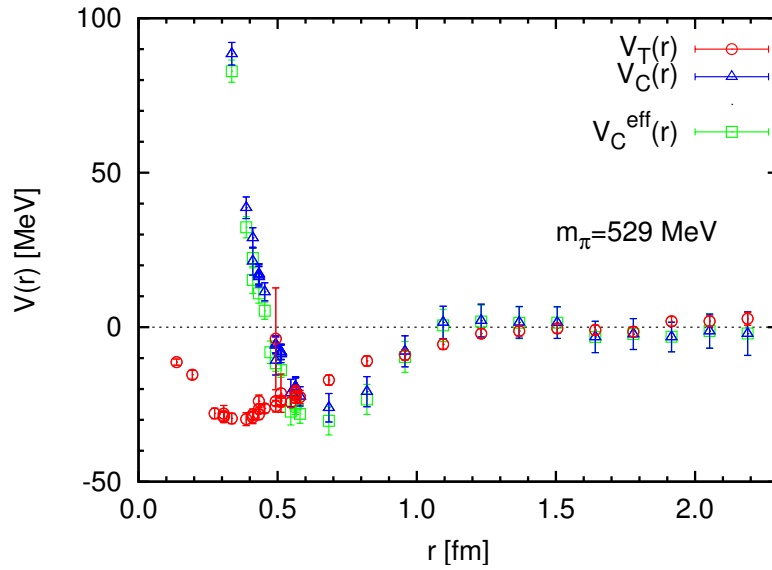


図 2.8.3 π 中間子の質量が 529 MeV に相当するクォーク質量での、クエンチ近似の格子 QCD 計算で得られた、スピン三重項状態に対する核力ポテンシャル。三角が中心力、丸がテンソル力であり、四角はテンソル力を繰り込んだ場合の有効中心力ポテンシャル。文献 [25] より引用。

ポテンシャルを引き出す方法が提唱されている。その画期的な方法により、格子 QCD 計算から核力ポテンシャルを引き出すことに成功した [3]。この方法で得られた核力ポテンシャルは、従来の現象論的ポテンシャルの形を定性的に再現し、中心力およびテンソル力はクォーク質量を軽くする（現実に近い）と相互作用が強くなる（テンソル力も増大する）傾向を示している。エネルギー依存性や角運動量依存性に加えて、三体力への試みもすでに計算が進められている。とりわけ、ストレンジネスを含んだハイペロン力への拡張はハイペロン散乱実験が困難であるだけに、大きな期待が寄せられている。

さらに最近では、QCD に基づく原子核の直接構成とその諸性質の解明に向けた研究も始まっている。2010 年筑波大グループは 原子核構造論において最も基本となる ${}^4\text{He}$ 原子核の格子 QCD による直接構成に世界で初めて成功している [26]。

■ 高温高密度での QCD 物性

QCD の極限状態に目を転じてみると、QCD の有限温度相転移の解明を目指した高エネルギー重イオン衝突実験が現在ブルックヘブンの RHIC や CERN の LHC で行われている。そこで得られた実験データを曖昧さ無く解析するためには、QCD の相転移に関する、理論

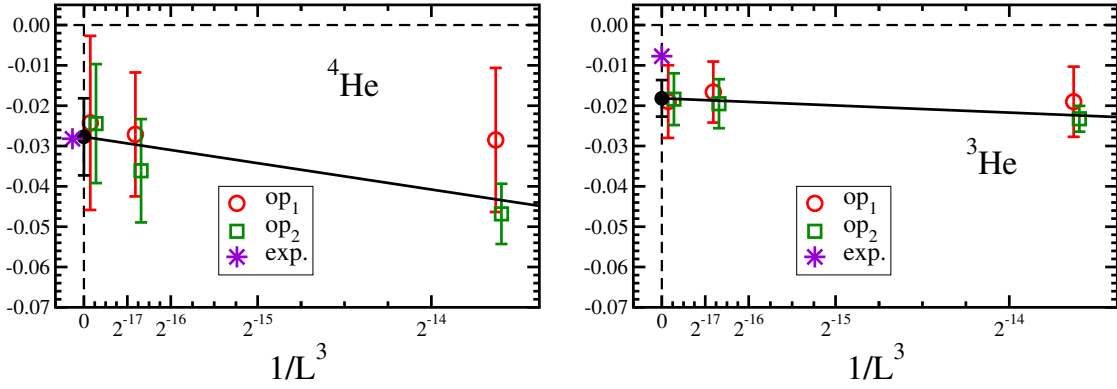


図 2.8.4 クエンチ近似の格子 QCD 計算による軽い原子核、 ${}^4\text{He}$ (左図) と ${}^3\text{He}$ (右図)、の束縛エネルギーの計算。図では、原子核に対するエネルギーシフト $\Delta E_n = M({}^n\text{He}) - nM(N)$ [GeV] の空間体積 L^3 依存性を 2 種類の生成演算子に対してプロットしている。黒丸と星印はそれぞれ空間体積無限大極限への外挿値と実験値を表す。文献 [26] 参照。

計算による基本的な情報が不可欠である。まずは、これまでの格子 QCD の数値シミュレーションによる研究によって、着実な成果をあげてきている高温ゼロ密度での QCD 物性について述べる。初期の研究段階では、クエンチ近似計算や現実よりも重いクォーク質量領域での研究が多く行われたが、最近では (比較的計算時間のかからない) スタッガード型クォーク作用を用いた計算が、すでに現実世界とほぼ同じクォーク質量を用いて行われている [29]。そのため、相転移温度や状態方程式 (熱力学量間の関係式) の計算は十分に精密物理と言えるものになり、もう一つの代表的なクォークの定式化であるウィルソン型クォークによる研究を進めることにより、格子上での異なるクォークの定式化による系統誤差を検証すべき段階にある。また、より進んだ研究として、ハドロンの質量スペクトルの温度変化や [30]、QCD 物質の流体力学的性質を決める輸送係数 (ずり粘性や体積粘性など) [31, 32] の計算も現在行われている。これらは、計算コストなどの理由で今のところクエンチ近似による研究段階に留まっているが、計算機性能のさらなる向上に伴い現実世界に近い計算が可能となれば、今後の研究の進展が多いに期待される分野である。

一方、高エネルギー重イオン衝突反応過程で生成された物質は、それ自体が時空発展する動的な系なので、虚時間を用いた有限温度定式化を利用した格子 QCD に基づく第一原理計算だけでは、直接記述するのは難しい。そのため、まずは格子 QCD からは、静的な情報である状態方程式を決定し、その情報を元に現象論として相対論的流体力学を介して、実験結果の解析を行ってきた。従来、流体数値シミュレーションは重イオン衝突反応で生成された

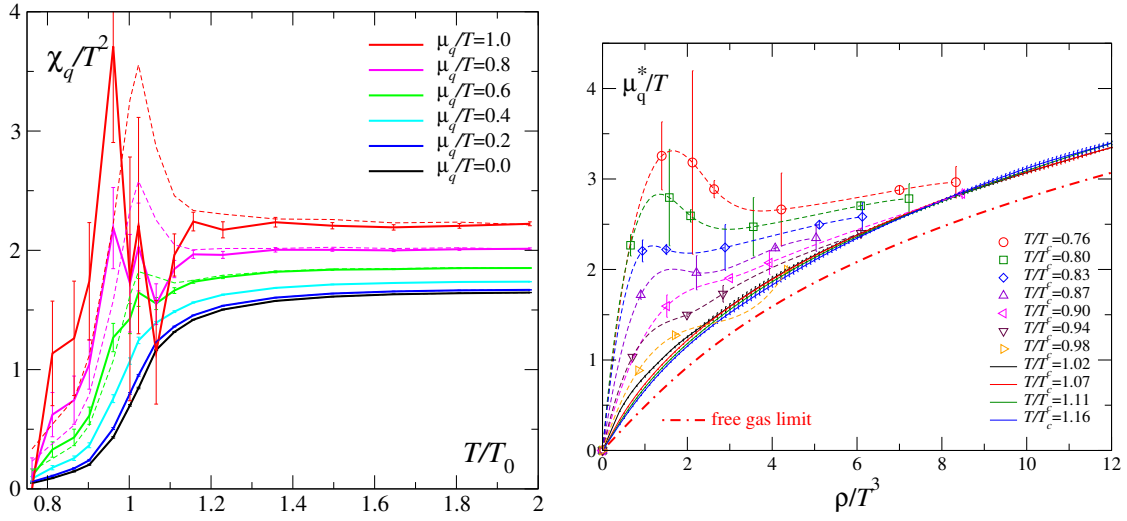


図 2.8.5 (左図) 級数展開法で計算したクォーク数の揺らぎの温度 (T) 依存性 [27]。有限化学ポテンシャル (μ_q) での臨界点でこの量は発散すると考えられている。実線は $O(\mu_q^4)$ まで、破線は $O(\mu_q^2)$ まで考慮。 T_0 は $\mu_q = 0$ での相転移温度。(右図) カノニカル分配関数から計算した化学ポテンシャル μ_q^* とクォーク数密度 ρ の関係。温度が低いところでは一つの化学ポテンシャルに対して密度は複数の値を取りえることを示している。これは一次相転移点での二相共存に対応し、低温高密度領域に一次相転移があることを示唆している [28]。

局所熱平衡物質の平均的な振る舞いを記述してきており、計算時間はそれほどかからなかった。しかし、近年、RHIC や LHC で測定された生成粒子の方位角分布の揺らぎの実験結果は、事象ごとの揺らぎを含む流体数値シミュレーションの必要性を示唆している [33, 34]。今後、極限状態、特に RHIC や LHC で達成されるような高温低密度における QCD 物質の精密物理を展開するためには、揺らぎ入りの流体数値シミュレーションの定式化を行い、実験と同程度のイベントを貯めるための大規模数値計算が必要になる。

前述の高温ゼロ密度領域の進展と比べると、高密度領域での QCD 物性の理解はまだ進んでいない。これまでの現象論的な研究から、高密度での臨界点の存在や、複雑な相構造が予想されている [35, 36]。もし臨界点が存在すれば、高エネルギー重イオン衝突実験で観測されるはずである。また、そういった高密度の QCD 相転移の詳細な情報は、超新星の爆発メカニズムの解明や中性子星のような超高密度天体の内部の状態を知るために不可欠である。このように高密度状態の QCD 物性研究のための第一原理計算が期待されているが、高温状態の研究とは対照的に、本格的な研究はまだ始まったばかりである。QCD のシミュレ

シヨンの基礎であるモンテカルロ法には、クォークの化学ポテンシャル μ_q の導入により符号問題を引き起こすという根源的問題が内在している。その難問を克服するためにいろいろな計算方法が試されている [37]。動的クォークの効果を取り入れた計算はコストがかかるため、これまでは、様々な試行錯誤による計算方法の開発自体が難しい状態にあったが、最近になって低密度領域から徐々に研究を進めることができるようになった。図 2.8.5 に示した結果はその例である。現在広く用いられている方法の一つは、 $\mu_q = 0$ の周りで μ_q について級数展開をして物理量を評価する方法である [27]。しかしながら、この方法は収束半径の制約によって低密度領域でしか有効な方法とならない。謎の多い QCD の高密度領域を研究するためには新しい計算方法の開発が不可欠である。それが確立されれば物理学の新しい研究領域が立ち上がると期待される。

2.8.2.2 核子多体系

■ 第一原理計算

前節で述べたように、原子核およびその構成要素である陽子や中性子 (核子) を、格子 QCD の方法を使って、クォークやグルーオンの力学に基づいて記述する試みが進められつつあるが、計算できる領域は He 以下の軽い質量領域に限られている。そもそも、クォークは単体では取り出すことができないので、構造や反応など、低エネルギー領域での原子核の現象の見通しの良い記述としては、常にクォーク・グルーオンの自由度をあからさまに持ち込むよりも、核子を基本的な自由度として考え、その量子力学的多体系として原子核を扱う枠組が、依然として有効であると期待される。即ち、原子核理論の重要な研究課題として、核子間の相互作用 (核力) を高い精度で記述する枠組みを構築すること、およびその上でそのような高精度の核力の観点から、原子核の性質を、核子多体系として理解すること、を挙げることができる。このような核子多体系の統一的理解には、理論に確かな実験再現性およびそれに伴う予言力が期待されるが、そのような多粒子系の量子力学的状態を精度良く求めることは、核力の複雑さに加え多体問題の難しさを克服する必要がある。ここでは、まず核力の理解の現状、および比較的少数の核子多体系の原子核の研究の現状について述べる。

核力の理解は、歴史的には、短距離部分を除いてそのクォークによる内部構造には目をつむり、核子の間の中間子の交換によって核力を記述することによって進められてきた。これまでの研究で、核力の構造は、その二核子間の距離によって分類することが有効であるとされており、とりわけ、遠方での振る舞いは湯川秀樹博士のパイ中間子交換理論による説明が確立していると言ってよい。一方多重パイ中間子交換やより重い中間子の交換が効くような

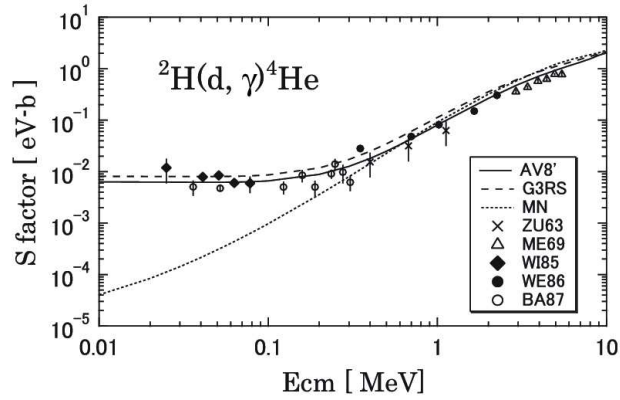


図 2.8.6 現実的核力 (AV8' および G3RS) を用いて計算された ${}^2\text{H}(d, \gamma){}^4\text{He}$ 反応の Astrophysical S factor を、実験値と比較した図、有効中心力のみを含む核力ポテンシャル (MN) を用いた場合と比べて、低エネルギー領域で S factor がほとんど減少せず、水平になっていることがわかる。文献 [39] から引用。

中短距離部分は、現在でも完全には理解されておらず、モデルに依存している。今日、膨大な核子-核子散乱の実験データを非常に高い精度で再現し、重陽子の束縛エネルギー、半径、電気四重極モーメントなどを再現する二核子間力のモデルが提唱されている。これらはその精度の高さからいわゆる現実的核力と呼ばれ、その代表的な例として、CD-Bonn、Nijmegen、Argonne といったポテンシャルモデルや、カイル有効場の理論に基づくものがある。

