「先端学際計算科学共同研究拠点」キックオフ・シンポジウム 第一回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム

筑波大学計算科学研究センター

宇宙·原子核物理研究部門

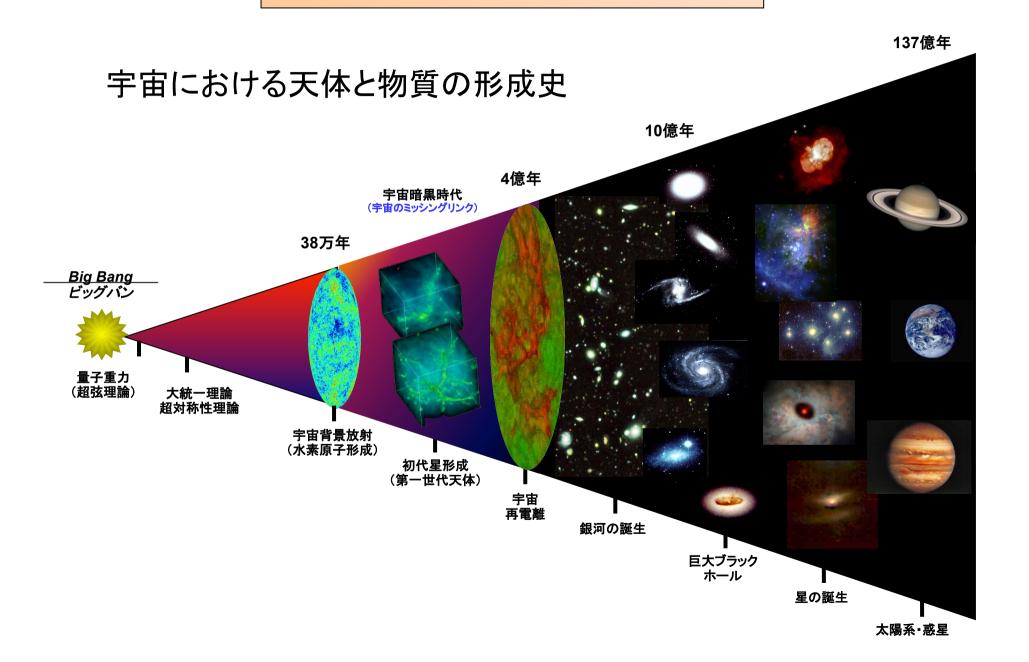
宇宙分野

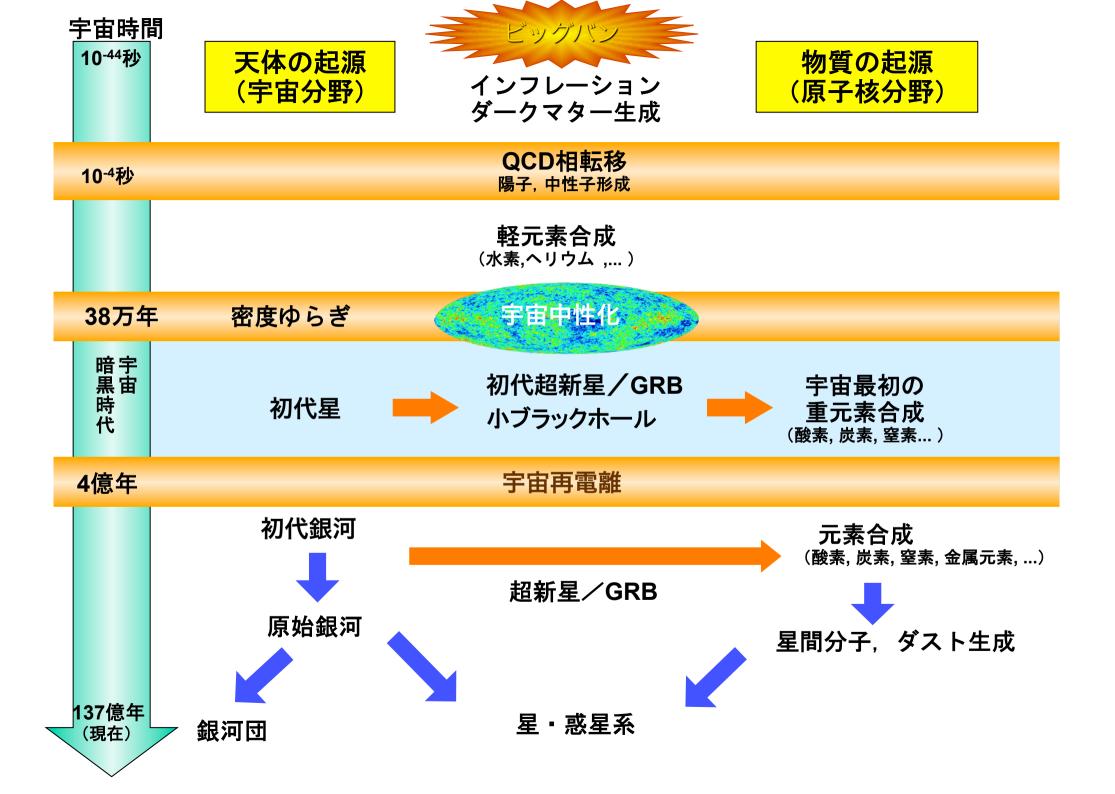
梅村 雅之(教授) 森 正夫(准教授) 吉川 耕司(講師) 岡本 崇(助教)

