



展 TENBO 望

スーパーコンピュータと 素粒子原子核研究



宇川 彰

Ukawa Akira

(理化学研究所 計算科学研究機構)

1 はじめに

原子核は陽子と中性子からできている。陽子や中性子を結び付ける核力は、湯川秀樹氏が提案したように π 中間子の交換によって生じる。素粒子の強い相互作用と原子核についてのこの描像は誰もが知るものだろう。さらに、陽子・中性子や π 中間子が、クォークと呼ばれる粒子が結び付いてできていること、CP対称性の破れを説明するには6種類のクォークが必要なこと、これを提案してノーベル物理学賞を受賞したのが小林誠・益川敏英両氏であることなども、科学に興味を持つ者にはよく知られていることだろう。

では、クォーク同士が結び付いているのはどのような力によるのだろうか。そもそも、クォーク自身が発見されたという記事は新聞を賑わせたことはないが、それにもかかわらずクォークが存在すると物理学者が信じているのはなぜなのだろうか？ 陽子・中性子がクォークからできているなら、クォークから出発して陽子や中性子、更には原子核の性質は説明できるのか？ こういった疑問に答えるのが量子色力学 (quantum chromodynamics, 略してQCD) という物理学の理論で1973年に成立した。

QCDに基づく強い相互作用の研究では、スーパーコンピュータが大きな役割を果たしている。この研究の流れは1980年頃に始まり、最近30年間のスーパーコンピュータの発展にも大きな影響を及ぼしている。我が国における研究もその中で大きな役割を果たして来ており、現在も大きく発展しつつある。

本稿では、スーパーコンピュータの発展にも触れつつ、スーパーコンピュータによる素粒子原子核研究の現状と将来を紹介しよう。

2 素粒子原子核とQCD

現在知られている物質の構成を改めて模式的に示したのが図1である。クォークには6種類あり、質量の軽いものから重いものへup, down, strange, charm, bottom, topと名付けられている (図1では先頭文字だけを表示)。本稿の内容には直接関係しないが、電子やニュートリノはレプトンと総称されるが、同じく6種類があり、クォークの6種類と対応している。

図1をよく見ると、6種類のクォークは青緑赤の3原色を背景に重複して書かれている。実はここにクォーク同士を結び付ける力の背景が隠されているのである。



図1 物質の構成

少し回り道になるが、素粒子原子核の世界では力をどのように理解するのかを知るために、電磁気力の場合を考えてみよう。帯電した金属球を考えると、金属球の電荷が源となって電磁場が作られる。もう1つ帯電した金属球を考えると、2番目の金属球は1番目の金属球の作った電磁場から電磁力を受ける。このように、電磁場を媒介にして、2つの帯電した金属球の間に働く力が電磁力である。

この事情は素粒子である電子を考えても変わらない。電子は負の電荷を持ち、これが作る電磁場を媒介として電子同士の間の電磁力が生じるのである。しかしながら、電子は物質のミクロな構成要素であり量子力学に従って記述しなければならない。当然、電磁場にも量子論を適用しなければならない。電磁場は時間空間を伝わる波であるが、量子力学によれば、そのエネルギーはとびとびに量子化されており、粒子のように振る舞う性質を持つ。これが光子である。つまり、量子力学的には、1番目の電子が光子を放出し、この光子を2番目の電子が吸収する、あるいはその逆のプロセスが生じることによって、2つの電子の間に電磁力が作用するのである。このような理論体系を量子電気力学 (quantum electrodynamics, 略して QED) と呼