近年の計算機の性能向上および計算手法の開発によって、こうした現実的核力を用いた核構造・核反応の計算が、精力的に行われるようになってきている。三（四）核子系の場合には、厳密解を求める処方箋として Faddeev (Faddeev-Yakubovsky) 方程式が知られており、その計算を具体的に実行するために、(特に四核子系を解くために) 高性能の計算機が用いられている。また、束縛状態の計算では各種の変分法も有効な手法であり、 ${}^4\text{He}$ 原子核の場合には、現実的核力のうち特に重要な成分を抜き出した Argonne v8' ポテンシャルを用いて、様々な方法で (Faddeev-Yakubovsky 方程式を解いた場合とほぼ同じ) 精度の高い解が得られることがベンチマーク計算 [38] によって示されている。

現実的核力は核子-核子散乱や重陽子などの二核子系の実験データを再現するように決められているが、これだけで三核子系以上の原子核の性質が正確に再現できるかどうかは自明ではない。特に、上で述べた核力の長距離部分がパイ中間子交換によって記述できることを基礎として、三核子が互いに長距離にあるときに二核子間の核力に加えて余計な引力（藤田

宮沢型三体力) が働くことが指摘されている [40]。実際に、これまでの三核子系・四核子系の精密計算と実験データとの比較が、Faddeev 法もしくは変分法による束縛状態の計算や、Faddeev 法による核子・重陽子反応など三体散乱問題の分析などによって行われ、 ^3He や ^3H 、 ^4He 原子核の束縛エネルギーに関して、三核子系で数百 keV、四核子系で数 MeV の引力的効果を与える三核子間力の存在が必要であることが確認されている。また、陽子・重陽子散乱においては、弾性散乱断面積や偏極分解能などの直接測定が可能な領域における実験値との比較が行われ、入射粒子のエネルギーが高くなるにつれて三体力の重要性が明らかになりつつある [41, 42]。^{*1} ここまで述べた原子核の第一原理計算では、束縛状態についてはエネルギーだけでなく波動関数も求められるため、各種物理量を計算したり、軽い複合核の反応計算などに用いることができる。最近の軽い複合核の反応計算では、テンソル力による D 波の混合を考慮しなければ宇宙物理学的 S 因子の実験結果を全く再現しないことが明らかになった (図 2.8.6)。観測量におけるテンソル力の痕跡を調べるため、さらに重い核を含んだ反応解析の発展が期待されている。しかしながら、四核子を超えた質量数の原子核の第一原理計算では、フェルミ粒子の多体系では粒子数 A に対して反対称化のために $A!$ 個の置換を扱う必要があり、計算を困難にしている。グリーン関数モンテカルロ法、閉殻を仮定しない殻模型、カイラル有効場の理論による格子計算手法などがあるが、これらの手法では、核子数 12 程度の p 殻近傍の原子核まで構造計算が行われており、多くの成果を挙げている。また、結合クラスター法では、 ^{16}O , ^{40}Ca , ^{56}Ni など、閉殻やその近傍の原子核を中心に計算が行われている手法もあり、今後、さらなる発展が期待される。さらに、閉殻を仮定しない殻模型では、原子核反応論へも応用され、原子核構造と反応の統一的研究に向け注目を集めている [43]。

引き続き、現実的核力に基づく有効相互作用を用いた手法の発展について述べる。自由空間で決められた核力 (生の核力) は、一般に短距離部分に強い斥力を持つが、短距離での強い斥力を正確に扱うには、模型空間に高い運動量成分を含めねばならず、そのままでは扱いづらい。強い斥力の効果を、ユニタリー変換 (Lee-鈴木変換)[44] などにより、物理量を不変に保ちながら、模型空間に繰り込むことにより、もともと短距離部分にあった強い斥力を弱

^{*1} ここでは正味の引力を与える三体力について述べたが、これは三核子が互いに比較的離れていて、三核子中の任意の二核子間の相互作用としてパイ中間子交換描像が有効な場合に寄与する力と考えられている。中距離、短距離での二核子力がまだ完全には理解されていないように、三核子がより近づいている状況での三核子力も、まだ良くわかっていない。現象論的には、たとえば核物質の性質を再現するためや、観測されている中性子星の質量を説明するためには、短距離で斥力的に働く三体力が必要であると考えられている。

めた有効核力が導出される。このようなソフトな（高い運動量成分を繰り込むことによって得られた）有効核力を用いる利点は、短距離での強い斥力を直接扱わない点で、閉殻を仮定しない殻模型では、模型空間に対する計算の収束性が生の核力を直接用いた計算と比較して非常によくなる。一方、核反応計算でいえば、現実的核力から導出された複素 G 行列有効核力を用いて、パウリの排他律や三体力などの効果を密度依存性として有効核力に繰りこみ、微視的核反応模型に適用することで、一定の成果を挙げている [45]。

ラムダ (Λ) 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）の研究の現状について、ここで簡単に触れておく。上で述べたような（通常核についての）研究を、ストレンジネスを含めた原子核へと拡張することにより、一般化された核力ならびにそれに基づくよりひろい原子核の統一的記述を目指すことができればよいが、このような拡張を進める上での大きな障害は、ハイペロン散乱実験が難しいために散乱データの情報が限られていることである。これは、現実的核力模型の構築において、豊富な実験データの蓄積を利用できることとは対照的である。ストレンジネスを含む中間子やハイペロンの関係する相互作用に現れる結合定数などのパラメータをフレーバ対称性を手がかりに決めることや、ハイパー核のガンマ線分光実験などのデータと多体の核構造論を組み合わせ、そこから間接的にハイペロン核子相互作用の情報を引き出し、現実的核力をハイペロンを含むように拡張する試みもなされているが、まだまだ発展途上中である。この分野は、むしろ、格子 QCD によるハイペロンポテンシャルの導出や、最大質量の観測データについて近年話題 [46] となっている中性子星の内部構造の解明などと密接に関連しており、今後の飛躍的発展が期待される分野である。

■ クラスター模型

比較的軽い質量領域の核構造理論の長年のテーマとして、クラスター構造のようなエキゾチックな構造、の研究を挙げることができる。さらに、中性子過剰核に特徴的な現象である一粒子準位の異常や逆転といった、最近実験サイドからも大きな興味を持たれている物理現象に対しては、従来提案されてきた模型に改善の余地がある。第一原理的な計算手法によっていかにしてクラスター構造などのエキゾチックな構造を記述できるかは、大きなオープンプロブレムになっている。なぜならば、現実的な核力は原点付近に強い斥力コアを持つために大変扱いが難しく、単純な一粒子波動関数の積（スレーター行列式）では核子間の相関を取り扱えない。前述のように Lee-鈴木変換による有効核力を用いた、芯を仮定しない殻模型計算（模型空間が数学的に明確に定義されている）においても、クラスター構造が顕著であると思われる状態のエネルギースペクトルの記述には成功しておらず、この困難は解消されてい

ない。そのため、これまでの多くの原子核模型では、この斥力コアの効果および原子核の核内媒質効果をたくみに繰り込んだ、より扱いやすい有効核力を核構造計算に用いてきた。

クラスター構造のような、多核子が強い相関を持って原点から離れて空間的に局在した配位を記述するためには、核子の一粒子波動関数として空間的に局在したローカルガウスなどを用いるのが効果的である。ローカルガウスの波動関数は非直交基底であり、数学的に厳密に模型空間を定義し、現実的核力から模型空間で用いる核力へ一意的にマッピングすることが難しくなる。そのため、現実的核力を用いてクラスター構造を記述しようとする場合、現実的核力から模型空間で用いる核力へのマッピングを厳密に行うのではなく、2つの核子が接近した際に核力の斥力コアが低くなるようにユニタリー変換を与え、さらに少数核子系の性質を再現するようにパラメータを調節する方法が有効である。このような考え方に基づく、ドイツで発達しつつあるユニタリ相関演算子法は、ローカルガウス基底に対する現実的核力の適用を可能とし、幅広い質量数領域のクラスター構造を研究できる現在ほとんど唯一の方法である。しかしそのユニタリー変換は、上記の理由により一意的に定まる厳密なものではなく、さらに、ユニタリー変換されたハミルトニアンをどう簡単な既存の演算子で表現するかについても、特にそのテンソル相関の部分に関してはまだ改善の余地が残されている。このように、現実的核力を用いたクラスターの構造の研究には、方法論の開拓が重要である。同時に、ひとたび相互作用が設定された後でも、ハミルトニアンの行列要素の計算に膨大な数値計算が必要となる。

また中性子過剰核においては、中性子数の変化とともに原子核がどのようなクラスター・シェル競合を見せるのかを明らかにすることが物理の課題として重要であり、さらに、原子核の基底状態ではシェル模型的成分が優勢な場合でも、励起状態にはクラスター構造が現れる可能性もあり、統一的な模型の構築が求められている。

これらの核構造情報は、核反応理論を通じて直接実験結果と比較される。特に、励起状態や共鳴状態にクラスター構造が発達する原子核においては、それらの状態がさまざまな観測量にダイナミカルに影響を与えられることが知られる。そのために、励起状態のみならず閾値を超えた連続状態を精密に取り扱う必要がある。それらの状態を核反応の観点から精密に取り扱うために、連続状態離散化チャネル結合 (CDCC) 法が九州大学のグループを中心に開発されてきた。この CDCC 法は、先の Faddeev 方程式のように完全な厳密解を与えるものではないが、クラスターに分解するような反応を取り扱うときには非常に良い精度で反応現象を記述することが可能である。さらに、近年では非常に大きな模型空間をとることも可能となり、核反応分析を行う模型としては非常に精度の高い核反応模型である。

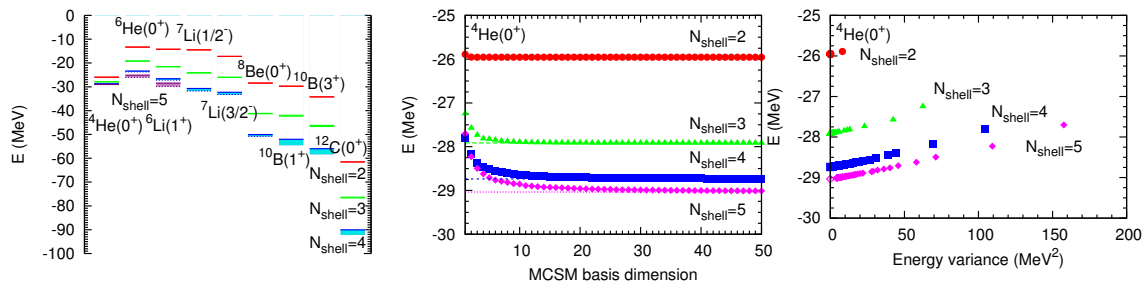


図 2.8.7 (左図) モンテカルロ殻模型を用いた第一原理計算による軽核のエネルギーのベンチマーク。実線がモンテカルロ殻模型計算、バンドがエネルギー分散による外挿からくる補正、点線が厳密解。 N_{shell} は模型空間の大きさを示す。文献 [5] 参照。(中央図) モンテカルロ殻模型計算によるエネルギーと基底数の関係。典型例としてヘリウム 4 原子核の基底状態 (0^+) を示す。点線は厳密解。(右図) 中央図の例に対応した基底数によるエネルギー分散の変化。エネルギー分散が 0 のところにある白抜きのシンボルは厳密解を示す。

また、その原子核内で発達したクラスターの一部が標的核に移行するような多核子移行反応も話題として取り上げられる。しかし、現段階において日本国内では、直接反応過程としての核子移行反応計算は不十分なものがあり、今後の発展・改善が必要である。

■ 殻模型

質量数 20 を超えるようなより重い原子核では、現象論的補正なしの第一原理計算は困難となるため、原子核殻模型計算と密度汎関数法による計算が選択肢としてあげられるが、この節では、原子核殻模型計算の話題を挙げる。

原子核殻模型計算では、まず、核子多体系を魔法数をもつ閉殻と、バレンス殻内のバレンス核子の運動に分離する。バレンス核子の波動関数を、取り得る全ての多粒子配置を表現するスレータ行列式 (配位) の線形結合によって記述することにより、設定した模型空間の配位混合を完全に取り入れた高精度の計算を可能とする。バレンス殻内のバレンス核子のすべての配位で張られるヒルベルト空間を模型空間と呼ぶ。通常 1 主殻をバレンス殻ととり、模型空間外からの寄与は、有効相互作用理論によって、バレンス核子間の残留相互作用に繰り込まれる。この手法により、閉殻近傍の原子核の低エネルギースペクトルを精度良く再現することができ、ガンマ線分光によって得られた励起エネルギー、遷移確率、磁気能率などの多数の実験値と、広範な質量領域で簡便に比較することができる理論計算手法であり、有用性は確立されている。また、理論的にも、有効相互作用の構築に実験値による現象論的補正が必要なため、実験と理論の二人三脚ですすんできた手法である。

この模型には、主に 2 つの現実的な制限がある。一つは、模型空間の指数関数的増加であり、中重核領域では対角化すべきハミルトニアン行列の次元が 10^{10} を超えることも珍しくない。通常この行列の直接対角化はランチョス法を用いておこなわれ、最新の並列計算機を用いても 10^{11} 次元程度が限界となる。今の計算機の発展を外挿すると 10 年後にはおよそ 10^{14} 次元のハミルトニアン行列が対角化可能となるが、質量数 100 を超える重核領域の原子核構造を計算するには不十分であり、なんらかの形の近似が必要となる。さまざまな手法が試みられているが、日本ではモンテカルロ殻模型法により直接対角化の限界を超えた計算が行われている [47]。このような模型空間の指数関数的増加による制限は閉殻を仮定しない殻模型による第一原理計算についても同様で、閉殻を仮定する殻模型とともにモンテカルロ殻模型法を用いた研究が、HPCI 戦略分野の一部としての活動が平成 23 年度から始まっている。(図 2.8.7) 今後 10 年で外挿法など、近似手法のさらなる発展も見込まれ、計算機の発展と両輪をなし、殻模型計算の適用範囲を大きく広げていくと期待される。

もう一つの制限は有効相互作用における現象論的補正である。核子間の核力から出発して模型空間内における有効相互作用を求めるのが理想ではあるが、現在の閉殻を仮定した殻模型計算ではそのような精度に達していない。この原因に 3 体力の効果や連続状態との結合が考えられ、これらの寄与の定量的な評価が始まっている。UMOA 法などの有効相互作用理論の発展と組み合わせることにより、現象論的補正を必要としない有効相互作用の構築という理想に近づいていくであろう。

■ 密度汎関数

密度汎関数理論は、厳密かつ普遍的汎関数の存在定理 (Hohenberg-Kohn) と実用的汎関数の構成を可能にする Kohn-Sham の方法によって基礎づけられた理論である。原子核においては、その発展の歴史的経緯から平均場模型とも呼ばれるが、原子核のバルクな特徴である飽和性を再現するためには、密度依存有効核力が必要であり、密度汎関数理論と同一のものと考えてよい。密度汎関数理論の大きな特徴の一つとして、特定の原子核 (質量領域) を記述する模型ではなく、すべての原子核を包括的かつ定量的に記述することが可能であることがあげられる [48]。

