

平成30年度 文部科学省

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する  
アプリケーション開発・研究開発（萌芽的課題）

平成30年度

「基礎科学のフロンティアー極限への挑戦（基礎科学の挑戦  
ー複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）」

成果報告書

令和元年5月31日

国立大学法人東北大学金属材料研究所

久保百司

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立大学法人東北大学金属材料研究所が実施した平成30年度「基礎科学のフロンティア－極限への挑戦（基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」の成果を取りまとめたものです。

## 目次

1. 委託業務の題目 .....	1
2. 実施機関（代表機関） .....	1
3. 委託業務の目的 .....	1
4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容 .....	1
4-1. 実施計画 .....	1
4-2. 実施内容（成果） .....	6
4-3. 活動（研究会等） .....	56
4-4. 実施体制 .....	56
別添 1 学会等発表実績	
別添 2 実施計画	
別添 3 活動（研究会等）	

## 1. 委託業務の題目

「基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦（基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）」

## 2. 実施機関（代表機関）

代 表 機 関	機関名	国立大学法人東北大学			
	所在地	〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1			
	課題 責任者	ふりがな	くぼ ももじ	生年	西暦 1967 年 2 月 1 日 (52 歳)
		氏名	久保 百司	月日	※2019 年 4 月 1 日現在
		所属部署名	金属材料研究所	役職	教授
		連絡先	Tel. 022-215-2050 Fax. 022-215-2015 E-mail momoji@imr.tohoku.ac.jp		
	事務 連絡 担当者	ふりがな	たかはし あきら		
		氏名	高橋 昭		
		所属部署名	金属材料研究所	役職	プロジェクトマネージャー
		連絡先	Tel. 022-215-2143 Fax. 022-215-2272 E-mail cbsm2.takahashi@imr.tohoku.ac.jp		

## 3. 委託業務の目的

実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず、未だ答えの出ていない極限を探求する基礎科学の難問に対して、大規模数値計算を軸とした学際連携で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創により、基礎科学のフロンティアを開拓することを目的とする。

このため、国立大学法人東北大学を中核機関、国立大学法人東京大学、国立大学法人大阪大学、国立大学法人金沢大学、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人筑波大学、国立大学法人横浜国立大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人九州大学を分担機関とし、協力、支援する機関及び研究者（以後、協力機関と総称する）の協力を得て、本業務を実施する。

## 4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容

### 4-1. 実施計画

平成 30 年度は、本格実施フェーズの 1 年目として、以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、平成 29 年度に策定した実施計画書（研究開発内容、目標・期待される成果、実施体制、必要計算資源、工程表、所要経費等）に従い、分担機関の国立大学法人東京大学、国立大学法人大阪大学、国立大学法人金沢大学、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人筑波大学、国立大学法人横浜国立大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構、国立大学法人九州大学とともに、本格的な研究開発を実施する。

本業務は、以下 A から D の 4 つのサブ課題のアプリケーション開発・研究開発で構成する。A. 破壊

とカタストロフィ、B. 相転移と流動、C. 地球惑星深部物質の構造と物性、D. 量子力学の基礎と情報。

本萌芽的課題を構成する4つのサブ課題A～Dに関し、中核機関が中心となり、分担機関、および、協力機関に所属するメンバーの協力を得て、平成29年度に設定した平成30年度の各サブ課題の目標を実施する。

各サブ課題においての研究項目は以下の通りである。

国立大学法人東北大学は、代表機関として本萌芽的課題のアプリケーション開発・研究開発を主体的に推進し、委託業務全体の統括を行う。また、サブ課題A、Bを行う。また、分担機関と連携し、再委託によって、以下の①～④の研究開発に取り組む。

国立大学法人東京大学は、サブ課題A、B、Dを行う。

国立大学法人大阪大学は、サブ課題Aを行う。

国立大学法人金沢大学は、サブ課題Aを行う。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構は、サブ課題Aを行う。

国立研究開発法人理化学研究所は、サブ課題Cを行う。

国立大学法人筑波大学は、サブ課題Dを行う。

国立大学法人横浜国立大学は、サブ課題Dを行う。

国立研究開発法人物質・材料研究機構は、サブ課題Cを行う。

国立大学法人九州大学は、サブ課題Bを行う。

#### ①サブ課題A 破壊とカタストロフィ

(再委託先：国立大学法人東京大学、国立大学法人大阪大学、国立大学法人金沢大学、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構)

i) サブ課題A統括、および、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算

i-1) サブ課題A統括、および、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーション

平成28～29年度は、古典分子動力学法に基づくシミュレーションコード「LASKYO」を、亀裂先端の化学反応、亀裂生成が扱えるように拡充するとともに、「京」上で1000万原子以上の計算を可能にした。平成30年度は、上記シミュレーションコード「LASKYO」のさらなる高速化と最適化の実現により、「京」上で1億原子以上の計算を可能にし、より大規模系で原子論的に亀裂先端の化学反応、亀裂生成の解析を実現する準備を行う。さらに、大規模系において腐食と変形が扱える新たなモデリング手法を構築するとともに、金属材料について亀裂先端の化学反応・亀裂生成に加え、腐食と変形の大規模分子動力学計算を実施する。

i-2) 亀裂先端の化学反応・亀裂生成の第一原理計算

(再委託先：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構)