び1949年頃に完成した。日本でも朝永振一郎氏が基本的な貢献をしてノーベル物理学賞を受けた。電子と光子の現象を極めて精密に説明する理論として有名である。

大変興味深いことであるが、クォークの間に働く力も電磁気力に類似の原理に従っていると考えられている。すなわち、クォークは“青緑赤”と名付けられた3種類の“色電荷”を持っており、この“色電荷”は“色電磁場”を作る。2つ目のクォークを考えると、その“色電荷”が1つ目のクォークによって作られた“色電磁場”から力を受けると考えるのである。“色電磁場”はクォーク同士をくっ付ける“膠”の役割を果たしているため、膠の英語 glue に倣って“グルオン場”，その量子を“グルオン”と呼ぶ。クォークとグルオンの理論体系が量子色力学 QCD であり、強い相互作用の基本理論と考えられているのである。

電磁気力とグルオン力には1つの決定的な違いがある。よく知られているように、電磁気力は距離が遠くなるとともに減少する。例えば、静止した2つの電子の間に働く力は、距離の逆2乗で減少し無限遠でゼロになるクーロン力である。これに対して、グルオン力は距離が遠くなってもいつまでも一定の大きさを保つと考えられている。2つのクォークを引き離そうとするとグルオン力に抗して仕事をしなければならないが、グルオン力は一定なので必要なエネルギーはクォークを引き離した距離に比例して大きくなる。つまり、2つのクォークを完全に引き離す（距離を無限大にする）には無限大のエネルギーが必要となり、単独のクォークが存在することは不可能なのである。この現象がクォークの閉じ込めと呼ばれ、孤立したクォークが実験で確認できない理由と考えられている。

それでは、陽子や中性子は複数個のクォークからできているのにもかかわらず、なぜ存在しているのだろうか？ なぜエネルギーが無限大にならないのだろうか？ 複数個のクォークを考えた場合、全体の“色電荷”はそれぞれの

クォークの“色電荷”を合成したものとなる。“合成色”が“白色”でない限りそのような状態は存在できないというのがクォークの閉じ込めの一般論である。

例えば図1の陽子を見てみると、uクォークが2個、dクォークが1個のクォークの三体系である。各クォークの“色電荷”が“青”、“緑”、“赤”の3原色であるので、それらを混ぜ合わせた状態は“白色”を含み、これが陽子として存在していると考えられる。

実は、このようなクォークの閉じ込めは、温度が1兆5,000億度程度より高くなると成り立たなくなり、クォークやグルオンの自由度が飛び出してくると予想されている。これが宇宙初期に存在が予想され、RHICやLHCなどの高エネルギー加速器による重イオン衝突で実証が進みつつある、クォーク・グルオン・プラズマである。

3 QCDとスーパーコンピュータ

それでは、QCDはどのような方法で研究するのだろうか？

量子力学によれば、ミクロの粒子としてのクォークは波としての性質も持っており、それを表すのはクォークの波動関数である。波動関数は電磁場と同じく時間空間に広がっているため、クォークの波動関数を“クォーク場”と呼ぶ。クォークの間の力を媒介する“グルオン場”も、電磁場と同様に時間空間に広がった場である。さらに、ミクロの粒子は光に近い速度で飛び回っており、衝突による生成・消滅を繰り返しているため、相対性理論が適用される世界でもある。QCDは、4次元の時間空間に広がったクォーク場とグルオン場の相対論的な量子力学ということができる。

量子力学では通常シュレディンガー方程式を解く。例えば水素原子のエネルギー状態は、電子に対する時間1次元、空間3次元の偏微分方程式を解いて得られる。

QCDでは様子が違っている。クォーク場やグルオン場は時間空間の全体に広がっている物理量なので全部で連続無限個の変数と考えなければならない。対応するシュレディンガー方程式は、連続無限個の変数に対する無限次元偏微分方程式になってしまい、これを解くことは難しい。