この普遍的な汎関数の存在は原理的には保障されている。しかし実際にどうこの厳密な汎関数を構成するかは自明でなく、我々がこれまで手にしたものはすべて近似的であり、Kohn-Sham の方法に基づくものである。Kohn-Sham 法は、運動エネルギーにおける量子的效果をうまく取り込むスキームを与えており、結果的には平均場理論に類似した自己無撞

着な非線形方程式となる。特に、基底状態においてもフェルミ運動が重要な役割を担うフェルミ粒子多体系に対しては、Kohn-Sham スキームに基づく汎関数の構成法が現在のところほぼ唯一の方法とあって良いであろう。

現在、全核種の質量を平均 1 MeV 以下の誤差で再現する汎関数が報告されているが、その精度をさらに向上させる研究は精力的に行われている [49]。質量について言えば、閉殻配位の原子核と開殻配位の原子核との系統的な差、特定の原子核における特殊な相関 (例えば $N = Z$ 核のウィグナー・エネルギー)、偶核と奇核の対相関の違いなどが未解決である。これらの問題は、現在のエネルギー汎関数に明らかに欠けている相関の存在を示しているが、その取り込みの方法については多くの研究がある中、決定的なものがまだ現れていない。解決に向けて、汎関数の最適化に向けた新たな研究が進められており、第一原理計算を用いて汎関数の形を探索するなど、他のアプローチによる大規模核構造計算との共同研究も進められている [4]。

通常密度汎関数計算では、一体密度 $\rho(\vec{r})$ が多体系を記述するので、計算量はだいたい M^3 のオーダーに比例する。ここで、 M は一粒子状態を記述する空間の次元。質量数 A に対して M はだいたい線形に依存すると考えてよいので、計算量は質量数に対して A^3 で増加する。通常多粒子系の量子力学の計算量と比較すれば、圧倒的にゆるやかな粒子数依存性であり、これが大きな原子核を扱うことを容易にしている。密度汎関数理論を用いた通常の計算 (Kohn-Sham-Bogoliubov) に対しては、汎用的なプログラムも開発・公開されており、これを用いて、原子核基底状態の質量・半径等を求め、自発的な核変形を決定することができ、今や誰でも中性子数 (N) と陽子数 (Z) を指定することでこれらの情報をパソコンから簡単に得ることができる。大規模並列計算と組み合わせれば、1 万個程度のプロセッサを用いた並列計算によって、1 日程度ですべての原子核の基底状態を計算することが可能である [4]。今のところ、原子核の形状に軸対称性と反転対称性が仮定されたプログラムが主流であり、特に調和振動子基底の計算コードが収束の速さなどにおいて優れている。図 2.8.8 はそのような例の一つで、HFBTHO と呼ばれる公開コードに粒子数射影を組み合わせで計算されたものである。一方で、ドリップライン近傍の中性子過剰核等を扱うためには連続状態との結合を考慮し適切な境界条件を課すため、実空間基底での計算コード開発も進んでいる [50, 51, 52]。この場合、空間の大きさや収束のスピードが遅く、一般的に上記の調和振動子基底よりも 1、2 桁大きな計算コストが要求される。

時間依存密度汎関数理論に基づく線形応答計算は、最近数年でもっとも大きく進んだ研究分野の一つである [53, 54, 55, 56, 57, 58]。日本と欧米の複数のグループが、変形した基底状

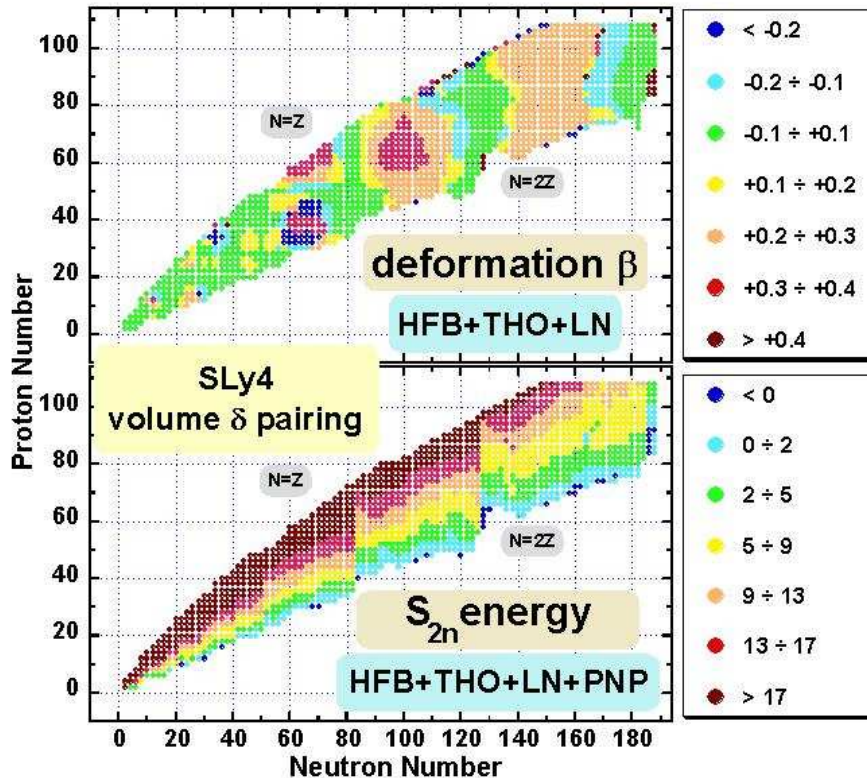


図 2.8.8 汎用コード HFBTHO を用いた偶々核の四重極変形度 β (上のパネル) と二中性子分離エネルギー S_{2n} (数値の単位は MeV)(下のパネル) (文献 [62] より引用)

態上の線形応答計算を可能にする計算コード開発にしのぎを削り、いくつかのコードが既に完成している。通常の線形応答計算では、 M^6 の計算量と M^4 のメモリ容量が必要とされ、一つの原子核の応答を調べるのに、1 万コア程度のプロセッサを用いた大規模並列計算が行われている。しかし、最近国内で開発された有限振幅法 [50] では、 M^3 の計算と M^2 のメモリで同一の計算が可能である。この手法の優位性を生かした系統的な光反応断面積の計算が現在進行中である [59, 60, 61]。

2.8.2.3 天体核物理

クォーク・ハドロン・原子核における計算手法の発展とともに、原子核物理の成果を活かした天体・宇宙物理学の諸問題への取り組みが進みつつある。核構造・反応における一貫し

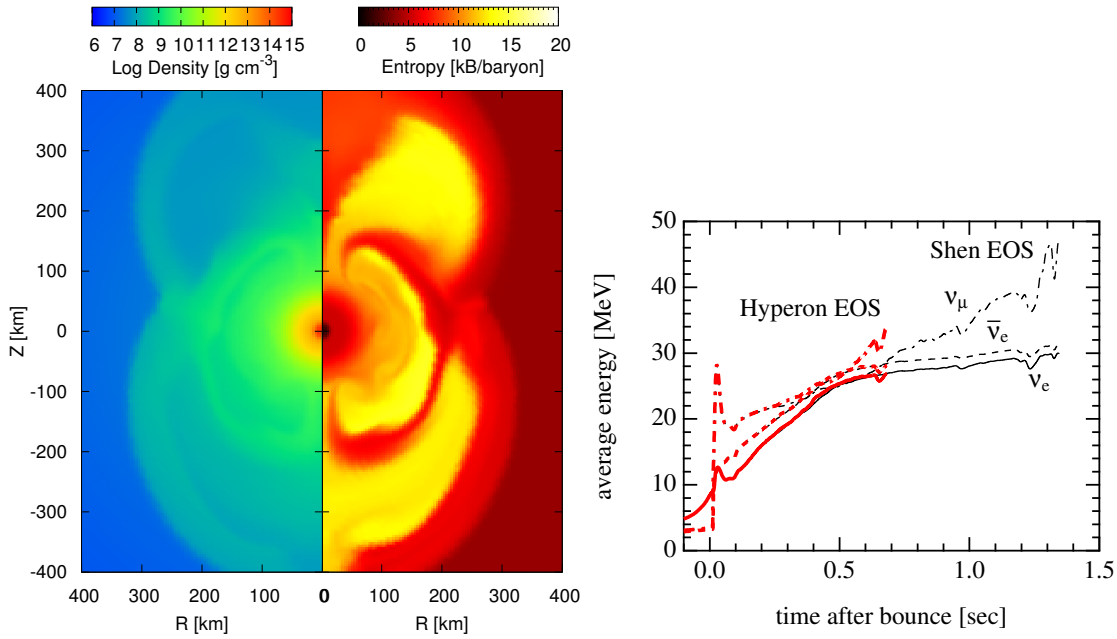


図 2.8.9 (左図) 2 次元 (軸対称) の超新星数値シミュレーションにおける爆発の例を密度・エントロピーのカラーマップで示した。流体不安定性との組み合わせでニュートリノ加熱の効果があがり、コアバウンス後の長い時間を経てから爆発に至る計算例が示された。([8] 参照。図は諏訪雄大氏提供。) (右図) 大質量星の重力崩壊からブラックホールに至るまでに放出されるニュートリノの平均エネルギーの時間変化を示した。核子物質 (Shen EOS) とハイペロン混入物質 (Hyperon EOS) の状態方程式を用いた数値シミュレーションでは、ニュートリノ放出の継続時間に大きな違いがあり、観測によりハイペロン出現をプローブできる可能性がある。([63] 参照。)

た枠組みの確立は、ビックバン・星の進化・爆発天体での元素合成過程において鍵となる原子核データの整備に繋がっている。また、第一原理計算から求められた核力から出発した核子多体理論による核物質状態方程式の構築の取り組み [64] や、高温高密度における QCD 物性の探求 [65] は、中性子星内部や超新星ダイナミクスを探ることに繋がっている。天体や宇宙における極限状態は、中性子過剰・高密度・高温と地上実験では達することのできない領域であり、最新の原子核実験データに基づいて精査した理論計算手法による探求が欠かせない。その領域はクォーク・ハドロン・原子核から星と広いスケールに渡る。

超新星爆発は極限状況における原子核物理が本質的な役割を果たす課題の代表格であるとともに、天体核物理における代表的な未解決課題でもある。超新星爆発は、大質量星の進化の最期に起こる爆発現象であり、そこでは中性子星・ブラックホールが誕生し、重元素合成

が行われ、物質がまき散らされて次の星の誕生の源となり、銀河と物質の進化の基礎となっている。宇宙物理学の重要な課題であり、40年以上に渡る長い間の多岐にわたる研究にもかかわらず、現在でも爆発メカニズムの解明には至っていない。

未解決である原因は、極限状態における原子核・ニュートリノ物理を与えることが難しいこと、および数値シミュレーションが非常に大規模なものとなるという両面の困難にある。前者では超新星コアにおける高温高密度での状態方程式 [66] やニュートリノ反応、後者では3次元空間における一般相対論・流体力学・ニュートリノ輻射輸送・電磁気学を組み合わせた統合計算が課題である [67]。数値シミュレーションによって爆発を再現することだけでなく、観測に対応して中性子星が誕生する様子や、超新星ニュートリノの放出、爆発で外部に放出される物質のダイナミクスを解明することが肝要である。こうした際には、中性子星内部の核物質・エキゾチック物質の解明や、元素合成過程で経由する広い核種範囲にわたる原子核の質量・核反応データを網羅する必要がある。近年の原子核実験・理論の進展および計算機環境の発展はめざましく、上記の難問を解決する道において、計算核物理は大きな役割を果たし、超新星の爆発現象を解明する道に貢献してきた。

中でも1990年代より理化学研究所を代表とする不安定原子核ビーム実験により、宇宙物理における核データ研究が大きく進展したことは特筆すべきである。安定線から離れた領域で不安定核の質量・半径・反応の系統的な測定がなされ、中性子過剰な領域での核子間相互作用・核構造・反応率についての理解が進んだ。実験をもとに中性子過剰な核物質の状態方程式や不安定核における核反応レートなどの理論研究が精力的に行われ、理論と実験による連携した取り組みが行われてきた。不安定核データが中性子星・超新星・元素合成の研究において果たす役割が明らかになり、原子核物理が宇宙・星で活躍する道筋が具体的に作られた。また、KEKやBNL等において行われてきたストレンジネス原子核実験研究の進展により、中性子星コア等の高密度領域におけるハイペロン出現について実験データに基づく議論が可能となってきた。ハイパー核やK中間子核について実験・理論が協力して研究が進み、 Λ についてはスピン依存相互作用まで精密な議論が行われるとともに、 Λ 以外の粒子についても核物質中でのポテンシャルの深さが明らかになりつつある。現在、高密度領域におけるエキゾチック物質出現の研究はより定量的な議論へと進み、天体現象においてエキゾチック相探索が可能であることが示されている [63, 68]。

一方、理論研究では、計算機性能の向上とともに、以前は現実的でなかった原子核多体問題の第一原理的計算が可能となった。第一原理計算による核子多体系へのアプローチ [38, 69, 70]、殻模型による大次元計算による核構造反応の解明 [71]、微視的核子多体理

論による核物質飽和性の理解 [72] が進み、天体核物理への応用が現実的なものとなっている。密度汎関数法（平均場近似を含む）による核図表上の広範囲な原子核構造の系統的な予測 [59, ?] は、 r プロセス元素合成を初めとする爆発的要素合成過程の解明に貢献し始めている。重い原子核の電子捕獲・光分解・ニュートリノ反応などの反応率計算も可能となり、核データの提供を通じて天体核物理に貢献している。不安定核や核子多体理論の発展とともに高温・高密度領域における状態方程式の研究が行われ、超新星シミュレーションに用いる状態方程式データテーブル構築 [66] へと繋がっている。こうした微視的情報を取り入れた状態方程式は様々な天体数値シミュレーションに用いられ、高温高密度核物質の果たす役割が定量的に議論されるようになった。最近発見された 2 倍の太陽質量をもつ中性子星 [?] は、核子以外のハドロン自由度を考慮した従来の状態方程式の多くを棄却し、原子核多体問題においても中心課題となりつつある 3 体力等の多体力をハイペロン等にも拡張して考える必要性を示しており、今後の進展が期待される。さらに、クォーク・ハドロン物理の研究成果が中性子星や超新星での現象に直接適用されるようになり、天体観測から QCD 相転移を探る道筋も明確になりつつある [73]。