金属材料における破壊の初期段階におけるシミュレーションとして、粒界破壊の原因となる水素や不純物元素の粒界偏析とそれがもたらす影響に対して第一原理計算手法を用い、平成29年度は結合エネルギー評価を行った。平成30年度はモバイル水素による脆化程度の影響を評価し、実験事実と比較す

る。

ii) 断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション

(再委託先：国立大学法人東京大学)

物質科学・材料科学に基づいた現実的な摩擦法則を断層破壊シミュレータに実装する作業を行う。現行のシミュレータでは簡素化された摩擦法則（摩擦係数が累積滑り量のみ依存するというモデル）が用いられているが、これは滑り速度依存性などを表現しておらず物質科学的な観点からは単純化し過ぎているとも言える。そこで、平成30年度においては「滑り速度に依存する摩擦法則」をシミュレータに実装する。これによってより現実的な断層モデリングが可能になる。実装後は、いくつかの代表的な断層配置についてシミュレーションを行い、摩擦法則の高度化により地震破壊ダイナミクスがどのように変化するか確認する。

iii) 亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション

(再委託先：国立大学法人大阪大学)

局所せん断すべり過程が未だ十分に明らかになっていない金属アモルファス材料に対するせん断変形の大規模原子シミュレーションを実施する。金属アモルファスの原子モデルは分子動力学計算法を用いて液体合金を急冷することにより作成する。金属アモルファスのせん断すべり過程におけるせん断応力とせん断速度との関係を明らかにすることにより、摩擦法則との関連性を調べる。

iv) 変形・破壊現象に内在する統計性の検討

(再委託先：国立大学法人金沢大学)

平成29年度は、様々な構造や組織を表現できる原子モデリングの開発を行い、結晶構造内の亀裂の断続的な進展現象における規模と頻度の統計的性質の調査を実施した。平成30年度は、非晶質材料内の塑性変形に内在する統計的性質の温度依存性について検討し、さらに結晶と非晶質が混在する固体材料における塑性変形の伝播機構の調査を実施する。

②サブ課題B 相転移と流動

(再委託先：国立大学法人東京大学、国立大学法人九州大学)

i) サブ課題B統括、および、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム (MSSP) の開発、および、複雑流動のシミュレーション

平成28～29年度に開発したマルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)の2次元プロトタイプを用いて、高分子流動や気泡・液滴を含む流動を表現する各種のマイクロシミュレータ(MicS)との連携シミュレーションを実施する。連携シミュレーションの結果を超並列分子動力学シミュレーションの結果と比較することで、MSSPの正当性を検証する。また、MSSPのプロトタイプ的设计をベースにして、最終成果物となる3次元のMSSPの開発に着手する。

ii) 分子動力学計算による複雑流体の解析

(再委託先：国立大学法人東京大学)

超並列分子動力学シミュレータを多成分系を扱えるように拡張し、不純物が気泡生成に与える効果について調べる。また、超並列分子動力学計算とMSSPプロトタイプの結果の比較、検証を行う。また、流れの下で障害物上に起こる気泡生成を計算するコードの開発を進める。

iii) 流体機械内部を想定したキャビテーション流れのモデリング

(再委託先：国立大学法人九州大学)

当初計画に従い、平成30年度より再委託先として参画するが、平成30年度は流体機械内部で発生し得る気液相変化を伴うキャビテーション流れを対象として、キャビテーション特有の様々な素過程をモデル化した数値流体力学（CFD）計算を行う。また、このCFD計算に組み込まれているモデルを微視的視点から高度化するため、分子動力学法により微小気泡の挙動をシミュレートするとともに、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム（MSSP）との結果比較を通じて、MSSPの改良に協力する。

### ③サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性

（再委託先：国立研究開発法人理化学研究所、国立研究開発法人物質・材料研究機構）

#### i) サブ課題C統括、および、地球惑星深部物質の構造と物性の研究

（再委託先：国立研究開発法人理化学研究所）

温度圧力一定標準第一原理分子動力学法あるいは温度圧力一定オーダーN第一原理分子動力学法により、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性およびその不純物効果を研究する。また、多階層ネットワーク構造解析プログラムの高度化を行う。

#### ii) 極限環境オーダーN第一原理分子動力学法の研究

（再委託先：国立研究開発法人物質・材料研究機構）

平成29年度は圧力制御機能を付加し、温度圧力一定分子動力学を実現するオーダーN法第一原理計算プログラムを開発した。平成30年度はこのプログラムの効率化、高速化を行う。さらに、拡張ラグランジアン断熱近似分子動力学手法等を用い、局在軌道の最適化を同時に行う手法、プログラムを開発する。

### ④サブ課題D 量子力学の基礎と情報

（再委託先：国立大学法人東京大学、国立大学法人筑波大学、国立大学法人横浜国立大学）

#### i) サブ課題D統括、および、計算物性科学の手法革新

（再委託先：国立大学法人東京大学）

物性理論、素粒子理論、極低温原子系、量子通信などの分野で現れる問題に対して広く適用可能で強力な古典・量子格子問題の解決スキームを、テンソルネットワーク法に基づいて確立する。とくに、物質科学研究を念頭に置いたテンソルネットワーク法に基づく並列化プログラムの高度化と実証計算を行う。また、機械学習・情報抽出に基づくマルチスケールダイナミクス計算の枠組みを構築する。さらに、行列ベクトル積に帰着されるいくつかの計算科学的手法の並列化プログラムの高度化を行い、これを用いて量子通信を念頭においた実証計算を行う。