そこで、QCDでは、シュレディンガー方程式と同値な方法である経路積分という方法を使う。経路積分は、シュレディンガー方程式の解をクォーク場とグルオン場を変数と考えて無限次元積分で表したものである。このままでは、無限次元偏微分方程式と同じく計算することは難しいが、連続体である時間空間を4次元の離散な格子で置き換え、更に時間空間格子の全体サイズを有限だが十分な大きさに取る。こうすると、時間空間格子の上にあるクォーク場・グルオン場の自由度は有限個になるので、経路積分は有限次元の積分として数学的にも明確に定義できる。この枠組みを格子量子色力学 lattice QCDと呼び、1974年に米国のKenneth Wilsonにより提案された。

もちろん、実際に必要な積分の次元は膨大である。例えば、最近の標準的なサイズとなりつつある 96^4 格子（時間空間の各軸方向に96個の点を取る）を取れば、積分変数の数はグルオン場だけを取っても61億個にもなり、普通の方法では積分できない。そこで、多次元積分平均を求めるために有効なモンテカルロ法を使い、スーパーコンピュータを徹底的に活用して格子量子色力学の研究が行われているというわけである。

電子計算機は第二次世界大戦中の軍事的な要請がきっかけとなって1945年前後に出現した。その後、米国を中心に発展を遂げて来たが、1976年になってCRAY-1が登場し、いわゆるスーパーコンピュータとして有名になった。図2に最近40年間のスーパーコンピュータの計算性能の伸びを示す。過去30年ほどを見ると、約4年ごとに10倍、32年間で約1億倍

(10^8) になっている。

Lattice QCD の計算は 1980 年頃に始まり、陽子等の質量を計算する最初の試みが行われた。これはそれまで全く手が着かなかった難問に解決の端緒を与えたものとして注目を浴び、その後一気に研究が加速したのである。

格子量子色力学には時間空間格子の各点で独立に計算が行えるという特徴がある。この特徴を生かして、多数の CPU をネットワークで結合した並列計算機 (parallel computer) を格子量子色力学向けに開発しようとの試みが 1980 年代から世界各国で進められた。図 2 では凡例の右下に示した記号で記してある。

我が国では、筑波大学を中心にこのような試みが行われ、1996 年に完成した CP-PACS (Computational Physics-Parallel Array Computer System) は世界のスーパーコンピュータのトップ 500 リストの 1 位となった (図 2 の赤丸参照)。CP-PACS は (株) 日立製作所と筑波大学の共同開発で、(株) 日立製作所の SR シリーズへと発展した。産学連携の好例であると同時に、科学の計算ニーズとそれを実現する計算機技術

の協調的設計 (co-design) の世界的にも先例となっている。米国においてもコロンビア大学を中心に一連の並列計算機が開発され、QCDOC (2005 年) や QCDCQ (2011 年) は、IBM 社の BlueGene シリーズに発展し、それらが近年のトップ 500 リストのトップを占めている。このように、lattice QCD の大規模シミュレーションは、スーパーコンピュータの発展そのものにも深い影響を与えている。

事業仕分けで話題になったスーパーコンピュータ“京”も並列計算機である。2012 年にトップ 500 リストの 1 位となり、高い CPU 性能とネットワーク性能によって様々な科学分野の研究に威力を発揮している。

4 最近の成果

lattice QCD による研究成果の中から幾つかを挙げてみよう。

4.1 ハドロンの質量スペクトル

6 種類のクォークからは様々な組み合わせにより“白色”の状態を作ることができる。陽子・中性子はその代表で 1930 年代から知られていた。また π 中間子は 1935 年に湯川秀樹氏により予言され 1940 年代に宇宙線の中に発見された。その後加速器の発展に伴って 1950 年代から 60 年代にかけて更に多くの粒子が発見され、強い相互作用をする粒子群として、ハドロンと呼ばれるようになった。現在では数百種類にのぼる粒子が記録されている。