さらに、天体数値シミュレーションの発展もめざましい。核図表上の数千種類の核種を結ぶ、原子核反応ネットワークの計算は頻繁に行われるようになり、個々の原子核反応の影響や、系統的な構造予測の影響が定量的に吟味されるようになってきた。一般相対論を数値シミュレーションにより扱うことで、中性子星合体やブラックホール形成の計算も可能となり、状態方程式が重力波放出に及ぼす影響が解明されている [74]。超新星爆発メカニズム解明には、上述のように得られた原子核・ニュートリノ物理を詳細につぎ込んだ大規模な数値シミュレーションが必要である。近年では計算機能力の向上により、球対称の範囲では一般相対論のもとでニュートリノ輻射流体計算が行なわれるようになり、ダイナミクスとしては第一原理計算を行なうことが可能になってきたため、核物理の詳細な検証が可能になってきた [75]。日本を含む世界の数グループの計算結果により、実験データで検証された範囲での核物理を用いた上で、球対称計算では爆発しない、ということが判ってきた。このため、衝撃波を後押しするニュートリノ加熱という効果に加えて、多次元的な効果（流体不安定性など）が爆発メカニズムとして必要であると考えられている [8]。しかし、2 次元 3 次元では、大規模計算によるシミュレーション結果は一握りしかなく、爆発メカニズムは諸説に分かれている。また、ニュートリノ輻射輸送の扱いは近似的な方法に依っていて、系統的な研究および近似のないニュートリノ輻射流体計算による研究が待たれている。

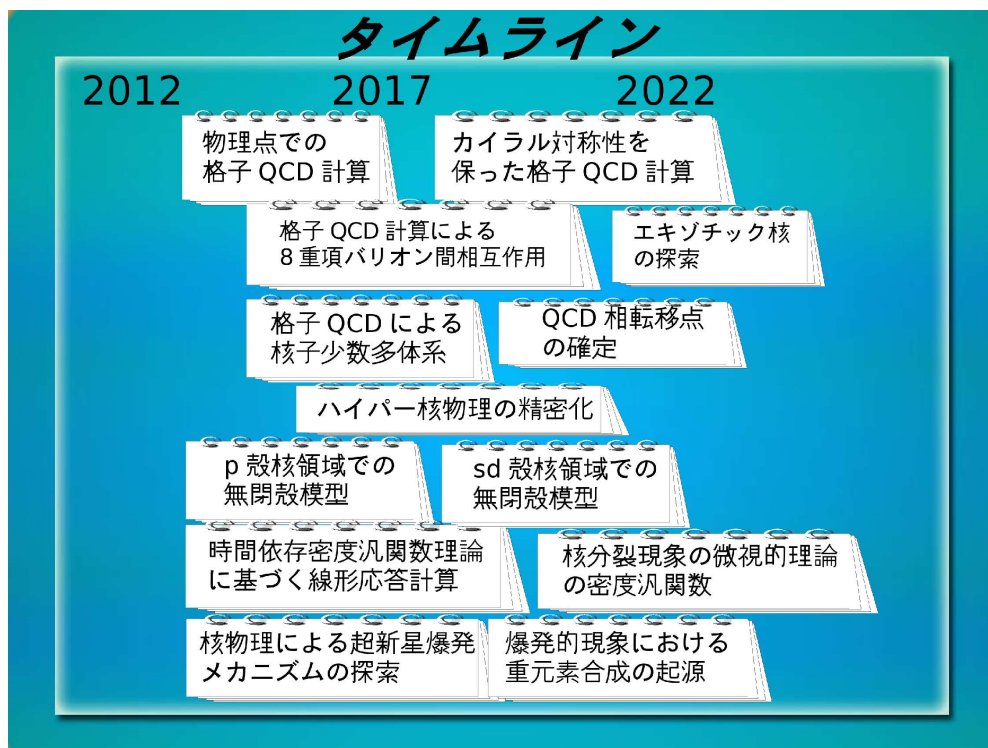


図 2.8.10 計算核物理で将来の課題として掲げた各課題のタイムラインを示す。

2.8.3 今後 5～10 年の間に特に推進すべき日本の核物理の課題

この 2.8.3 節および次の 2.8.4 節では、将来にわたっての日本の計算核物理の研究が進む方向について議論した内容について報告する。まずこの節では、比較的近い将来 (5～10 年後程度) について、特に推進すべき日本の核物理の課題として挙げられた課題を 4 つの小区分に分けて示す。

5～10 年後程度の時間間隔の計画としては、次世代大型計算機（京速コンピュータ）の共用開始に伴って計画されている研究や、さらにその先（次々世代）の大型計算機利用を見据えた活動が既に始まっており [76]、ここで示す課題もそれらと重なっているものがあるが、ここでは必ずしもこれら既存の計画に捕らわれず、日本の核物理の将来に関して、計算核物理 WG として推進したい課題を挙げる。

2.8.3.1 軽い原子核がクォーク・グルーオンの力学からいかにして創られるか?

現状分析で紹介したように、格子 QCD 計算は、これまでの主に単一ハドロンの性質を対象とする研究から、複数のハドロン間の相互作用や、そういったハドロンの複合系の性質を直接解き明かそうとする時代に入ってきている。そのような時代の到来を象徴する課題のひとつが、ヘリウム原子核などの軽い原子核を、クォーク・グルーオンの力学に基づいていかに創り出せるか、を解明することである。現在既に行われている研究から予想すると、この課題には二種類の手法がとられるであろう。

ひとつは、重陽子やヘリウム原子核など、軽い原子核を格子 QCD 計算で直接構成する方法である。現状分析で紹介したように、2010 年筑波大グループは、 ^4He 原子核の格子 QCD による直接構成に世界で初めて成功している [26]。この計算は、クエンチ近似（動的クォークを無視する近似）が用いられ、かつ重いクォーク質量で行われている。そのため、そういった現実とは異なる近似計算を行っていることから来る系統誤差を排除することができない。従って、現実的な（より軽い）クォーク質量でのフル QCD 計算を実行し、これらの系統誤差を取り除いていくことが重要であり今後の計算が期待されている。なお、この方法で原子核を直接構成するためには、解決すべき格子 QCD に特有の問題がある。有限体積の箱の中に引力相互作用を行う 2 粒子が閉じ込められている場合、束縛状態であっても散乱状態であっても負のエネルギーシフトを生じる。両者を区別するものは、エネルギーシフトの空間体積依存性である。束縛状態の場合は負のエネルギーシフトが空間体積無限大の極限でも有限の値で残るが、散乱状態の場合はエネルギーシフトが空間体積の逆数に比例し、空間体積無限大の極限で消失してしまう。束縛状態と散乱状態を区別するためには空間体積依存性を調べなければならず、そのための計算コストは大きい。この問題はペタスケールからエクサスケールへと計算機の能力が増大していくことによって解決していくと予想される。

もうひとつの方法は、核力ポテンシャルを格子 QCD 計算から引き出し、そのポテンシャルによる少数多体問題を解くというものである。現在までに行われている計算では、現実よりもクォーク質量が重い世界での、偶パリティの中心力およびテンソル力ポテンシャルが得られている。この核力ポテンシャルは、まだ現実のものよりも弱い引力となっており、特にスピン三重項チャネルでの重陽子の束縛状態は得られていない。ただし、 u, d クォーク質量を現実よりも重いクォーク質量領域から徐々に軽くしていくと、それに伴って得られた核力ポテンシャルの引力は徐々に強くなっていく傾向を示している。特に、原子核を束縛させるために欠かせないと考えられているテンソル力もクォーク質量の減少とともに強くなってい

く傾向が見えており、近い将来ほぼ現実のクォーク質量を用いた格子 QCD 計算が行われれば、重陽子を再現できる核力ポテンシャルが得られるのではないかという期待が高まっている。重陽子にとどまらず、 ^4He など、より質量数の大きな原子核の性質を再現するためには、三体力や奇パリティ状態の核力、とりわけスピン・軌道力ポテンシャルなども得られなければならないが、現在すでにこういった核力ポテンシャルの各主要部分を具体的にどうやって格子 QCD 計算から引き出せば良いかの研究が進展しつつある。

2.8.3.2 原子核の基底状態および励起状態の第一原理計算

核子を基本自由度として原子核構造や反応を第一原理的に理解しようとする試みは、反応については 3 核子もしくは 4 核子系まで、構造については 12 体程度までが限界である。従ってそれより質量数の大きな原子核領域を研究するためには、核子自由度を自由空間において扱ったのと全く同じようにあからさまに扱うのではなく、系を記述するのにより適した自由度を持つモデルを導入して原子核を記述することが必要となる。質量数の増加とともに系を記述するために本質的な自由度がどのように現れるかを理解するために、第一原理計算とモデル計算のそれぞれが有効な境界領域の質量数の原子核において、このようなモデルの基礎付けを与えるために、必要な課題である。将来的には、密度汎関数計算については、重いアイソトープ領域のドリップラインを预言できるような精度の向上を目指す。

■ クラスタを含む励起状態の第一原理計算

宇宙の進化における元素合成の真の理解においては、原子核が織り成す階層構造を基本原理から理解することが欠かせない課題である。具体的には、恒星内部での水素の燃焼からヘリウムが作られる課程 (CNO サイクル) にとっては、炭素の存在が必要である。ビッグバン直後の炭素がほとんど存在しない時代から、CNO サイクルが可能となる恒星が誕生するまでに、 3α の反応によって炭素が大量に生成されたと考えられている。Hoyle 状態と呼ばれる ^{12}C の励起状態が $^8\text{Be} + \alpha$ 閾値付近に存在すると预言され、実験的には見つかった。しかしながら、この状態を核子 12 体系のダイナミクスとして理論的に導き出すことには、まだ成功していない。核子を基本自由度とした第一原理計算において、この Hoyle 状態を正確に導出することは、原子核の階層構造を正確に理解し、元素合成や宇宙の進化のモデルに確実な根拠を与える上で、非常に重要な課題である。スーパーコンピュータを使うことによってこの問題を解決しようとしている研究が既に発表される段階に入っており、この課題は、喫緊に進展することが求められている。

■ 密度汎関数理論による系統的な応答関数計算

2.8.2.2 節で述べたように、密度汎関数理論の強みの一つは、特定の原子核 (質量領域) を記述する模型ではなく、すべての原子核を定量的に記述できることである。この強みと有限振幅法 [50] による計算コストの削減を生かすことで、核図表全体に渡っての系統的な計算が可能である。

既に、Kohn-Sham(-Bogoliubov) レベルでの基底状態に対する系統的計算は世界の標準になりつつあり、今後は、Kohn-Sham (平均場) レベルを越えた相関を取り入れる方向への拡張と、励起状態や時間依存現象などのダイナミクスを扱う方向への拡張が中心的なトレンドになるであろう。国内では、このうち後者において世界的に注目された研究がいくつもあり、今後5年程度で大きな発展が期待される。具体的には、時間依存密度汎関数理論に対する実時間アプローチ [90, 83, 84]、グリーン関数を用いて連続状態を厳密に扱う乱雑位相近似理論 [85, 90]、有限振幅法を利用することで計算量・メモリ量を大幅に削減した線形応答計算 [50, 60]、2体密度まで拡張された乱雑位相近似理論 [86] などがあり、それぞれ成果をあげている。この中から、汎用コード、あるいは基盤ルーチンなどが公開されるものが近い将来現れると予想される。

また、さらに理論を拡張して、陽子・中性子混合を取り入れた密度汎関数理論とそれに基づくダイナミクスの解析によって、荷電移行反応や核・ニュートリノ反応などに対してさらに信頼度の高い計算が可能になる。このような理論の拡張においても国内の研究グループは指導的な役割を果たしており、近い将来において、不安定核におけるエキゾチックな励起モードの予言・解析、系統的な振る舞いから予想される核応答の特徴的な性質の解明などが期待される。また、実験では届かない領域の原子核に対しても定量的な予言を与えることができるため、応答関数に関する計算核データを整備し、元素合成や爆発天体シミュレーションへの微視的物理のインプットを与えることも重要な課題である。

2.8.3.3 高温高密度 QCD の相構造・状態方程式の確立へ

符号問題のないゼロ密度系では、すでによく研究されているスタaggered型クォーク作用の計算に加えて、ウィルソン型クォーク作用での有限温度領域の計算がすすめられようとしている。今後は、その2つのクォークの定式化による結果を比較しながら計算を進め、格子QCD計算の系統誤差の評価がより精密となり、高い精度の熱力学量 (状態方程式) や相転移温度の研究が期待される。

さらに、有限密度系の計算方法に関して、いろいろなアイデアが提案されている。低密度

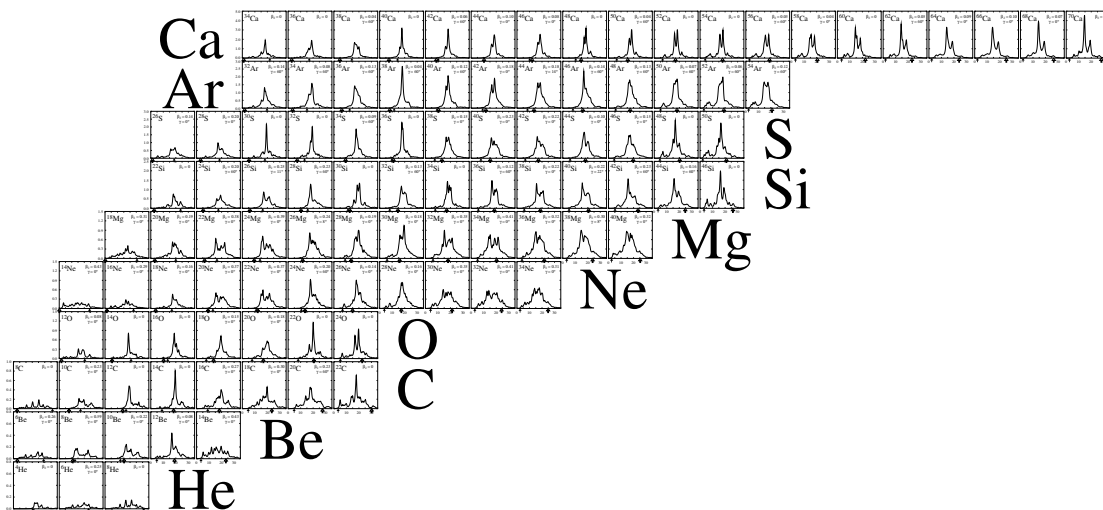


図 2.8.11 原子核の光応答に関する有限振幅法を用いた系統的な計算。エネルギー汎関数 SkM*を用いている。(文献 [89] より引用)

領域の計算では化学ポテンシャルによるテイラー展開の係数をゼロ密度で計算する方法が有効で、この領域は、計算機の性能の進歩に合わせて着実に研究が進むことが期待される。高密度領域の研究に関しても、符号問題を解決するための試みがなされ、近い将来、高密度での計算が可能になることを期待する。それによって高温高密度 QCD の相構造を明らかにし、中性子星・超新星超爆発など高密度天体現象の解明に必要な、高密度領域での状態方程式の確立につなげたい。