#### ii) テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用と数理的・計算機科学的高度化開発

（再委託先：国立大学法人筑波大学）

テンソルネットワーク（TN）法の素粒子物理学への応用を目指し、平成29年度に引き続き「京」を用いたTN法の大規模並列アプリケーション開発を行うとともに、ポスト「京」へ向けた高度化に取り組む。平成29年度は、数理的・計算機科学的観点から、高性能固有値・特異値計算法の開発・高度化を行ったが、平成30年度は大規模並列計算の高性能化に取り組み、具体的なアプリケーションを用いた実証実験を行う。

iii) 量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーシミュレーション

(再委託先：国立大学法人横浜国立大学)

平成28年度は、量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーの実験系の準備を実施した。平成29年度は、ダイヤモンドNVを記述するハミルトニアンを導出するとともに、平成28年度に準備した実験系を用いて多体量子もつれ操作の実験を実施した。平成30年度は、平成29年度に得たハミルトニアンを基にスピン量子クラウドメモリーをより高精度に量子制御・情報抽出する方法を機械学習の応用で開発し、開発した手法による高精度の多体量子もつれ操作の実験を行う。また、量子情報の緩和過程を議論できるように、TOMB0に電子・格子相互作用の計算ルーチンをインプリメントし、結晶での電子励起状態の電子・格子緩和時間に関する試験計算を試みる。

⑤プロジェクトの総合的推進

中核機関が中心となり、各サブ課題を実施する分担機関、および、協力機関のメンバーで、研究進捗状況と今後の研究計画を共有するために、全体シンポジウムを開催する。また、サブ課題ごとに詳細な研究の進捗状況を共有し、目標実現のために必要となる課題を検討するために、サブ課題ごとに検討会を実施する。運営委員会を適宜開催し、参画各機関の連携・調整にあたる。年度の終わりには、研究内容を見直し、翌年度の実施計画を策定する。必要に応じて、調査あるいは、外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの推進に資する。

## 4-2. 実施内容（成果）

### ① プロジェクトの総合的推進

#### 【より良い研究体制の構築】

##### 1) より良い実施体制の構築

本課題では、平成 29 年度に複数回の議論を重ね、本萌芽的課題の統一的な全体目標として、情報抽出に基づく計算手法を系統的に開発するとともに、異分野間の連携課題にも応用し、マルチスケール現象の理解へと展開する新しい学問分野体系「インフォメーション・ディスティレーション」という新しい学問分野体系の確立を目指すこととした。そして、その実現のために、課題を実施するメンバーとして、計算科学者に加え、応用数学者や実験研究者、さらには産業界からも課題参加者または協力者が参画する体制を整えた。さらに、計算環境支援として、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所などのスーパーコンピュータセンターの協力を得ると共に、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、分子科学研究所で進めている計算物質科学スパコン共用事業に対して、平成 28 年度から引き続き本萌芽的課題の業務参加者も参加できる環境を整えた(図 1)。なお、平成 30 年度における成果の目標及び業務の方法、実施体制、予算、必要計算資源の業務計画策定の結果、平成 29 年度まではサブ課題 B の分担機関であった海洋研究開発機構が平成 30 年度より協力機関となり、平成 29 年度まではサブ課題 B の協力機関であった九州大学が平成 30 年度より分担機関となった。