QCD はクォークとグルオンの基礎理論であるから、ハドロンの性質を

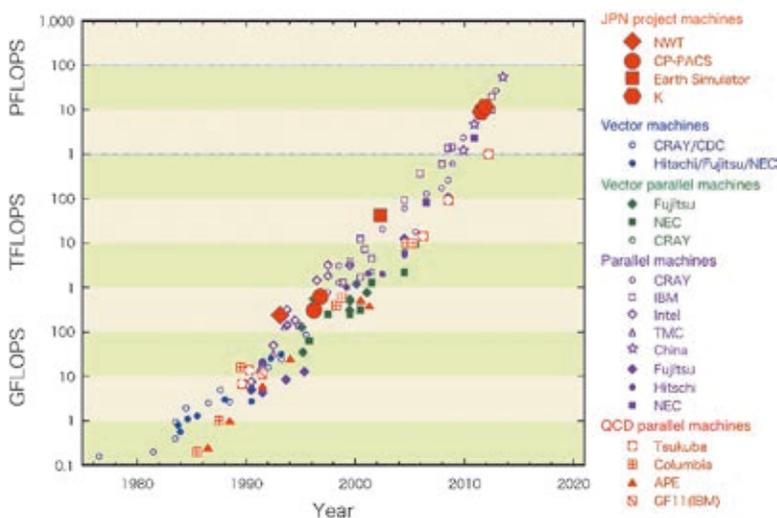


図 2 スーパーコンピュータの発展と QCD

1 GFLOPS は毎秒 10^9 回の浮動小数点計算を行える速度。1 TFLOPS は 1 GFLOPS の 10^3 倍。1 PFLOPS は 1 TFLOPS の 10^3 倍の計算速度

精密に導き出せるかどうかはその正しさの試金石である。Lattice QCDの数値計算には一般に膨大な計算を必要とするが、特にクォークの質量が軽くなるほど計算量が増えることが知られている。このために、6種類のクォークのうち、質量の軽い最初の3種類(u, d, s)からなるハドロン質量スペクトルを精密に求めることは特に重要な課題として、1980年代以来世界中で30年に及ぶ研究が行われて来た。

図3に2008年に発表された、ハドロン基底状態の質量に対する結果を示す¹⁾。3種類の軽いクォーク(u, d, s)の効果全てを取り入れ、かつ自然界に対応する軽いクォーク質量での計算を初めて実現した結果である。ギリシャ文字で示した11種類のハドロン質量の計算結果が赤丸で示されている。縦棒で示した計算誤差はモンテカルロ法による統計誤差と様々な系統誤差を加えたもので、横棒で示した実験値と数%の範囲での一致を示している。この計算では、格子間隔が約0.1 fm (10^{-16} m, 陽子の大きさの約50分の1)の格子を用いた。ほぼ同時期にヨーロッパのグループが格子間隔をゼロとする極限も求めて、より完全な計算を行った²⁾。これによって、ハドロン質量計算によるQCDの正しさの検証は、一時代を画したと言える。

4.2 中性子と陽子の質量差

自然界では、中性子の質量が陽子の質量より極めてわずかだが重い。Einsteinの関係式 $E=mc^2$ を使ってエネルギー単位で記すと

$$m_n c^2 - m_p c^2 = 1.2933322 \pm 0.0000004 \text{ MeV}$$

である。陽子の質量

$$m_p c^2 = 938.272046 \pm 0.000021 \text{ MeV}$$

と比較すれば0.14%だけ重いことになる。このわずかな質量差は、実は幾つもの重要な帰結を持っている。例えば、この質量差のために中性子は陽子に半減期880秒で崩壊することは β 崩