2.8.3.4 多次元シミュレーションによる爆発的天体現象

超新星爆発の研究は、2次元や3次元における数値シミュレーションが初期研究のメカニズム探索から、定量的な解明を目指す本格的な時代に突入しつつある。その理由は、まず第一に、球対称のもとで一般相対論的ニュートリノ輻射流体計算という第一原理計算が行われた結果、最新の原子核物理データのもとで、超新星爆発が起きないことが明白となったことが挙げられる。さらに、爆発の鍵となるニュートリノ加熱メカニズムは多次元的な流体不安定性と共に効果的に働くことが2次元（軸対称）の数値シミュレーションで示されている。また、球対称より2次元、2次元よりも3次元の方が爆発を起こしやすいという、研究成果もあり、定量的な議論ができる緻密な多次元数値シミュレーションを行うことが急務となっている。

現在までの計算は2次元においては、ニュートリノ輻射輸送を近似的に扱ったものであり、その範囲で、爆発を起こす数例が知られている。3次元においては、ニュートリノの扱いはさらに単純化されており、ようやく最初の本格計算の成果が出始めた所である。今後、5～10年の課題は、このニュートリノ輻射の扱いにおける近似を取り除いて、段階的に厳密計算へ近づけて行く事がもっとも重要な事となる。同時に、初期モデル（親星の質量など）・状態方程式・ニュートリノ反応などの違いによる相違を明らかにする系統的な爆発シミュレーション計算も、メカニズム探索を明確なものとするために必要不可欠である。

ニュートリノ輻射輸送は、超新星コアの中心に溜まったニュートリノが拡散現象としてじわじわとしみ出してやがて星の外層に達するまでの、ニュートリノ伝搬・放出・吸収・散乱を記述するものである。超新星の問題では、中心部は高温高密度で拡散近似が良く、外層では自由伝搬近似が良いが、爆発メカニズムの鍵を握るのはその中間領域である。コアバウンスで発生した衝撃波が伝搬途中で停滞しまうのだが、その領域では、どちらの近似も正しくない。そのため、いわゆるボルツマン方程式を解いて、伝搬と衝突による影響を一貫して扱う必要がある。

現在から数年先までに行われるのは、3次元での超新星計算であるが、ニュートリノ輻射輸送を近似的に扱う手法によるものである。流体計算は3次元であるが、ニュートリノ輻射輸送は、ray-by-ray 近似という半径方向の一次元計算を各方向独立に行う。この近似のもとでも計算資源は膨大なものとなるが、日本のグループは、京コンピュータの計算資源により解像度を最大限にとった超新星シミュレーションを行っていく予定である。その後、ニュートリノ輻射輸送を近似の無い扱い、ボルツマン方程式を直接解く方法、へ置き換えた計算を行っていく計画である [77, 78]。

こうした将来の大規模計算においても数値シミュレーションに組み込まれる核物理が重要な鍵を握っている。巨大計算は時として唯一つの数値シミュレーションしか行うことができない場合もあり、その時点でベストな核物理を組み込むことが肝要である。その意味で、将来に渡って可能となる原子核構造反応計算や多体理論計算により、高温高密度核物質の状態方程式、原子核の電子捕獲反応、ニュートリノ核反応などの一貫した核物理データを構築することが課題である。

2.8.4 5～10 年後の展望・さらに将来の展望

前節に引き続き、ここでは、日本の核物理の将来に関して、計算核物理 WG で議論された将来の課題について、前節で取り上げなかったけれども 5～10 年で進めるべき課題や、進めるべきであるが 10 年以上の長期的視野で取り組むべき課題などを、クォーク・グルーオン多体系、原子核、天体核物理の各分野において示す。

2.8.4.1 クォーク・グルーオン多体系

■ 格子 QCD によるハドロン構造の精密化

ハドロン原子核分野に関連して「ハドロン 1 粒子系」の物理として残された課題の一つは、格子 QCD による核子の静的な諸性質の再現である。現状では核子の質量を除いて格子 QCD 計算が実験値を再現できているとは言い難い。中間子系の研究において弱崩壊に関する遷移行列計算がすでに大きな成功を収めているのに対して、重粒子系において相当する弱崩壊の遷移行列、例えば中性子 β 崩壊に伴う軸性電荷 g_A において格子 QCD 計算が実験値を精密に再現するには至っていない。これは核子などの重粒子の計算が π 、 K 中間子など計算に比べてより高い統計精度を必要とするという技術的な問題ばかりでなく、重粒子が中間子よりもクォーク多体系の複合粒子として、その構造が複雑であることと密接に関係していると思われる。

特に現在深刻な問題として、現時点で核子の平均二乗半径に対して格子 QCD 計算が実験値の約 75% 程度しか再現できない、「核子の大きさの問題」が挙げられる。現象論的には所謂 π 中間子の雲の効果と直接関係していると考えられる。実際、核子を含むカイラル摂動論において、核子の平均二乗半径が π 中間子の質量が零となるカイラル極限で対数赤外発散することが知られている。つまりこの問題の解決にはカイラル対称性とその自発的破れが大きく関わっていると思われる。格子上での厳密なカイラル対称性を保持できる、オーバーラップ形式やドメインウォール形式のカイラルフェルミオンによる格子 QCD 計算が最も望ましいが、まず当面はより軽いクォーク質量 (π 中間子の質量で 200 MeV 以下) でより大きな空間サイズ (4 fm 以上) の格子 QCD 計算が必要不可欠である。

現在、いくつかの研究グループにおいてカイラルフェルミオンよりも計算コストがかからない、ウィルソン型によるそのような QCD ゲージ配位の生成が始まり、かなり近い将来、核子系の物理量においても、カイラル摂動論などとの整合性なども含め、より精密な実験値

との比較が可能となることが予測される。また今後は、ハドロン構造の包括的な理解のために、実験で観測できる物理量のみを格子 QCD 計算の研究対象とするに留まらず、カイラル摂動論を代表とした有効理論のアプローチ (QCD 和則や重いクォークの有効理論などを含む) において、これまで実験からしか決めることのできなかった有効理論内のパラメータなどの格子 QCD による精密決定など、より広範な格子 QCD 計算の活用が望まれる。そのためには、厳密なカイラル対称性を保持したカイラルフェルミオンでかつ、軽いクォーク u, d, s が全て物理的なクォーク質量上で扱った格子 QCD 計算が待たれるところである。

■ 格子 QCD による核子多体系への展開

2.8.3.1 節では格子 QCD 計算によって開かれる原子核物理の象徴的課題として、物理点における軽原子核の構成を挙げた。このような、ハドロン 1 粒子系の計算よりもはるかに計算資源を必要とするハドロン少数多体系の研究分野のさらに長期的展望を考えると、 ^4He よりも重い原子核の、格子 QCD による直接構成が挙げられる。そこで掲げられる目標は、クォーク・グルーオンの力学に基づく魔法数の導出である。ただし、そのような ^4He よりも重い原子核を直接扱おうとすれば、2.8.3.1 節で述べた空間体積依存性の検証のための困難に加えて、もう一つの大きな課題であるクォーク・ダイアグラムの数をどう扱うかを考えねばならない。格子 QCD ではクォーク場を用いて原子核の量子数を持つ生成・消滅演算子を組み、その縮約を取ったクォーク・ダイアグラムを考えるが、質量数が多くなるにつれて縮約の“場合の数”は急激に増大する。例えば炭素 ^{12}C の場合は u クォーク 18 個、 d クォーク 18 個から構成されるので、単純に考えればクォーク・ダイアグラムの数は $(18!)^2 \sim 4 \times 10^{31}$ という天文学的数字となる。この膨大な数のダイアグラムをどのようにして計算するかという問題が、QCD を用いて原子核を取り扱う場合の大きな困難である。この点に関してはアルゴリズム的に解決するためのアイデアが必要である^{*2}。更にその先の展望としては、実験的に生成困難な中性子過剰核などを格子 QCD で直接取り扱うことを目指したい。

■ 格子 QCD からのエキゾチックハドロン・原子核（ストレンジネスを含むもの）の探索

格子 QCD から通常核の構成に道が開かれた暁には、格子 QCD を用いて大きく進展が期待される研究分野として、ストレンジネスを含む原子核の研究が挙げられる。これまでは、実験の難しさから、ハイペロンを含む広義の核力の性質は明らかでなかったが、今後の格子

^{*2} 実際には様々な対称性を駆使して独立なクォーク・ダイアグラムの数を減らすことが可能であるが、困難の度合いは本質的には変わらない。

QCD 計算によって、そのスピン・フレーバ構造の全体像が明らかになると期待される。さらにこれらの成果から大きな波及効果が期待できるのが、ハイパー核の分野である。ラムダハイパー核についてはその結合エネルギーなどのデータが利用できるのも、現実的クォーク質量での格子 QCD 計算から求められたポテンシャルについて、(NN や ΛN 、 ΣN など) 二体散乱実験と比較するだけでなく、通常核に加えてハイパー核についても実験を再現できるかどうかを検証することができる。実験を再現することが確かめられれば、これらのハイペロンポテンシャルを用いることにより、エキゾチック原子核の存在の可能性やその質量、構造などについて、従来よりも信頼性の高い計算を行うことができるものと期待される。さらにまだ見つかっていない、(例えばストレンジネスを複数含んだ) エキゾチックな原子核の存在の可能性を従来よりも高い精度で調べることが可能となり、J-PARC で計画されているグザイハイパー核探索実験などをサポートしていくような研究が期待される。

また、格子 QCD 計算においても共鳴状態の研究は非常に難しいが、 $K - \pi$ 散乱をはじめとして、今後具体的な研究が進むと予想される。現在盛んに議論されている $\Lambda(1405)$ 状態とそれに関連するエキゾチックな状態の研究は、J-PARC での新たな実験による進展が期待され、そのような実験の進展を理論的に解釈するための手法として、格子 QCD による共鳴状態の研究は重要な研究テーマになっていると予想される。

■ 極限状態での QCD 物性

数値シミュレーションによる格子 QCD の研究は計算機のパフォーマンスによってできることが決まる。現実世界と同じクォーク質量をもつウィルソン型クォークによるゼロ温度の研究が、現在、筑波大学を中心とするグループによって行われている。その延長として、ウィルソン型クォークによる有限温度、現実のクォーク質量の研究も始まる予定である。重イオン衝突実験で興味がある低密度領域に限れば、温度を変えてシミュレーションを繰り返すことと、有限密度の効果を取り入れることを考慮して、必要な計算時間は現在行われているゼロ温度の研究の 100 倍程度で、近い将来、十分に実現可能な計算である。ウィルソン型とスタッガード型を比較しながら、今後も熱力学量や相転移温度の研究の精度が向上するはずである。また、有限温度でのハドロンスペクトルや輸送係数の研究についても、困難の源となっているものは格子間隔の粗さと統計誤差であるため、計算機のパフォーマンスの進歩によって改善されるはずである。クエンチ近似を取り除き、LHC での重イオン衝突実験の結果が出そろうまでに、ある程度の結果を出さなければならない。

さらに、質的な進歩が期待される研究は有限密度での QCD の研究である。標準的なモン

テカルロ法が有限密度では使えないため、いろいろな試行錯誤が必要である。以前は動的クォークの効果を取り入れた計算自体にコストがかかるためできなかったが、最近になって、有限密度の計算方法の開発にも時間をさけるようになった。計算機の性能の向上は、計算精度を高めるだけでなく、試行錯誤を要する方法の開発の速度をあげ、適用できる計算方法の幅も広げる。実際、今までの格子 QCD の研究の歴史を見ても、計算機の性能に合わせて新しい計算法が開発され、一昔前には考えられなかったような計算ができるようになってきている。

重イオン衝突実験が進行中の現在、格子 QCD の研究者に期待されていることは、実験結果をどう理解すべきか議論するときに必要な基礎的かつ正確な理論からの情報を提供することである。高温高密度 QCD の研究には長い研究の歴史があるが、ついに理論を実験で検証できるかもしれない時期にきている。

2.8.4.2 原子核

質量数の軽い原子核から重い領域までのそれぞれでの今後の研究の方向性を述べる。

■ 軽い核の核反応の第一原理計算

また、質量数の軽い原子核領域では、連続状態を含んだ核子多体系の記述の進展も期待される。軽い核に限られてはいるが、現実的核力から出発した波動関数が得られるようになった。それらの多くは 2 乗可積分関数から得られており、そのまま連続状態へ適用することは難しい。近年 2 乗可積分関数の散乱問題への適用が活発に行われている。それは比較的取扱いが容易で、束縛状態を解く計算コードが利用できるという大きな利点がある。そのような低エネルギー核反応理論の開発にも取り組む。これらの少数多体系の成果は、精密な波動関数を扱えるという利点があり、10 年後の研究計画として、精密核構造、反応理論を駆使した不安定核の予言、実験の困難な宇宙核物理学 (ニュートリノ反応、中性子捕獲等) への応用が期待される。

このような軽い核の第一原理精密計算が発展することで、より精度の高いエネルギー密度汎関数の構築にも大きな貢献が期待される。様々な環境 (外場) の下での密度とエネルギーの厳密計算は、実験データ以上に、エネルギー汎関数へ強い制約を与え、これによって汎関数の改良が大幅に進むと期待される。厳密計算を重い原子核にまで推し進めることは不可能であるが、間接的なアプローチとして大きな役割を果たすであろう。これによって、これまで不可能とされてきた「原子核の存在限界の確定」、特に安定線からはるかに離れた中性子ドリフプラインを確定することが期待される。これはまた、非対称核物質の精密計算にもつながり、

核物質の状態方程式や中性子星の構造の決定、爆発天体現象の解明などにも貢献する。

■ 核子以外の自由度および連続状態を考慮した軽い核の第一原理計算

強い斥力芯を持つような核力ポテンシャルを直接扱える少数系では、核子数を増やしていくことが考えられる。複雑な相互作用を用いた多体方程式の精度のよい解を得るには、あらわに相関した基底での変分計算が有効である。しかしながら基底関数の反対称化操作が粒子数の階乗に比例するため、核子数を増やすのは困難である。そこで反対称化操作をうまく処理する方法や、相関基底に対して効率的な有効相互作用の開発を行うことが必要となる。また、これまでの研究において、三核子以上の原子核の構成において、現状の2体力だけでは不十分であり、3体力が必要なことがわかっている。現実的核力は核子-核子散乱を再現するが、起源の違うポテンシャル模型（例えばクォーク模型ポテンシャル）を用いると、必要な3体力の強さは伝統的なポテンシャルと異なる。多体力の定量的な議論に向けて、様々なポテンシャル模型を用いて4体系以上の計算を行うことは興味深い。また Δ 粒子を含んだヒルベルト空間に拡張し、様々な角度から多体力の起源を調べることも必要である。このような研究の進展は、格子QCD計算からの新しい結果をよってより信頼性の増した、ハイペロン力の理解に基づいたハイパー核の研究と並行して進んでいくことが期待される。すなわち、ハイパー核では $\Lambda N - \Sigma N$ 結合のようなチャネル結合が重要であり、これが模型空間の選択によっては三体力的効果の起源となっていると考えられているが、これらのより定量的な理解が今後進むであろう。さらに結合チャネルを直接扱った少数多体問題をp-殻ハイパー核にまで適用できるような方法の確立が期待される。