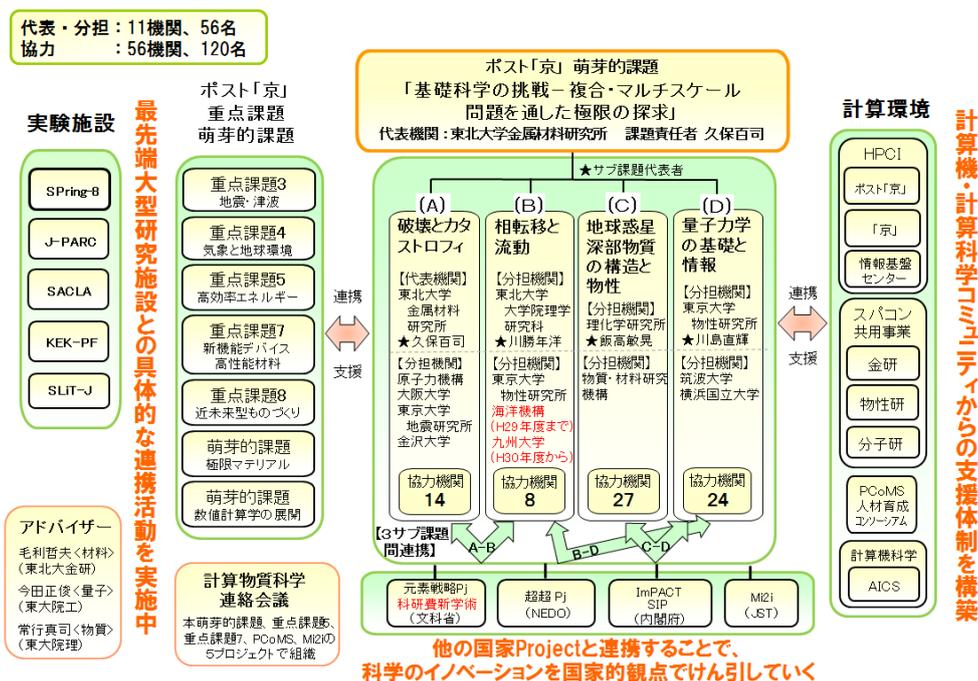


図1 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の実施体制（平成 31 年 3 月時点）

平成 30 年度は、平成 29 年度までに整えた体制をもとに研究を進めると共に、より着実に成果を出すことを目指して、まずは連携体制の整備を行った。サブ課題毎に分担機関、および、協力機関の主要メンバーとの議論を重ね、サブ課題内の連携体制の明確化(図 2～図 5)を行い、サブ課題研究における連携を進めた。さらに、サブ課題間の連携体制の明確化も行い、サブ課題 A－B 間連携、サブ課題 B－D 間連携、サブ課題 C－D 間連携の研究を進めた。

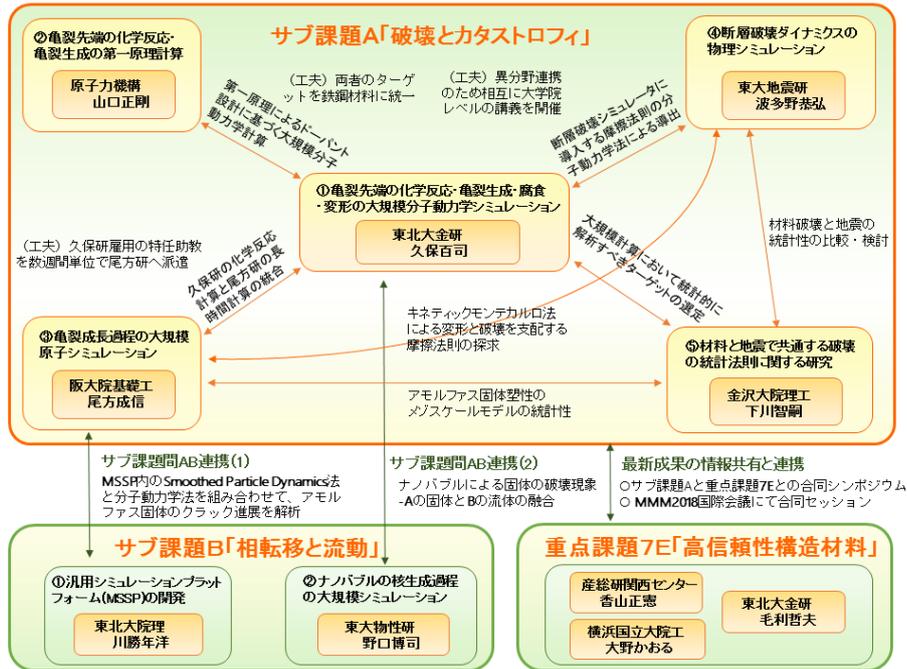


図2 サブ課題Aの連携体制(平成31年1月時点)

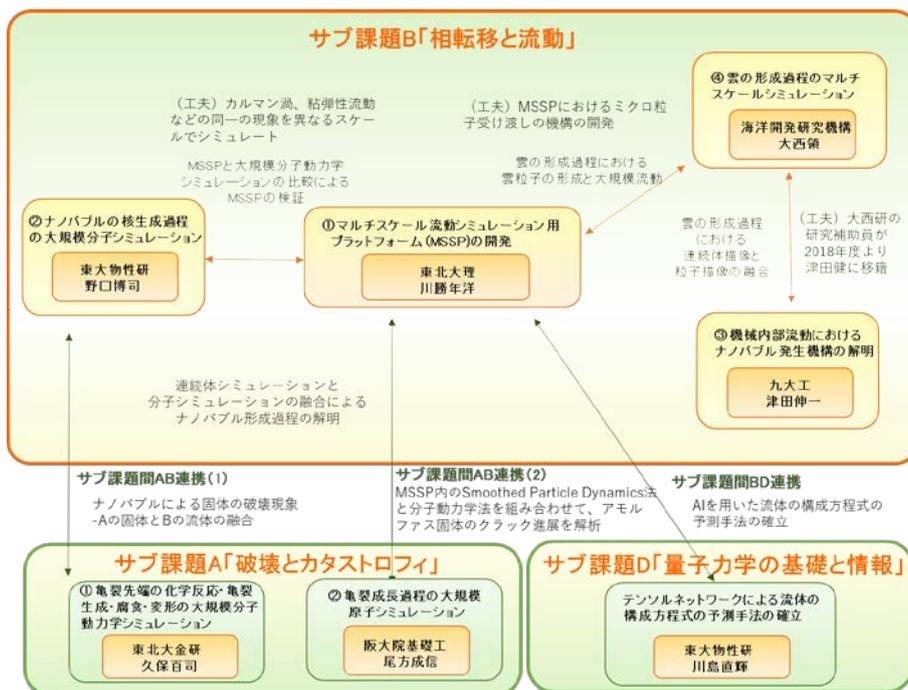


図3 サブ課題Bの連携体制(平成31年1月時点)