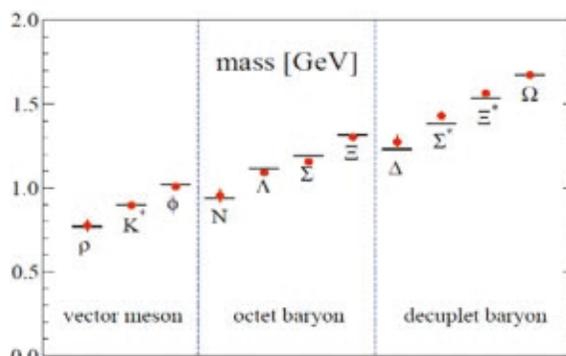


図3 ハドロン質量スペクトル

壊として知られている。このことはビッグバン直後の元素合成により、宇宙での水素とHeの存在比が3:1となることに直接関係している。また、水素原子は陽子と電子の束縛状態だが、電子の質量は $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$ である。もし電子の質量が $1.293 - 0.511 = 0.782 \text{ MeV}$ だけ重かったら、あるいは中性子が同じ量だけ軽かったら、水素原子は逆 β 崩壊によって中性子とニュートリノに変換してしまい、水素原子は存在し得ないことになる。

このような物理的な興味から、ハドロン間のわずかな質量差をも精密に計算する試みが進展している。一般にこのような質量差を計算しようとするとき、電磁相互作用の効果も無視することはできない。陽子は正の電荷を持っているが、電磁相互作用による質量変化は、微細構造定数 $\alpha = 1/137.036 \dots = 0.73\%$ 程度と予想されるからである。

中性子と陽子の質量差を計算した最近の結果を示そう³⁾。最終結果は

$$m_n c^2 - m_p c^2 = 1.51 \pm 0.28 \text{ MeV}$$

で、計算誤差はまだ大きいですが、誤差の範囲内で実験値と一致を示している。この質量差はuクォークがdクォークに比べてわずかに軽いことによる効果と電磁相互作用の効果からなる。両者を分解して結果を示すと

$$m_n c^2 - m_p c^2 = (2.52 \pm 0.03)_{\text{QCD}} - (1.00 \pm 0.16)_{\text{QED}} \text{ MeV}$$

QCDの効果とQEDの効果が微妙にバランスしている。我々の宇宙はこのような微妙なバランスの上に立っているのである。

4.3 クォーク・グルオン・プラズマ

クォークは通常の状態ではハドロンの中に閉じ込められているが、既に述べたように、温度や密度を極限的に高い状況まで上げていくとこれは必ずしも成り立たないと予想されている。例えば、宇宙の歴史をビッグバン目掛けて逆に遡っていくと温度は宇宙半径に逆比例して高くなる。このような状況下でハドロンがどのような状態を示すかは重要な質問であり、lattice QCDによるシミュレーションを通じて研究されている。

図4に2つのグループにより計算された最新結果を示す⁴⁾。温度 T を横軸に取り、縦軸にQCD物質のエネルギー密度 e と圧力 p の計算結果を温度の4乗 T^4 を単位にして示したものである。状態方程式と呼ばれるもので、物質の状態を特徴付ける基本的な物理量である。圧力はinteraction measureと呼ばれる組み合わせ

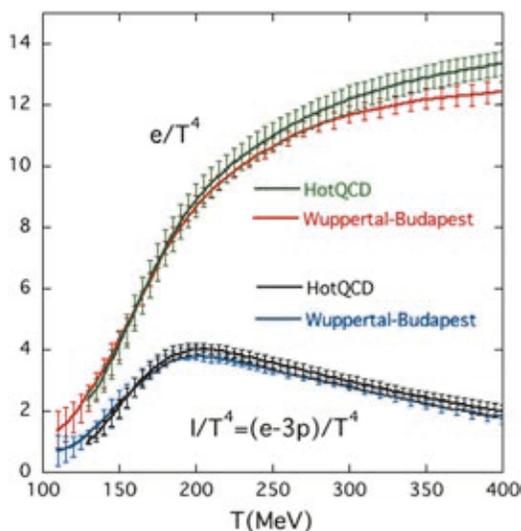


図4 QCDの状態方程式

$e-3p$ で示してある。温度が $T_c \approx 150-160 \text{ MeV}$ (すなわち、1兆5,000億度から1兆6,000億度)の辺りで急激な変化が生じていることが見て取れる。その他にも様々物理量が計算されており、これらの結果から、QCD物質は温度が T_c の辺りで、ハドロンのガスから、クォークとグルオンの自由度がプラズマを構成する状態に相変化を起こしていると結論されている。