■ クラスタ状態とシェル状態の統一的理解および核反応理論の融合

現状分析で述べたように、原子核物理においてクラスターの構造は、現象論的には重要な概念であるが、現実的核力を用いたクラスターの構造の研究には、方法論の開拓が重要である。同時に、ひとたび相互作用が設定された後でも、ハミルトニアン行列要素の計算に膨大な数値計算が必要となる。また中性子過剰核においては、中性子数の変化とともに原子核がどのようなクラスター・シェル競合を見せるのかを明らかにすることが物理の課題として重要であり、さらに、原子核の基底状態ではシェル模型的成分が優勢な場合でも、励起状態にはクラスター構造が現れる可能性もあり、統一的な模型の構築が求められている。

このような核構造情報を精密に核反応データから引き出す、または直接測定可能な物理量を予言するために、微視的核反応模型の改良が必要となる。現在進められている現実的核力に基づいた微視的核反応模型の構築はすでに多くの成果を挙げているが、これまでの核反応理

論研究として掲げてきた“精密核物理”の立場からすればまだ十分とは言えない。そのため、現在進められている現実的核力に基づいた微視的核反応模型のさらなる改良・精密化が第一にすべき研究計画である。例えば、重心の扱いの問題のためにこれまで困難であった密度汎関数計算で得られた原子核の状態を核反応理論と融合させた新しい理論・計算手法の開発が考えられる。特に量子性が際立つ低エネルギーにおける精密な構造計算に基づく核反応理論の開発が重要である。

核反応物理学として期待されることは、第一に不安定核特有の反応現象は存在するのか？という点である。不安定核ならではの反応現象としてすでに弱束縛系による分解反応が分かっているが、今後他にどのような反応現象が観測、または、予言されるかが期待される。第二に、エネルギー依存性である。核反応は閾値を超えたエネルギー領域における現象であるが、そのエネルギー領域は核構造と違い制限がない。すでに少数粒子系の陽子-重水素弾性散乱ではエネルギー依存性と三体力の関係が問題になりつつある。この問題は重イオン核反応でも起きると予想され、三体力の本質的理解と共に新たな核反応物理の発展に繋がると期待される。

■ 閉殻を仮定しない殻模型の適用領域の拡張

続いて、閉殻を仮定しない殻模型による第一原理計算に焦点を絞って今後 5~10 年にわたる将来について概観する。現在、p 殻核までは、安定核において基底状態や低励起状態の束縛エネルギー、半径、電磁気モーメント、遷移確率などの物理量に関して計算が行われている。ただし、p 殻核でも重い方の原子核では、さらに模型空間を広げた計算を行い、より収束した解を得る必要がある。

今後、安定核近傍では、sd 殻核のようにより重い原子核へと殻模型による第一原理計算が適用されていくものと思われる。また、現状では、安定核近傍の原子核までしか適用されていないが、今後、中性子過剰核や陽子過剰核のような不安定核での計算も期待される。さらに、励起状態にみられるクラスター的な状態に関しても ^{12}C の Hoyle 状態だけでなく ^{16}O の励起状態など、殻模型などによる第一原理計算による理解が必要とされている。

このように、さらに重く、安定線から離れた原子核へ、また、励起状態にみられるクラスター的なエキゾチックな状態の解明へと第一原理計算の適用領域が拡大していくことが考えられる。このような第一原理によるアプローチは、従来の模型に対する裏付けを与えるだけでなく、新たな模型の提唱にも貢献すると期待される今後の課題としては、計算機性能の向上だけでなく、いかに殻模型による第一原理手法で不安定核にみられるハロー構造や励起状

態にみられるクラスター構造を効果的に記述できるのかという、手法自体のブレイクスルーが不可欠である。

■ 芯を仮定した殻模型の精密化と適用領域の拡張

一方、旧来型の芯を仮定した原子核殻模型計算の将来について述べると、取り扱い可能な模型空間の拡大による重い原子核への適用領域の拡張と、有効相互作用の精密化が期待される。

現象論的に得られた、あるいは格子 QCD 計算から得られた 3 核子間力を用いた有効相互作用の構築と検証が進められると期待できる。3 核子間力を陽に取り入れることや、2 主殻以上にまたがる近似なしの有効相互作用理論の構築は、現在やむをえずおこなっている現象論的補正をとりのぞくために必要不可欠なステップである。これらをクリアすることで、より第一原理的なアプローチに近づくことができる。

また、計算機能力の向上と、外挿法を含めた殻模型計算の方法論の進展によって殻模型計算の適用領域を広げていくであろう。二重ベータ崩壊の研究や放射性廃棄物への応用が期待される質量数 100 前後の核種や、理論計算がすすんでいない元素合成 r 過程上の第 3 ピークへいたる核種のより精密な殻模型計算も期待される。特に、2 重ベータ崩壊の核行列要素の計算は、乱雑位相近似、相互作用するボゾン模型、殻模型計算の 3 つの手法によって得られた値が提示されているが、一致せず議論的であった。特に殻模型計算では、模型空間の小ささが問題とされるが、スピン軌道パートナーも含んだより精密な計算に到達することが期待でき、定量的な議論が可能となるであろう。

■ 核分裂等の大振幅集団運動の微視的記述に向けた密度汎関数理論の発展

多粒子が関与する大振幅集団の運動は、原子核理論における最大の難問の一つである。量子性、非調和性、非断熱性など、多くの理論的困難を伴う低エネルギー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、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 年から 10 年くらいで大きなブレイクスルーが期待される分野である。

核分裂の巨視的模型には、いくつかの重要なパラメータがあり、これらの微視的な決定には大規模計算が必要とされる。分裂経路の確定、ポテンシャルエネルギー、集団質量パラ

メータ、散逸係数などを時間依存密度汎関数理論を用いて決定できる理論の開発が国内で進められており [87, 88]、この応用によって自発核分裂のダイナミクスに対する理解が将来格段に進歩する可能性が大いにある。また、同時に、実時間計算のコード開発も進められており [83, 84]、誘起核分裂現象を直接的にシミュレーションするツールも整備されつつある。また、米国 SciDAC プロジェクト (UNEDF)[4] においても、計算機科学の研究者と核理論研究者との大規模な協力によって、大規模並列計算用の実時間コードが最近開発され [91]、この分野は世界的な競争の中、大きく発展する可能性が高い。

核分裂は原子核集団運動理論の長年の目標であり、散逸、チャネル分岐、多体量子トンネル現象など困難かつ興味深い課題が複雑に絡み合う現象である。大規模計算と新たな理論・アルゴリズム開発を通して、これらの問題を克服できるチャンスが次第に現実味を帯びてきている分野である。

2.8.4.3 天体核物理

■ 核力から高密度天体・高エネルギー爆発現象へ

先に述べたように、爆発的天体現象の解明においては、極限状況における核物質や核構造・反応の理論的な予測がますます重要なものとなる。これらの極限原子核の物理は、中性子星・元素合成過程の解明においても重要な役割を担っており、大規模計算による系統的な核データ整備が課題である。実験的には、核図表の広い範囲での、中性子過剰核の半径・非圧縮率の系統的な測定や不安定核の弱い相互作用探求（ニュートリノ・電子捕獲反応）などが行われれば、理論解析とともに天体核物理に大きく貢献するであろう。

QCD 計算を基に核力、特に核子三体力、ハイペロン間の相互作用などが明らかになれば、それを基にバリオン多体系理論計算を行い、核物質状態方程式を確立することが中性子星・超新星爆発などの高密度天体現象の理解へ大きく寄与する道筋となる。また有限密度格子 QCD が進展し、クォーク物質への相転移線が明らかになれば、ブラックホールや中性子星合体を含む高密度天体の解明が進むであろう。数値一般相対論計算の進展により、ニュートリノ輻射を組み込んだ数値シミュレーションが行われるようになり、中性子星合体や星の重力崩壊によるブラックホール形成、ガンマ線バーストの起源などの解明が期待される。こうした高エネルギー天体現象においても核物理が果たす役割は同様に重要である。

最終的な爆発メカニズムの確定には、高温高密度での核データを可能な限り信頼できるものにすること、そして、それらをシミュレーションに組み込み 3 次元ニュートリノ輻射流体計算を行なうことが必要である。これらの両者が今後 10 年、20 年の課題となる。近年の計

算技術の発展により、多次元での系統計算や3次元での輻射流体計算が可能になると予測する。その際には、インプットとなる核物質状態方程式や核図表の広い範囲におけるニュートリノ核反応のデータを確立しておくことが重要である。例えば、中性子過剰核の半径・非圧縮率の系統的な測定や不安定核のニュートリノ電子捕獲反応などを通じて、原子核ハドロン分野による実験と理論解析の最先端成果をつぎ込むことが将来的な課題となる。また、核物質状態方程式を確立するための三体力の解明や核子多体理論計算の発展、クォーク物質への相転移などの物理も高密度天体の理解に必要な不可欠である。

今から10年スケール以降の間には天体観測の大型計画（超新星ニュートリノ Hyper-Kamiokande、重力波 LCGT、超大型望遠鏡 TMT など）も進行しており、観測による天体核物理への知見にも大きな進展が期待される。すなわち、今から10～20年後には観測データとの比較を通じ、核物理への制限が現実のものとなる時代がやってくるであろう。超新星が爆発するかどうかの議論を越えて、爆発エネルギーの定量的理解とともに高密度状態方程式・ニュートリノ核反応・不安定核での魔法数変化等、核物理の大きな課題を解くための手段としても爆発天体現象の研究が進むであろう。中性子星の質量や半径の系統的測定や冷却過程の観測は、高密度物質やエキゾチック相への制限となり、中性子星合体による重力波放出は、高密度ハドロン物質（あるいはクォーク物質）の状態方程式の情報を引き出す重要な役割を果たしているであろう。このように原子核・核物質の性質と観測データをつなぐ上で、核多体問題と爆発現象シミュレーションの両面において計算核物理の果たす役割は本質的である。

■ 核データから爆発的現象における重元素起源へ

鉄よりも重い元素のなかで、金・プラチナ・ウランなどの一連の重元素は高速中性子捕獲反応という、爆発的要素合成で作られることが判っている。しかし現在でも、rプロセス元素合成がどこで行われているのかは、未解決の問題である。非常に古い星（金属超欠乏星）の観測が進んでおり、そのデータからは超新星爆発が有力な候補とされているが、超新星爆発のモデル計算では、rプロセス元素合成に必要な中性子過剰な物質放出は見つからず、むしろ陽子過剰な状況が発見されている。そのため、中性子星合体やガンマ線バーストなどのよりエキゾチックな環境が候補として研究されている。超新星爆発については、数値シミュレーションにおいて爆発過程が明らかにならなければ、重元素合成についての詳細が明確になることはなく、将来の大規模計算による爆発メカニズム解明が待たれる。この時、rプロセスに至る物質放出の割合は、全体のなかでも非常に小さいと考えられるので、多次元計算

において高い空間解像度が必要とされる。また、 r プロセス元素がいつどこで生成されたか、宇宙・銀河の進化における履歴を明らかにするには、親星の質量や金属量の関数として r プロセス元素合成量を求める必要があり、爆発的天体現象の系統的な数値シミュレーションが不可欠である。このため、上述の超新星 3 次元計算よりも更に先の計算機資源が想定される。

中性子星合体による物質放出やガンマ線バーストによるジェット放出などのシナリオにおいて、 r プロセスに繋がる物質放出を追うには、一般相対論でのニュートリノ輻射流体計算に状態方程式やニュートリノ反応を組み込んでメカニズムを解明した上で、空間的な解像度が高いことが要求され、将来の計算機資源による大規模な数値シミュレーションが必要とされる。どのシナリオにおいても、高密度や中性子過剰といった極限状況を経て、 r プロセスに繋がることは間違いなく、ここでも理論計算による核物理データの系統的な整備が求められる。従って、様々な核物理計算手法の進展は、いずれ明らかになる r プロセス元素合成天体環境の解明を、元素組成比の観測データに繋ぐ上で不可欠なものである。密度汎関数法などの核図表上の核種を広く扱える手法を用いて、質量・ベータ崩壊・中性子捕獲・光分解などの一貫した核データを計算し、元素合成計算の基礎データとして与えることが将来にわたる課題である。核データの不定性が小さくなれば、元素合成が行われる場所を特定する際に大きく貢献することとなる。天体現象のダイナミクス解明と、極限状態での原子核構造反応の系統的解明とを、計算科学的なアプローチにより密接に連携させて取り組んで行く事が、元素の起源の解明に大きな役割を果たすことであろう。

2.8.5 今後の研究に必要な計算機資源の見積り

ここでは、他の WG のように将来の研究課題のために必要な予算を示す代わりに、まず現在の原子核物理の研究で使われている大型計算機について、性能およびユーザー数についてリストアップし、前節で掲げた将来の研究計画について、既存の大型計算機が更新^{*3}されたものを使うと想定して、必要とされる計算機の性能を示す。また、高性能計算機を用いた現在の計算核物理が直面しつつある問題と、それに関連した jicfus の活動について紹介する。

^{*3} ムーアの法則を信じれば、向こう 10 年でコンピューターの性能向上も 100 倍程度見込まれる。

2.8.5.1 共同利用されている大型計算機の基本性能および利用者数

原子核理論の研究で使われている、共同利用されている大型計算機について、その基本性能および利用者数を以下にまとめる。^{*4} なお、利用者数に関して、2010 年度の NTJ-L 名簿をもとに本ワーキンググループにおいて各分野の研究者数を大まかに数えたところでは、クォークグルーオン多体系分野約 200 人、核子多体系約 200 人、天体核物理約 30 人である。(一人の研究者が複数の分野にわたる研究をしている場合には、重複して数えた。)

大型計算機	基本性能 (Flops) ^{*5}	利用 者数	
京速	11.28 P	36	ユーザ数はまだ公開されていないので、 分野 5 の課題 1-4 のメンバの数を示す。 正確には共同利用ではないが、必要な手続きを踏めば、 学外からの利用が可能。
TSUBAME2 (東工大)	2.4 P	5	
HA-PACS (筑波大)	802 T		
KEK	684 T	69	2012 年 2 月より運用開始。 平成 21 年度採択課題報告書より。 http://ohgata-s.kek.jp/H21/index.html 19 人は、報告書に掲載されている研究者数および 本 WG で把握できた研究者数を合計したもの。 (t2k(東京)では、必ずしも、すべての利用者の成果が 報告書に掲載されているわけではないので、 実際の人数はこれより多い可能性がある)
t2k(東大)	140 T	19	平成 23 年度学際共同利用ユーザ数。
t2k(筑波)	95 T	16	
PACS-CS (筑波)	14.3 T	16	
基研	90.3 T	11	(年間 1000 時間以上使用しているユーザ数)
RCNP (阪大)	768 G	107	(2010 年度に (素粒子原子核宇宙を含む広い意味での) 原子核理論分野でユーザアカウントを持っている人の数)
九大	25.3 T	10	素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理分野の利用者数