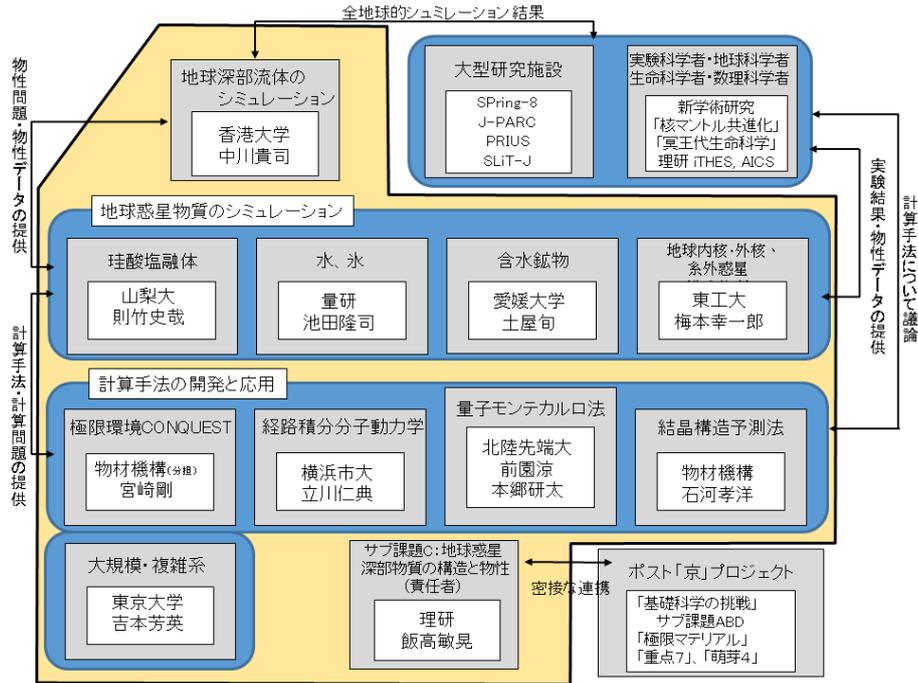


図4 サブ課題Cの連携体制(平成31年1月時点)

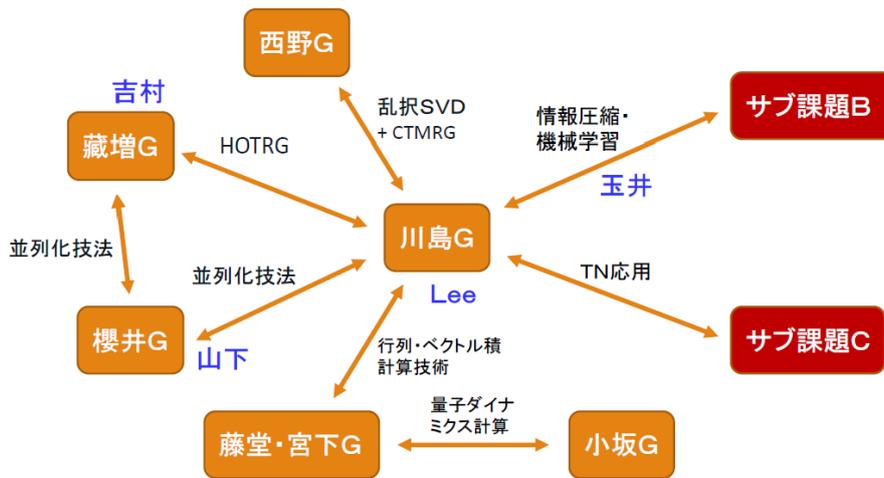


図5 サブ課題Dの連携体制(平成31年1月時点)

さらに、代表機関である東北大学金属材料研究所が中心となり、平成30年7月3日に第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウムを開催し、平成31年1月10日に第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップを開催した。サブ課題代表者とアドバイザーから構成される「基礎科学の挑戦」の運営委員会も同日に開催した。アドバイザー3名にはシンポジウムやワークショップ、運営委員会にご出席いただき、専門家としての詳細なアドバイスを頂いた。シンポジウムでは、昨年度、アドバイザーから頂いたコメントに従い、サブ課題A-B連携、サブ課題B-D連携、サブ課題C-D連携の発表を組み入れた。また、シンポジウムにおいては、トヨタ自動車の福間隆雄氏、パナソニックの鈴木正明氏、三菱重工業の野島繁氏にご