原子核分野

矢花 一浩(教授) 橋本 幸男(講師) 船木 靖郎(準研究員)

宇宙·原子核分野間連携





初代星から宇宙大規模構造に至る宇宙史解明

長期的な目標

輻射輸送·輻射流体 物質の運動論的性質

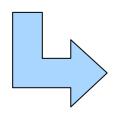
を正確に取り扱う数値シミュレーション



質的に進化した天体シミュレーションによる、より本質的な天体形成の理解

研究課題

- 宇宙暗黒時代における第1・第2世代星形成から原始銀河・巨大BH形成に至る過程の解明
- Lyman-alpha光子・電離光子の輻射輸送計算による、原始銀河形成の研究
- 6次元位相空間上でのボルツマン方程式による自己重力系のシミュレーション

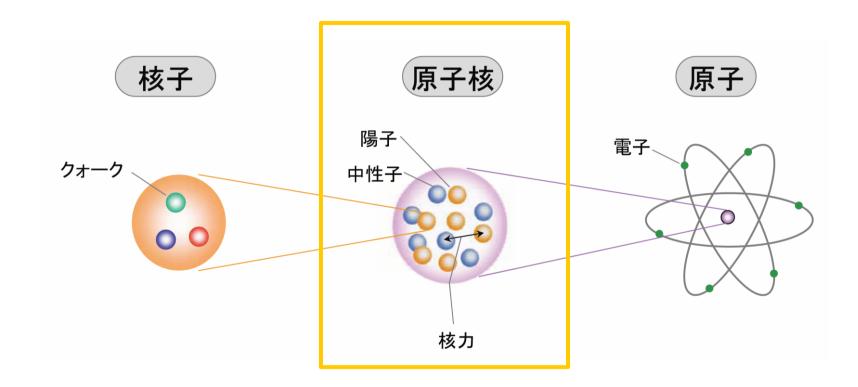


次世代スパコンにおける戦略的な課題 次世代スパコンの利用を視野に入れた橋頭堡的な位置付け

原子核分野

原子核とは、

強い相互作用により束縛した陽子・中性子(フェルミ粒子)よりなる量子多体系



他分野との密接な関係と連携

素粒子分野:

・QCDに基づく 核カと軽い原子核の 第一原理計算

宇宙分野:

- ・星の形成と元素合成
- ・宇宙における分子生成

量子物性分野:

- •密度汎関数理論、
- ・光と物質の相互作用の 第一原理計算

宇宙シミュレータFIRSTの開発・制作

文部科学省 科学研究費補助金 特別推進研究(H16~H19)

計算機工学分野との連携



Blade-GRAPE X64

宇宙シミュレータFIRST(上) と、その中に組み込まれている Blade-GRAPE(下)

- 256 (16×16)ノード 496 CPU + 240 Blade-GRAPE (X64)
- 演算性能: 汎用機(クラスタ) 3.1 Tflops

(1秒間3兆回の演算)