実験でクォーク・グルオン・プラズマを作り出すにはどうすればよいだろうか？ 金(Au)やウラン(U)などの重い原子核はたくさんの陽子・中性子を含む。例えばAuは原子番号79、その原子核は197個の陽子・中性子からなる。加速器でAuやUなどを高エネルギーに加速し正面衝突させれば、多数の陽子・中性子が多重衝突を起こして高い温度状態が実現すると期待される。このような方法でクォーク・グルオン・プラズマが生成されるかどうか検証しようとする実験は1970年代から開始された。最近では、このような実験のために作られた重イオン加速器RHICや、ヒッグズ粒子の発見で有名になったLHCといった加速器を使って行われている。これらの実験結果の分析によると、衝突直後には温度が $T \approx 200-300 \text{ MeV}$ (2兆度から3兆度)にも達し、定量的にもlattice QCDによる計算結果と整合する結果が得られている。このようなことから、高エネルギーの重イオン衝突では、クォーク・グルオン・プラズマが生成されているとの理解が進みつつある。

4.4 原子核

陽子・中性子の集合体としての原子核の研究には半世紀以上の長い歴史がある。lattice QCDに基づいて、クォークとグルオンから原子核を理解するアプローチではどのくらいのことが分かってきているのだろうか。

この方向の研究は最近ようやく本格的に始まった。基本的に2つの方法が考えられる。1つはlattice QCDで陽子や中性子間に作用する核力ポテンシャルを求め、これに基づいて伝統的な原子核の方法を適用する⁵⁾。もう1つはlattice

QCDで直接原子核の性質を求めるために必要な物理量を計算する⁶⁾。

現在この2つの方法によって研究が進められ、例えば第2の方法では陽子2個と中性子2個からなるHe原子核の束縛エネルギーの計算が試みられているといった現状である。素粒子の計算に比較して原子核の計算はエネルギースケールが約100分の1の小さな量を分析しなければならず格段に難しい。今後の進展が期待されよう。

5 展望

本稿ではスーパーコンピュータを用いたlattice QCDによる素粒子原子核研究の状況を紹介した。物理学の研究では、多自由度かつ非線型な極めて複雑な現象に直面することがますます多い。解析的な計算に替わって数値的にこのような現象を研究する方法の重要性と有効性は高まる一方である。そのような中で、lattice QCDは、物理研究の必要性和スーパーコンピュータの発展が相互に刺激し合い、両方の側面で大きな発展を遂げた例である。

計算科学は実験・理論と並んで科学の第3のパラダイムと言われて久しい。その具体的な重要例として、素粒子原子核のスーパーコンピュータによる研究には今後も一層の発展が期待されるところである。

Lattice QCDとスーパーコンピュータについて、最近書いた総合報告を参考文献7)に挙げておこう。

【謝辞】

金谷和至氏(筑波大学)に、**図1**と**図2**を提供していただいたことを感謝する。

参考文献

- 1) Aoki, S., *et al.*, *Phys. Rev. D*, **79**, 034503 (2009)
- 2) Durr, S., *et al.*, *Science*, **322**, 1224 (2008)
- 3) Borsanyi, S., *et al.*, arXiv:1406.4088 (2014)
- 4) Borsanyi, S., *et al.*, *Phys. Lett. B*, **730**, 99 (2014); Bazavov, A., *et al.*, arXiv:1407.6387 (2014)
- 5) Ishii, N., *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 022001 (2007)
- 6) Yamazaki, T., *et al.*, *Phys. Rev. D*, **81**, 111504 (2010)
- 7) Ukawa, A., Kenneth Wilson and Lattice QCD, arXiv:1501.04215