参加いただき産業界からの本萌芽課題に対するご意見を頂いた。ワークショップは若手研究者の発表の場とすると共に、若手研究者が活発に意見交換を行う情報交換会の場を設けた。ワークショップでは、平成 29 年度、アドバイザーから頂いたコメントに従い、各サブ課題の発表の前にサブ課題代表者によるサブ課題ごとの全体概要と体制に関する発表を組み入れた。また、平成 29 年度に引き続き、ポスト「京」重点課題、他のポスト「京」萌芽的課題、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ Mi2i、計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS、超々プロジェクト、元素戦略プロジェクト、Impact、SIP などの他の国家プロジェクトと連携を図る体制を整えた。特に、ポスト「京」重点課題 5、ポスト「京」重点課題 7、計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ Mi2i、そして本萌芽的課題で、計算物質科学連絡会議という相互の連携、協力関係を推進するための組織を運営し、平成 30 年 8 月 2 日にステーションコンファレンス東京にて第 4 回の計算物質科学連絡会議を、平成 31 年 3 月 1 日に同じくステーションコンファレンス東京にて第 5 回の計算物質科学連絡会議を開催した。特に、上記の計算物質科学連絡会議においては、各プロジェクトの運営上の工夫や相互連携について意見交換を行った。さらに平成 30 年から、日本学術振興会の科学研究費助成事業新学術領域研究「ハイエントロピー合金」がスタートしたことから、本年度から新たに「ハイエントロピー合金」プロジェクトとの連携を開始した。また、本萌芽的課題で開発したアプリケーションを 2023 年度に完成予定の東北放射光施設 SLiT-J と連携させるための議論を、東北放射光施設 SLiT-J の関係者と進めた。

また、サブ課題代表者間で議論を重ね、本萌芽的課題で開発したアプリケーションを活用してポスト「京」稼働後に早期に成果を出すことを目的として、平成 29 年度末に提供された理研シミュレータの活用を積極的に進めることとした。具体的には、分担機関、および、協力機関の主要メンバーと協議し、理研シミュレータを活用した開発・研究を促進するアプリケーションの候補を、サブ課題毎に複数選出した後、その中からサブ課題毎に 1 つを選抜した(下記参照)。さらに、これらアプリケーションの理研シミュレータ上での開発・研究を促進し、ポスト「京」の稼働後に早期に成果を創出するための体制の構築を検討した。

#### 【理研シミュレータを活用するアプリのリスト】

- サブ課題 A : LASKYO  
古典分子動力学法に基づくシミュレーションコード
- サブ課題 B : MDACP  
Lennard-Jones ポテンシャルを持つ粒子用の並列分子動力学コード
- サブ課題 C : CONQUEST  
局在軌道、オーダーN 法を用いた第一原理計算プログラム
- サブ課題 D : テンソルネットワーク法のコード  
テンソルネットワークなどによる量子格子系ソルバ

平成 30 年度は、上記の実施体制を構築することで、業務計画書に沿って研究を計画通りに推進することができた。

## 2) 運営委員会の実施

第 4 回運営委員会は、平成 30 年 7 月 3 日に開催した第 2 回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウムの昼食時に開催した。出席者は、サブ課題代表者 4 名、本

課題のアドバイザー3名、オブザーバー4名である。報告事項としては、平成29年度成果報告書を基に、体制や連携、アプリケーションの開発状況について報告した。また今後の会議・報告の予定について報告を行った。成果報告の内容はサブ課題A、B、C、Dについてサブ課題代表者よりそれぞれ説明を行った。また、本年度から本格的にスタートするサブ課題間連携課題について、各連携課題を担当するポストドク担当者についての報告を行った。

第5回運営委員会は、平成31年1月10日に開催した第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップの昼食時に開催した。出席者は、サブ課題代表者4名、本課題のアドバイザー3名、オブザーバー3名である。報告事項としては、理研シミュレータ性能を評価するアプリの候補についての報告に加え、平成31年度の仮置き予算の報告、および平成31年1月28日の文科省ヒアリング資料の説明を行った。また平成31年度の会議の実施予定を報告した。

### 3) サブ課題代表者会議によるプロジェクトマネジメント

第4回サブ課題代表者会議を平成30年10月16日に東北大学東京分室にて開催した。主な検討事項は、下記の通りである。平成31年1月10日開催ワークショップの進行について議論を行った。協力機関のシミュレータNDA参加について検討し、学生の参加についての対応を確認した。理研シミュレータの活用について検討し、各サブ課題から理研シミュレータを活用するアプリケーション1件を選定する方向で進めることとした。ハッカソン参加について議論を行い、できるだけ各サブ課題から1名以上参加する方向で、希望者を募ることとした。理化学研究所作成の資料に基づきポスト「京」関連の推奨語句について出席者間で共有した。また、メーリングリストの運用について検討した。最後に今後の予定について確認した。

第5回サブ課題代表者会議を平成31年1月11日に東北大学東京分室にて開催した。主な検討事項は、下記の通りである。理研シミュレータを使うアプリケーションの選定について検討を行い、各サブ課題から理研シミュレータを活用するアプリケーション1件を決定した。さらに、本萌芽的課題で開発したアプリケーションの、ポスト「京」稼働後の早期成果創出について、議論を行った。また、今後の研究計画について検討を行った。

第6回サブ課題代表者会議を平成31年3月2日に東北大学東京分室にて開催し、最終年度となる平成31年度の研究計画について議論を行うとともに、本萌芽的課題で統一的に取り組む新しい学問分野体系「インフォメーション・ディステーション」の展開について議論を行った。さらに、本萌芽的課題で開発したアプリケーションの、ポスト「京」稼働後の早期成果創出について、議論を行った。