専用機(Blade-GRAPE) 33 Tflops

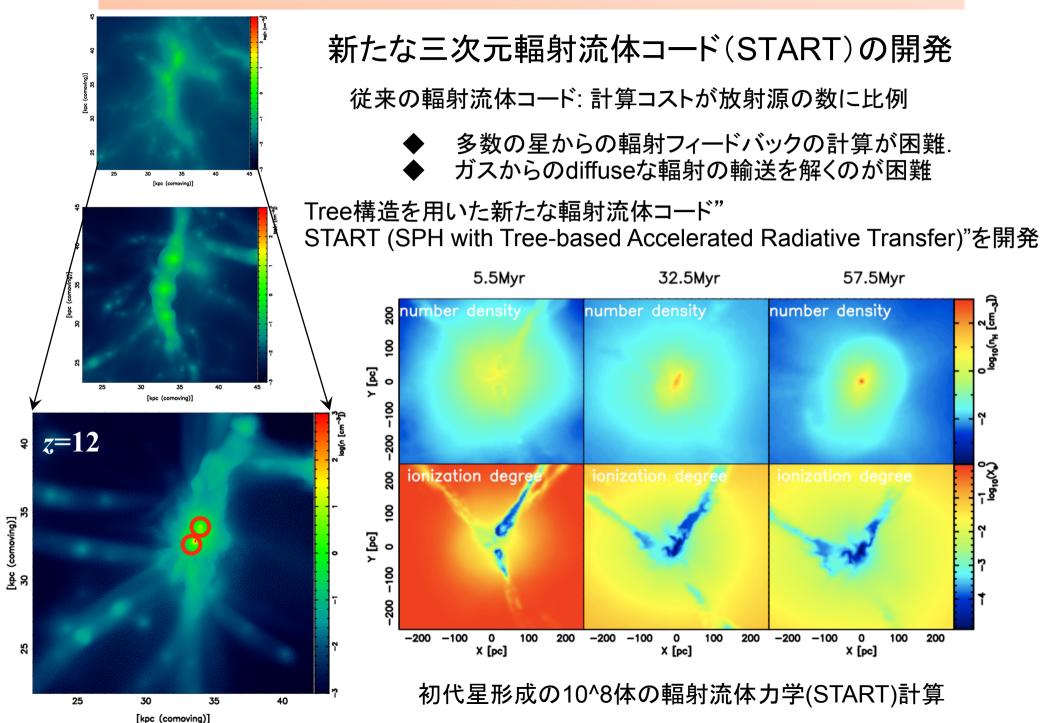
(1秒間33兆回の演算)

- 主記憶 1.6TB
- ディスク容量 89.2TB
- Gfarmファイルシステム

技術協力

(株)ベストシステムズ、日本ヒューレット・パッカード(株) 浜松メトリックス(株)、住商情報システム(株) K&F Computing Research (株)

第一世代天体の6次元輻射流体シミュレーション



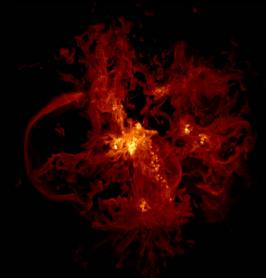
原始銀河形成の大規模シミュレーション 11ature Mori and Umemura, 2006, Nature, 440, 644

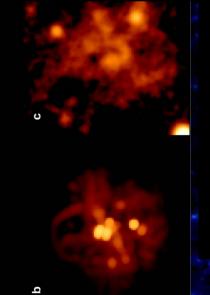
GALACTIC **INTELLIGENCE** What makes a kid 'brainy'?

シミュレーション

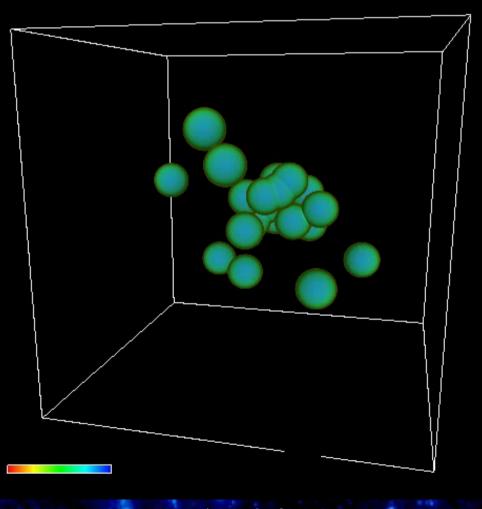
PROTEOMICS Inside the cellular machine

ライマンアルファ天体 (観測)





10243格子流体計算 80,000,000 超新星爆発



8000万個の超新星爆発

ボルツマン方程式による自己重力系の数値シミュレーションコードの開発

▶ 6次元位相空間での物質の分布関数を記述するボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} - \frac{\partial \phi}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0 \qquad \nabla^2 \phi = 4\pi G \rho = 4\pi G \int f dv^3$$

を使って自己重力系の数値シミュレーションを行うコードを開発

N体計算による自己重力系の数値計算

- ■連続的な物質分布を離散的な粒子分布で表現
- ●人工的な二体緩和の影響による計算精度の劣化
- ■運動量(速度)空間を極度に粗視化しすぎる

ニュートリノなどの速度分散の大きな物質にはなじまない

Boltzmann方程式の直接数値解法による 自己重力系のシミュレーション

- ■空間3次元+運動量3次元の6次元位相空間での物質の分布関数の時間進化を記述
- ●人工的な二体緩和を回避
- ●速度分散の大きな物質も計算可能
- ▶ 6次元位相空間をメモリ上にマップするため膨大な記憶容量が必要
- ▶ T2K-Tsukubaで、世界で初めて科学的に意味のある規模のシミュレーションが可能になった
- ▶ 自己重力系シミュレーション以外にも幅広い問題に適用可能