2.8.5.2 必要とされる計算機の性能

■ 今後の格子 QCD 計算に必要な計算機の性能

^{*4} 利用者数は、各計算機の管理、運営に関わっておられる研究者の方々に協力して頂き、回答として得られたものをそのまま掲載している。従って、公開されている報告書 (必ずしもすべての利用者が報告書を提出しているわけではない) から人数を数えたものや、ある年度の登録ユーザ数を数えたもの、年間のヘビーユーザ数を数えたものなど、掲載した数字は数え方の基準が統一されてるわけではないので、注意してほしい。

^{*5} P:peta(10^{15}), T:tera(10^{12}), G:giga(10^9)

格子 QCD 計算に必要な計算性能は、格子間隔（どれだけ連続理論に近い）と格子点の数（どれだけ物理的な空間サイズが大きい）とクォーク質量の大きさの 3 つの要素で大雑把には決まる。ここでクォーク質量に関しては、前述のようにすでに物理的なクォーク質量上（物理点）でのシミュレーションが現在までに可能となった。そこで物理点での計算機性能の見積もりを行なうために、これまで PACS-CS グループによって行なわれてきたウィルゾン型のフェルミオンを用いた計算 [2] をベースに、今後必要となる格子 QCD 計算の規模を大まかに見積もることとする。

まず、現状の PACS-CS グループで行なわれてきた計算の詳細は、格子点の数が $32^3 \times 64$ 、格子間隔が $a = 0.0907 \pm 0.0013$ fm の計算が今までに行なわれてきた。これは空間サイズが一辺が約 2.9 fm の箱での計算に相当する。今後 5-10 年の間に特に推進すべき格子 QCD の課題として挙げた、バリオン間相互作用や軽い原子核の直接構成を研究する場合、現状の空間サイズでは十分に大きな物理的な空間サイズとは言い難い。安定な原子核の半径は A をその質量数とすると大まかには $1.3 \times A^{1/3}$ fm 程度であることが知られている。例えば、宇宙初期における元素合成を考える上で重要な事実である、質量数 $A = 8$ の安定な核種が存在しないことを格子 QCD を使って検証するためには周期境界条件も考慮して、だいたい 2.6 fm の 4 倍程度の大きさ、つまり一辺 10 fm 程度以上の箱を用意すればよいと見積もられる。

現在の PACS-CS グループの計算と同じ程度の格子間隔を維持するとして将来期待される計算の規模は、格子間隔 $a \approx 0.1$ fm で格子サイズ $128^3 \times 128$ 程度となる。さらに、2.8.3.1 節で取り上げたような軽原子核の直接構成では、扱うクォークの数に応じたクォーク伝搬の縮約の数を考慮する必要がある。相対的に計算量の軽い、同じく 2.8.3.1 節で述べたポテンシャルを求める方法の場合と比較しながら評価してみると、ポテンシャルの場合には、全空間体積の畳み込み積分に高速フーリエ変換を利用して計算量を抑えることができる。いっぽう軽原子核の直接構成では、 ${}^4\text{He}$ であれば縮約の数は単純に数えれば $6! \times 6! = 518400$ であるが、実際には対称性を利用して共通部分をくり出すことができ、1107 個で済む [26]。これらの事情を考慮すると、 ${}^4\text{He}$ の直接構成ではポテンシャルの方法の計算量の約 2 – 3 倍の計算量を要すると見積もられる。これらの計算量が、現在利用可能な計算機で行われている計算の計算量から単純に格子点の数でスケールできるとすれば、その約 $100 - 200(\times 2 - 3)$ 倍規模の計算資源が必要となることになる。即ち、現在の計算規模を単純に外挿すると、 $5 \text{ TFlops} \times 700 \text{ hours} \times 128 (\times 2 - 3) \Rightarrow \sim 10 \text{ PFlops} \times 400 \text{ hours} (\times 2 - 3)$ となる。

さらに、同じ規模（物理点で同じ空間サイズ）の計算をカイラル対称性を保持したオーバーラップ形式などのカイラルフェルミオンの定式化を用いた計算に移行していくとすると、ウィルソン型のフェルミオンの計算コストに対しておおよそ10倍程度に増えるは見込まれる。

有限温度系の計算では、時間方向に周期的境界条件を課した長さが温度の逆数になるので、時間方向の格子数を変化させることによって温度を変化させる。同じ格子間隔、同じクォーク質量、同じ空間サイズのゼロ温度シミュレーションと比べると、格子数が少ないため、温度1点あたりの計算コストは少なくなるが、相転移点付近では統計数が多く必要になるので、温度によってはゼロ温度よりコストがかかる場合もある。さらに、低密度領域の状態方程式をテイラー展開法で計算する場合、テイラー展開の係数の計算コストは配位の生成と同じ程度かそれ以上である。ゼロ温度の研究がすでに完了しているパラメーターで計算を始めて物理量の温度依存性を調べる場合、有限温度ゼロ密度、低密度領域と研究を進めるためには、ゼロ温度の100倍程度の計算量が必要となる。

■ クラスタを含む軽い原子核の第一原理計算

クラスタを含む原子核の基底状態および励起状態の構造計算には、これまでローカルガウス基底を用いた分子動力学的手法が発達してきた。最近基研のSR16000を用いた ^{28}Si の 7α のガスの(Hoyle的)状態の計算では、1200次元の基底から作られるハミルトニアンの行列要素の計算(パリティ・角運動量射影を含む)には約30TFlopsで12時間程度を要している。しかし、これはBrinkモデルと呼ばれる純粋なクラスタモデルであり、厳密な意味ではシェル模型的な1粒子状態との結合が評価されていない。こうした α 粒子の崩れの効果を評価するためには、それぞれの核子の自由度を独立に扱う必要があり、ハミルトニアン行列要素の評価が約 $4^4 = 256$ 倍遅くなる。また、こうした自由度の増加によりハミルトニアン固有値を収束させるために必要となる基底関数の次元数も20倍程度増加し、このために400倍程度の計算時間が必要となる。この両方の効果を考慮すると、 ^{28}Si のシェル模型的状态・クラスタ的状态の競合、およびガスのクラスタ状態の評価には10PFlopsを用いても20日程度の膨大な計算が必要となる。しかもここまでは、非常に単純な現象論的2核子間相互作用を計算に用いた場合の見積もりである。計算に用いる核力を生の核力から出発したもの、例えばUCOMなどを用いた場合、さらに10倍程度の計算が必要であり、3体力効果の評価まで見積もると、優にエクサの領域の課題となる。

■ 原子核殻模型計算

殻模型計算による構造計算は、定義された模型空間における全ての配位を陽に取り扱った配位混合による計算をおこなうことにより、全ての相関を取り込んだ計算をおこなう。前述の通り、旧来型の直接対角化法は指数関数的な配位の増加という困難があるため、ここでは、計算方法はモンテカルロ殻模型 (MCSM) 法を想定する。この手法では、波動関数を角運動量射影した変形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もとづいて決定する。計算量は、模型空間の一粒子状態数 (N_{sp}) と張られるスレーター行列式数 (N_b) の関数として、 $O(N_{sp}^{3-4} N_b^2)$ と見積もることができる。閉殻を仮定しない殻模型計算の場合、 N_{sp} は主殻数の 2 乗に比例する。 N_b は十分な精度が得られるまで増やす必要があり、求めるべき波動関数の性質に依存するため、理論的な見積もりは難しいが、経験的には質量数を A として、 $A^{1.5-2.5}$ 程度の比較的緩やかな傾向を示している。トータルで A^{3-5} の依存性を示し、直接対角化法における A^{18-20} に比較して緩やかであり、今後の発展が期待できる [5, 92]。

これらの傾向を外挿すると、Exa-scale 計算機を用いることによって、模型空間の一粒子軌道は調和振動子の主殻にして、6 主殻から 8 主殻をとることができると期待でき、粒子数 30 程度原子核の第一原理計算が可能となると期待できる。

■ 密度汎関数理論に基づく核分裂の微視的記述における計算量見積り

+ 実時間・実空間 TDDFT シミュレーション計算

時間依存密度汎関数理論を用いた、誘起核分裂を対象にしたシミュレーションを想定する。重い原子核において重要な核子超流動性を扱う対密度を入れた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。必要とされるサイズは、空間格子点、準粒子数、時間ステップ数がそれぞれ 10^5 程度と考えられる。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り、現行の計算 [84, 90] からスケールすると、約 10 TFLOPS*year に相当すると予想される。さらに将来的には、これに確率的分岐の効果を導入した計算を目指すとして、1 ~ 10 PFLOPS*year の演算量になると考えられる。現時点での問題は、計算が並列数に対して理想的な（線形の）スケールを示さないことであり、 10^3 程度の並列で性能が頭打ちになることである。この点について今後の改善が必要とされる。

+ 核分裂模型パラメータの微視的計算

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。拘束条件付平均場 (CHFB) と局所準粒子乱雑位

相近似 (LQRPA)[88] のアプローチを採用して、核分裂の記述に必要とされる変形 5 次元空間上で LQRPA 方程式を解き、これらのパラメータを微視的に決定する。核変形 5 次元空間中の 10^3 点で CHFB 計算を実行し、その上で LQRPA 計算を実行。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 PFLOPS*hour 程度が必要。したがって、全体でおよそ 100 TFLOPS*year の演算量と考えられる。空間点の数を増やしてこれをさらに精密化した計算、変形空間の次元数を増やす計算等は、さらに将来の課題となるであろう。

■ 爆発的天体現象

超新星爆発の解明には、流体力学とニュートリノ輻射輸送を組み合わせる解く枠組みに、詳細の原子核物理データ（状態方程式・ニュートリノ反応率・電子捕獲反応など）を組み込んだ数値シミュレーションを行うことが必須である。流体力学の計算手法は 3 次元であつても既に発展してきているので、今後必要になるのは、核物理・ニュートリノ輻射輸送の記述のレベルを上げつつ、空間 2 次元（軸対称）・3 次元において、爆発メカニズムの探索を系統的に行うことである。

先に述べた様に、計算の中では、ニュートリノ輻射輸送の計算ロードが大きく、メモリ・計算速度共に大きな計算資源を必要とする。近似的なニュートリノ輸送 (ray-by-ray 近似) であっても、3 次元流体と組み合わせる行うには、京コンピュータ・クラスのスーパーコンピュータの計算資源を要する。特に、爆発が成功するかどうかは、バウンス後の超新星コアの時間発展を長く追い衝撃波が復活するかどうかを見定めなければいけない。さらに、親星・モデル・状態方程式・ニュートリノ反応率の相違による爆発への影響を定量的に明らかにして、爆発メカニズムの理解を確固たるものとするには、多数のモデルを系統的に実行することが不可欠である。

ニュートリノ輻射輸送を厳密に迫る計算手法による多次元計算では、空間次元の他、ニュートリノエネルギー 1 次元、ニュートリノ角度 2 次元の位相空間を記述するため、2 次元（軸対称）計算において、やや粗い解像度であってもメモリ 1TB を要する大規模疎行列を解くため、すでに莫大な計算量となる。このため、京コンピュータをもってしても、ニュートリノ輻射輸送の厳密計算による爆発計算は、3 次元計算による部分的な解析にとどまる程度で、2 次元の長時間発展が可能になる範囲と予想される。3 次元ニュートリノ輻射流体計算による長時間発展を行うには、次世代スーパーコンピュータで想定される Exa-scale のスペックを越えた計算資源が必要となる。

■ 天体核物理

+ r プロセス元素合成の詳細なダイナミクスの解明

r プロセス元素合成の詳細なダイナミクスの解明には、上述の超新星爆発メカニズムの数値シミュレーションによる解明の他、連星中性子星合体・ガンマ線バーストなど様々な爆発的天体現象におけるダイナミクスを総合的に解明することが必要である。連星中性子星合体・ガンマ線バーストについては、数値相対論による流体計算にニュートリノ輻射輸送を組み込んだ計算を行うため、超新星爆発計算と同程度以上の計算資源が必要である。爆発天体現象における元素合成を扱うためには、空間領域を広げて扱うこと、空間解像度を上げる事、時間発展を長く追う事が必要となる。このため、通常の超新星計算に比べて例えば100倍程度の計算コスト増加が見込まれる。r プロセスに繋がる物質放出を解明することは理論計算による核データ整備と共に長期的な課題である。

2.8.5.3 高性能計算機を利用した計算核物理の現状と今後の研究体制の整備・構築について

2005 年まで、CPU はシングルコアの性能を高める方向で進化してきており、これはプログラムがそのままだとハードウェアの進化によって「待っていれば」パフォーマンスの向上が得られてきた。しかしながら、動作周波数の向上は 3GHz 前後でとまり、マルチコア化へと向かうことになる。PC クラスターの流行、GPGPU の登場もあり、計算物理のアプリケーションも並列効率を意識して構築することが当然の状況となっている。ハイエンド領域においては京コンピュータでは 8 万 8 千 CPU、70 万コアにも達し、この性能をひきだすためには、さらなる並列度の向上が求められる。大規模並列にむけてスムーズにアプリケーションを開発するには、通常、個人用 PC、研究室用 PC クラスター、各地の計算機センターのスーパーコンピュータ、という階層をたどっていくことになるため、各計算機センターが今後ますます重要な位置を占めると考える。また、言語環境においては、High Performance Fortran のような並列計算用高級言語の開発もなされているが、普及にいたっておらず、2012 年現在においても 1992 年に策定された MPI(Message Passing Interface) によるライブラリを用いたプログラム開発や、MPI に OpenMP を組み合わせたハイブリッド並列が主流であり、並列化にともなう通信、ロックなどの機能の実現はユーザー側にまかされている。また、メモリーから CPU へのデータ転送能力は、演算性能の向上に比して貧弱となりつつあり、それに配慮したプログラミングが必須となりつつある。これらの要因により、最新の超並列計算機を有効に使いこなすアプリケーションの構築は非常に複雑になり、多大な時間と

労力を要し、原子核物理学研究者各個人の自助努力の限界を超えつつある。これらの問題を解決し、計算物理学を軸とした素粒子・原子核・宇宙分野の連携によって新しい研究領域を切り開くため、2008 年度から新学術領域研究「素核宇宙融合による計算科学に基づいた重層的物質構造の解明」が始まり、2009 年 2 月に計算基礎科学連携拠点が立ち上げられ、この連携拠点を運営母体として 2011 年度から HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」(以下「HPCI 分野 5」)が開始されている。

HPCI 分野 5 の主な活動は、「京」コンピュータを用いるような研究活動の振興と、研究支援体制の構築である。研究支援体制にはユーザー支援やデータグリッド構築が含まれており、この分野における人材育成の一端をになっている。これらの活動を通して素粒子・原子核・宇宙の分野横断や計算機科学との連携をはかっている。しかしながら、たとえば HPCI 戦略プログラムは 5 年間のプロジェクトであり、多数の参加研究者は期限付き雇用となっている。計算科学による基礎科学研究はまだ新しい分野であり、研究者のキャリアパスは確立していない。この分野の継続的な振興と優秀な人材の確保のためには、キャリアパスの確保が重要な課題であろう。