### 4) 文部科学省ポスト「京」萌芽的課題推進WGヒアリング(平成31年1月28日)での指摘事項対応

推進WGヒアリング(平成31年1月28日)における平成30年度の研究進捗状況・成果の報告に対して、WG委員から「全体としてのまとまりをより明確にしていただければと感じるが、個別課題ごとには十分な成果があるので、着実に研究を進めていただきたい」の評価を頂くと共に3点のコメントをいただいた。下記にコメントに対する対応について記載する。

#### ① ソフトを含め社会に還元することを今後も十分に考慮して欲しい

サブ課題Aでは開発中の亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を使うことが可能な古典分子動力学シミュレータ「LASKY0」を、既に企業数社に提供し、実際に使用してもらっている。さらに、企業から

機能や使い勝手に関してコメントを頂き、開発に反映している。現在、企業に対する市販化の検討を開始している。サブ課題Bでは、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)の一般公開を目標に開発を進めている。サブ課題Cでは、局在軌道、オーダーN法を用いた第一原理計算プログラムCONQUESTをMITライセンスにより、本萌芽的課題終了時まで公開予定である。サブ課題Dでは、テンソルネットワーク法でのコードを、GPLでのソースコード公開を行い、一般の研究者の利用に供する予定である。また、全国共同利用スーパーコンピュータ上にもインストール予定である。

また、本萌芽的課題の遂行により、サブ課題Aでは人類の生命を脅かす破壊現象と地震のマルチスケール性の理解を促進し、安全・安心社会の構築に貢献する。サブ課題Bでは、気象予測、機械設計の改善、火山活用の予測に貢献する。サブ課題Cでは、機能性ガラス新材料および高レベル放射性廃棄物処理法の開発に貢献する。さらに、サブ課題Dでは量子通信素子や量子コンピュータの設計に貢献する。

## ② 全体としてインパクトのある成果は何になるのかを考えてもらいたい

本課題では、異分野の研究者が相互に連携・協力する学際連携を推し進めることで、課題全体として「インフォメーション・ディスティレーション」という新しい学問分野体系の確立を目指す。具体的には、様々な分野における多様なシステムの理解や解明のためには、莫大な情報から有用な部分のみを引き出すことが本質的であることが、近年ますます明確になってきている。その有用性は、ポスト「京」のみが成しうるような超大規模な計算科学シミュレーションにおいて、最も顕著に表れる。そこで本研究課題では、情報抽出に基づく計算手法を系統的に開発するとともに、異分野間の連携課題にも応用し、マルチスケール現象の理解へと展開する新しい学問分野体系「インフォメーション・ディスティレーション」の確立を目的とする。本課題では、上記手法の確立により、材料の破壊、地震、大気・海洋の変動、火山噴火、マグマ、観測困難な極限物性など多様な極限を探求する科学に対して、従来は解決することができなかった異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題を解決することで、複雑で階層的な自然現象が引き起こす人類的な課題の解決を実現する。最終年度となる令和元年度は、サブ課題ごとの研究成果、サブ課題間連携の成果に加え、特にこの「インフォメーション・ディスティレーション」という新しい学問分野体系の確立に注力して、本萌芽的課題事業を推進する。令和元年度の研究計画を、「インフォメーション・ディスティレーション」という新しい学問分野体系の確立に注力するよう、平成31年3月2日に第6回サブ課題代表者会議を開催し、議論を行った。

## ③ 統計的アプローチによる成果をぜひ挙げていただきたい

最新の統計的アプローチによる成果を下記に記載します。材料内の断続的な塑性変形と断層の破壊現象の地震において、その個々の規模と発生頻度の関係がベキ分布という共通した統計的性質を示すことが報告されている。この材料と地震に共通する統計的性質は、「傾き」と「最大イベントサイズ」の2つのパラメータで特徴づけることができるため、これらのパラメータの材料の構造や組織依存性を明らかにすることは、断層の破壊メカニズムの理解にも寄与できる可能性があり、重要である。そこで原子半径の異なる二種類の原子をある割合で混ぜ合わせることで、結晶構造から非晶質構造まで多様な原子構造を連続的に表現する原子モデルを開発し、各原子モデルの機械的性質と統計的性質の関係を調査した。まず、作成した原子モデルは大別すると、結晶モデル、非晶質モデル、結晶・非晶質混在モデルの3つに分類できた。次に各モデルに対して圧縮変形解析を実施したところ、結晶・非晶質混在モデルの流動応力は、結晶や非晶質モデルよりも小さい値を示し、弱化傾向を示した。その原因の一つとして結晶と非晶質の異相界面に着目し、結晶と非晶質の積層モデルの変形シミュレーション解析を実施した。

非晶質領域で形成されたフォースチェーン(原子間の力の繋がり)を起点として異相界面から転位が放出していることを見出し、そのことが混在構造モデルの弱化を引き起こす一つの要因であることを見出した。これは異相界面の高い転位源能力により大きな応力を材料組織内に蓄積することが難しいことから理解できる。更に、各モデルの統計的性質を調べたところ、流動応力の小さな混在モデルの「最大イベントサイズ」は小さな値を示し、そして、延性特性に関係する断面減少率と統計的性質の「傾き」の大きさに相間が確認でき、材料の機械的性質と塑性現象に内在する地震と共通する統計的性質に相関性が存在する可能性を確認した。このように、材料の構造と組織に強く影響を受ける機械的性質と変形素過程の集団挙動を反映した統計的性質には相間性があることが確認できたため、これらの知見を通じて断層の破壊メカニズムの理解が深化し、更には、材料と地震に共通する統計的性質に基づいたマルチスケールの変形・破壊現象の統一的理解を行うことが可能になることが期待できる。