本分野での、これまでの実績:

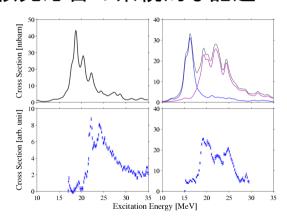
時間依存密度汎関数理論による フェルミ多粒子系の量子ダイナミクス・シミュレーション

「波」の性質を示すミクロな世界の運動を 時間に依存するシュレディンガー方程式を 解くことにより第一原理から記述する。

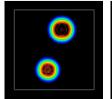
原子核物理 -陽子と中性子のダイナミクスー

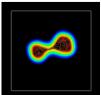
物質科学 一電子のダイナミクスー

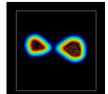
•原子核光応答の系統的な記述

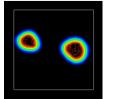


・原子核衝突のTDHFシミュレーション



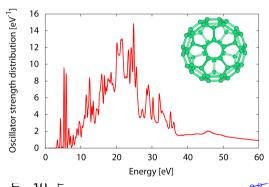


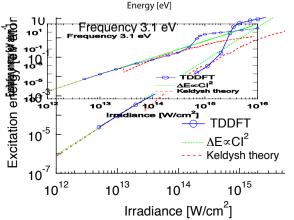




分子の光応答の 第一原理計算

・TDDFTによる 誘電体の光絶 縁破壊の記述





原子核分野: これからの研究の展開-1

原子核、及び原子・分子の量子ダイナミクスを解き明かし、宇宙現象の理解に貢献する。

宇宙現象の理解に必要とされる素過程の多くは量子ダイナミクスで記述される。

- 大規模計算による原子核ダイナミクスの精密な記述を発展。
- 実験が困難な素過程を精密に計算し、宇宙進化の定量的な理解の貢献。

反応の例:中性子過剰核を経由する元素合成過程と光核反応 クーロン障壁よりはるかに低いエネルギーで進む核反応 3体衝突による合成過程(3α→12C(原子核合成)、H+H+H→H₂+H(分子合成))

| 技図表 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 126 | 12

強い相互作用のもとで安定な核種と 超新星爆発における元素合成経路

原子核分野: これからの研究の展開-2

原子核物理学と共通する計算科学手法を発展させ、物質科学・光科学分野へ展開する。

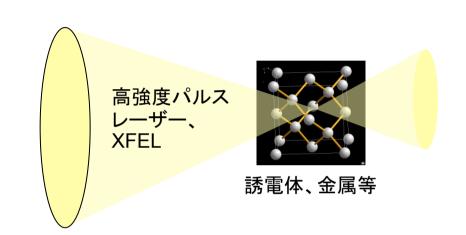
基礎科学・応用科学の目標:

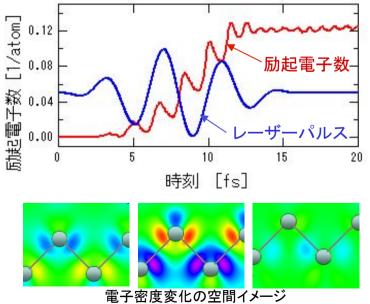
(レーザー科学·光物性·プラズマ科学)

- ・アト秒・フェムト秒スケールで起こる 光と電子の相互作用の解明を目指す。
- ・光通信、レーザー加工技術への貢献。

計算技術の革新:

・時間依存コーン・シャム方程式の数値解法 (ナノメートル、量子力学)と 電磁界の時空間差分解法(FDTD、マイクロ メートル、古典電磁気学)を結合した マルチスケール・シミュレータの開発。





次世代スパコンとの関わり

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」

課題(8) 銀河と超巨大ブラックホール形成の基礎過程の解明 (責任者:梅村雅之)

素粒子・原子核・宇宙連携担当(矢花 一浩)

宇宙·原子核物理研究部門将来計画

- ・宇宙の初代天体から銀河・銀河団形成に至る宇宙進化を、大規模な 輻射流体力学、N体シミュレーションによって探究する。
- •時間依存密度汎関数理論に基づき,原子核物理から原子·分子·固体物理に及ぶ幅広い物質相の研究を展開する。
- ・宇宙における元素合成、分子形成の研究で宇宙分野と原子核分野が連携する。
- •演算加速器を搭載したシミュレータ開発を高性能計算システム研究 部門と連携して行う。
- ・次世代スパコンによる宇宙・原子核、および連携分野でのグランドチャレンジの推進。