2.8.6 まとめ

本稿では計算核物理における現在までの成果について WG メンバー等の業績を中心に紹介し、今後の課題について展望した。それぞれの章で述べたように、計算核物理はそれぞれの階層における基本的な相互作用・微視的入力から出発し、量子論的多体問題・大規模非線形多体問題を解き明かすことにより現象を理解する段階の課題が中心となっている。このような課題の研究が進むことにより、クォーク・グルーオン、ハドロン、有限核子多体系、核物質、コンパクト天体現象という核物理が対象とする階層の連結の理解が現実的なものとなりつつあるといえるだろう。一方で有限密度格子 QCD における符号問題や(生成された、あるいは生の)多体核力等、原理的、あるいは概念的な飛躍が求められている課題も残っている。それぞれの階層での研究が進むにつれて、新たに飛躍を必要とする課題も現れると考えられる。計算機の進展と研究者のたゆまぬ努力により、着実な研究の進展が期待できるとともに、大きな発展がある可能性もあるという、充実した研究ステージにあると判断できる。

こうした計算核物理、より広くは大きな計算機を用いた物質科学を推し進めていく上では、新たな計算機の建設などのハードの進展が欠かせない。これは、物質科学の理解の上で、一般には「詳細」と考えられる点が背景となる理論を識別する上で重要であり、かつ大きな飛

躍を生み出すための突破点となるためであり、定量的に信頼できる計算結果を出すためには精密な計算が欠かせないためである。一方で研究者組織などのソフト面での持続的発展は、むしろハード面以上に重要である。計算機科学は多くの若手研究者により支えられており、こうした研究者の多くはプロジェクトに付随する任期付の研究職についている。プロジェクトの継続・更新、あるいは各大学・研究所における計算科学研究者ポストの確保がなければ、優秀な研究者を保持することは困難であり、ひいては計算科学分野の延びの鈍化・より発展した計算機開発への動機の減少、そして国力の衰退につながりうる。計算核物理 WG としては、個別課題の研究推進の重要性とともに、新計算機開発・計算科学の諸分野の研究者の連携・HPCI に代表される研究者組織の継続的発展も重要な側面であることをアピールしたい。

参考文献

- [1] 革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ戦略プログラム分野 5 「物質と宇宙の起源と構造」 [<http://www.jicfus.jp/field5/jp/>]; 計算基礎科学連携拠点 (Joint Institute for Computational Fundamental Science) [<http://www.jicfus.jp/jp/>].
- [2] S. Aoki, *et al.* [PACS-CS Collaboration], Phys. Rev. D **79**, 034503 (2009) [arXiv:0807.1661 [hep-lat]].
- [3] N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. **99**, 022001 (2007) [arXiv:nucl-th/0611096]; 「原子核の中にある“強い力”の起源を解明」プレスリリース, 東京大学 大学院理学系研究科・理学部 (2007) [<http://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2007/10.html>].
- [4] SciDAC-2 UNEDF project [<http://www.unedf.org/>].
- [5] T. Abe, *et al.*, AIP Conf. Proc. **1355** (2011) 173 [arXiv:1107.1784 [nucl-th]].
- [6] “CERN completes transition to lead-ion running at the LHC”, Press Release, Cern (2010), [<http://press.web.cern.ch/press/pressreleases/releases2010/PR21.10E.html>].
- [7] A. Ohnishi, arXiv:1112.3210 [nucl-th].
- [8] Y. Suwa, *et al.*, Publ. Astron. Soc. Jap. **62**, L49 (2010) [arXiv:0912.1157 [astro-ph.HE]].
- [9] “Neutron star”, Wikipedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Neutron_star].

- [10] Y. Kuramashi *et al.* [PACS-CS Collaboration], PoS **LAT2006**, 029 (2006) [arXiv:hep-lat/0610063].
- [11] H. Fukaya, *et al.* [JLQCD collaboration], Phys. Rev. Lett. **104**, 122002 (2010) [Erratum-ibid. **105**, 159901 (2010)] [arXiv:0911.5555 [hep-lat]].
- [12] C. Allton *et al.* [RBC-UKQCD Collaboration], Phys. Rev. D **78**, 114509 (2008) [arXiv:0804.0473 [hep-lat]].
- [13] Y. Aoki *et al.* [RBC Collaboration and UKQCD Collaboration], Phys. Rev. D **83**, 074508 (2011) [arXiv:1011.0892 [hep-lat]].
- [14] N. Ukita [PACS-CS Collaboration], arXiv:1111.6380 [hep-lat]; S.Aoki *et al.* [PACS-CS Collaboration], Phys. Rev. D **81**, 074503(2010).
- [15] Y. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D **84**, 014503 (2011) [arXiv:1012.4178 [hep-lat]].
- [16] D. J. Antonio *et al.* [RBC Collaboration and UKQCD Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 032001 (2008) [arXiv:hep-ph/0702042].
- [17] P. A. Boyle *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 141601 (2008) [arXiv:0710.5136 [hep-lat]].
- [18] C. Albertus *et al.*, Phys. Rev. D **82**, 014505 (2010) [arXiv:1001.2023 [hep-lat]].
- [19] Y. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D **82**, 014501 (2010) [arXiv:1003.3387 [hep-lat]].
- [20] T. Yamazaki *et al.*, Phys. Rev. D **79**, 114505 (2009) [arXiv:0904.2039 [hep-lat]].
- [21] T. Yamazaki *et al.* [RBC+UKQCD Collaboration], Phys. Rev. Lett. **100**, 171602 (2008) [arXiv:0801.4016 [hep-lat]].
- [22] M. Luscher, Commun. Math. Phys. **105**, 153 (1986).
- [23] M. Luscher, Nucl. Phys. B **354**, 531 (1991).
- [24] S. Aoki *et al.* [PACS-CS Collaboration], Phys. Rev. D **84**, 094505 (2011) [arXiv:1106.5365 [hep-lat]].
- [25] S. Aoki, T. Hatsuda and N. Ishii, Prog. Theor. Phys. **123**, 89 (2010) [arXiv:0909.5585 [hep-lat]].
- [26] T. Yamazaki, Y. Kuramashi, A. Ukawa, Phys. Rev. D **81**, 111504(R) (2010) [arXiv:0912.1383 [hep-lat]].
- [27] C.R. Allton, *et al.*, Phys. Rev. D **68**, 014507 (2003); C.R. Allton, *et al.*, Phys. Rev. D **71**, 054508 (2005).
- [28] S. Ejiri, Phys. Rev. D **78**, 074507 (2008).
- [29] K. Kanaya, PoS (LATTICE 2010) 012 (2010).

- [30] M. Asakawa, T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. **92**, 012001(2004).
- [31] A. Nakamura, S. Sakai, Phys. Rev. Lett. **94**, 072305 (2005).
- [32] H.B. Meyer, Phys. Rev. D **76**, 101701 (2007); Phys. Rev. Lett. **100**, 162001 (2008).
- [33] T. Hirano and Y. Nara, Phys. Rev. C **79**, 064904 (2009).
- [34] B. Schenke, S. Jeon and C. Gale, J. Phys. G **38**, 124169 (2011).
- [35] K. Yagi, T. Hatsuda and Y. Miake, “*Quark-Gluon Plasma*” (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [36] K. Fukushima, T. Hatsuda, Rept. Prog. Phys. **74**, 014001 (2011).
- [37] 中村純, 日本物理学会誌 **66**(1), 6 (2011).
- [38] H. Kamada *et al.*, Phys. Rev. C **64**, 044001 (2001) [arXiv:nucl-th/0104057].
- [39] K. Arai, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 132502 (2011).
- [40] J. Fujita and H. Miyazawa, Prog. Theor. Phys. **17**, 360 (1957).
- [41] K. Sekiguchi *et al.*, Phys. Rev. C **65**, 034003 (2002).
- [42] K. Sekiguchi *et al.*, Phys. Rev. C **83**, 061001(R) (2011).
- [43] S. Quaglioni and P. Navratil, Phys. Rev. Lett. **101**, 092501 (2008) [arXiv:0804.1560 [nucl-th]].
- [44] S. Y. Lee and K. Suzuki, Phys. Lett. **91B**, 173 (1980); K. Suzuki and S. Y. Lee, Prog. Theor. Phys. **64**, 2091 (1980).
- [45] T. Furumoto, Y. Sakuragi and Y. Yamamoto, Phys. Rev. C **79**, 011601 (2009).
- [46] P. Demorest, *et al.*, Nature **467**, 1081 (2010) [arXiv:1010.5788 [astro-ph.HE]].
- [47] N. Shimizu, *et al.*, Phys. Rev. C **82**, 061305(R) (2010) [arXiv:1012.1167 [nucl-th]].
- [48] M. Bender, P. H. Heenen and P.-G. Reinhard, Rev. Mod. Phys. **75**, 121 (2003).
- [49] D. Lunney, J. M. Pearson and C. Thibault, Rev. Mod. Phys. **75**, 1021 (2003).
- [50] T. Nakatsukasa, T. Inakura and K. Yabana, Phys. Rev. C **76**, 024318 (2007).
- [51] H. Oba and M. Matsuo, Phys. Rev. C **80**, 024301 (2009).
- [52] K. Yoshida and N. Van Giai, Phys. Rev. C **78**, 014305 (2008); Phys. Rev. C **78**, 064316 (2008).
- [53] I. Daoutidis and P. Ring, Phys. Rev. C **83**, 044303 (2011).
- [54] M. Martini, S. Péru and M. Dupuis, Phys. Rev. C **83**, 034309 (2011).
- [55] H. Nakada *et al.*, Nucl. Phys. A **828**, 283 (2009).
- [56] K. Yoshida and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C **83**, 021304 (2011).

- [57] H. Shimoyama and M. Matsuo, Phys. Rev. C **84**, 044317 (2011).
- [58] J. Terasaki and J. Engel, Phys. Rev. C **84**, 014332 (2011).
- [59] T. Inakura, T. Nakatsukasa and K. Yabana, Phys. Rev. C **80**, 044301 (2009) [arXiv:0906.5239 [nucl-th]]; Phys. Rev. C **84**, 021302 (2011).
- [60] P. Avogadro and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C **84**, 014314 (2011).
- [61] M. Stoitsov *et al.*, Phys. Rev. C **84**, 041305 (2011).
- [62] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, S. Pittel and D. J. Dean, Phys. Rev. C **68**, 054312 (2003) [arXiv:nucl-th/0307049].
- [63] K. Sumiyoshi, *et al.*, Astrophys. J. Lett. **690**, 43 (2009).
- [64] H. Kanzawa, *et al.*, Nucl. Phys. A **791**, 232 (2007).
- [65] A. Ohnishi, *et al.*, Phys. Lett. B **704**, 284 (2011) [arXiv:1102.3753 [nucl-th]].
- [66] H. Shen, *et al.*, Astrophys. J. Suppl. **197**, 20 (2011) [arXiv:1105.1666 [astro-ph.HE]]; C. Ishizuka, *et al.*, J. Phys. G **35**, 085201 (2008) [arXiv:0802.2318 [nucl-th]].
- [67] K. Kotake, K. Sato and K. Takahashi, Rept. Prog. Phys. **69**, 971 (2006) [arXiv:astro-ph/0509456].
- [68] K. Nakazato, *et al.*, Phys. Rev. D **78**, 083014 (2008) [Erratum-ibid. D **79**, 069901 (2009)]; Phys. Rev. D **81**, 083009 (2010).
- [69] Y. Suzuki and K. Varga, Lect. Notes Phys. **M54**, 1 (1998).
- [70] K. Ogata, M. Kan and M. Kamimura, Prog. Theor. Phys. **122**, 1055 (2009) [arXiv:0905.0007 [astro-ph.SR]].
W. Horiuchi and Y. Suzuki, Phys. Rev. C **78**, 034305 (2008); W. Horiuchi, Y. Suzuki and K. Arai, arXiv:1202.0368.
- [71] K. Langanke and G. Martinez-Pinedo, Rev. Mod. Phys. **75**, 819 (2003).
- [72] R. Brockmann and R. Machleidt, Phys. Rev. C **42**, 1965 (1990).
- [73] T. Hatsuda, Mod. Phys. Lett. **A2**, 805 (1987); I. Sagert *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 081101 (2009).
- [74] K. Hotokezaka, *et al.*, Phys. Rev. D **83**, 124008 (2011) [arXiv:1105.4370 [astro-ph.HE]].
- [75] K. Sumiyoshi, *et al.*, Astrophys. J. **629**, 922 (2005).
- [76] 「今後のハイパフォーマンス・コンピューティング技術の研究開発について」の報告書のとりまとめ、文部科学省;

- [http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/23/07/1308508.htm].
- [77] T. Takiwaki, K. Kotake and Y. Suwa, *Astrophys. J.* (2012) in press [arXiv:1108.3989 [astro-ph.HE]].
- [78] K. Sumiyoshi and S. Yamada, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **199**, 17 (2012) [arXiv:1201.2244 [astro-ph.HE]].
- [79] 青木慎也, 日本物理学会誌 **66**(7), 547-552 (2011).
- [80] Janka et al. *Physics Reports* 442 (2007) 38. 諏訪雄大, 天文月報 2011 年 6 月号 pp.276-284.
- [81] M. Arnould, S. Goriely, K. Takahashi *Physics Reports* 450 (2007) 97 - 213.
- [82] 戦略分野 5:物質と宇宙の起源と構造—分野融合研究を目指して— 青木慎也日本物理学会誌、2011 年、第 66 巻第 7 号、page 547-552
- [83] Y. Hashimoto and K. Nodeki, arXiv:0707.3083 (2007).
- [84] S. Ebata et al., *Phys. Rev. C* **82**, 034306 (2010).
- [85] M. Matsuo, *Nucl. Phys.* **A696**, 371 (2001).
- [86] M. Tohyama, *Phys. Rev. C* **75**, 044310 (2007); M. Tohyama and P. Schuck, *Eur. Phys. J. A* **32**, 139 (2007).
- [87] M. Matsuo, T. Nakatsukasa, and K. Matsuyanagi, *Prog. Theor. Phys.* **103**, 959 (2000).
- [88] N. Hinohara et al., *Phys. Rev. C* **82**, 064313 (2010).
- [89] T. Nakatsukasa, P. Avogadro, S. Ebata, T. Inakura and K. Yoshida, *Acta Phys. Polon. B* **42**, 609 (2011) [arXiv:1101.3106 [nucl-th]].
- [90] T. Nakatsukasa and K. Yabana, *Phys. Rev. C* **71**, 024301 (2005) [arXiv:nucl-th/0409013].
- [91] I. Stetcu, A. Bulgac, P. Magierski and K. J. Roche, *Phys. Rev. C* **84**, 051309 (2011) [arXiv:1108.3064 [nucl-th]].
- [92] T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, and J. P. Vary, to be submitted.