#### 5) 4年間の実施計画書の修正

課題最終年度となる平成31年度(2019年度)においてサブ課題Aが最終目標とする「材料破壊と地震に共通する統計法則の解明」の確実な達成に向けて、材料破壊と断層破壊に共通する破壊現象の階層性をより深く解明することが重要となる。ここで、大阪大学大学院理学研究科では、断層破壊ダイナミクスのシミュレーションに関して、「京」を活用した境界積分法に基づくアプリの高速化、境界積分法に基づくアプリに材料科学で知られている摩擦法則の導入、大小様々な屈曲構造が入れ子状になった複雑形状断層の地震発生シミュレーションの実現などの多大な実績があるため、大阪大学大学院理学研究科を研究体制に組み込み研究を加速することとした。なお波多野恭弘氏は大阪大学大学院理学研究科において研究を継続する。これを実施計画書に修正反映し、平成31年2月18日に文科省に提出を行い、平成31年3月6日に萌芽的課題サブWGにおいて承認された。

#### 6) 平成31年度業務計画書の作成

課題最終年度となる平成31年度(2019年度)の業務計画書の作成を行い、平成31年2月8日に提出した。業務計画書の作成のために、当該年度における成果の目標及び業務の方法、実施体制、予算、必要計算資源について、課題責任者とサブ課題代表者を中心に、各分担機関と協力機関とともに議論を重ね、策定を行った。東京大学地震研究所に代わり大阪大学大学院理学研究科を平成31年度(2019年度)より分担機関とする変更を行った。あわせて、平成31年度(2019年度)の年間の会議や研究会、公開シンポジウム、公開ワークショップなどの予定を策定した。

#### 【広報・広聴活動】

##### 1) 第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム[平成30年7月3日、東北大学金属材料研究所]

ポスト「京」萌芽的課題の「基礎科学の挑戦」と「極限マテリアル」における研究進捗について、東北大学金属材料研究所にて公開シンポジウムを開催した。「基礎科学の挑戦」からは各サブ課題の進捗と体制、サブ課題内連携研究、サブ課題間連携研究を含む、計18の発表が実施された。「極限マテリアル」からは、計4つの発表が実施された。本シンポジウムは公開行事として実施し、プロジェクトの参画者以外からも多数の参加を頂き、参加者は企業研究者24名を含む94名であった。また、研究発表に

に対する産業界からの期待を、3人の民間企業の技術者幹部からコメント頂き、3人の本課題アドバイザーから講評を頂いた。

2) 第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ  
[平成31年1月10日、ステーションコンファレンス東京]

ポスト「京」の萌芽的課題の平成30年度までの研究進捗について、各分担機関の若手研究者から研究発表を実施し、積極的な質疑応答、討議を実施した。「基礎科学の挑戦」からは各サブ課題の進捗と体制、サブ課題内連携研究、サブ課題間連携研究を含む、計13の発表が実施された。「極限マテリアル」からは、計2つの発表が実施された。本ワークショップは公開行事とし東京で実施し、プロジェクトの参画者以外からも多数の参加を頂き、参加者は企業研究者・一般研究者12名を含む計69名であった。最後に講評を本課題アドバイザーの3人から頂いた。

3) The 9th International Conference Multiscale Materials Modeling Multiscale Simulations of Catastrophic Phenomena: Toward Bridging between Materials Fracture and Earthquake シンポジウム[平成30年11月1日～平成30年11月2日、大阪府立国際会議場]

国際会議 The 9th International Conference Multiscale Materials Modelingにおいて、材料破壊と地震の一般性、共通性、非類似性などを議論するための理論的および計算科学的研究に焦点を当てたシンポジウムを開催した。特に、原子レベルからマクロスケールまでの材料破壊ならびに地震、雪崩、滑り台、火山噴火、大型構造物の破壊などの多様なカタストロフィックな自然災害に関するマルチスケールシミュレーションアプローチに焦点を当ててシンポジウムを開催し、22名の発表者の他、多数の研究者の聴講があった。

4) 重点領域7サブ課題7F・萌芽的課題サブ課題A・サブ課題B 合同研究会 [平成31年3月28日、阪大・基礎工]

「原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用」に関して、ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題A「破壊とカタストロフィ」、サブ課題B「相転移と流動」とポスト「京」重点課題7F「次世代機能性化学品」の合同で研究会を開催した。双方の研究内容について説明することで、研究内容について討論を行うとともに、共同研究や連携課題の可能性について議論を行った。9名の発表者の他、多数の大学院生の参加があった。

5) 第1回サブ課題C-D間連携研究会[平成30年10月12日、理化学研究所]

Tensor network (TN)は、複雑なシステムを理解する上で最も重要な概念の1つである。最近では、機械学習 (ML) と量子科学 (QM) の分野でますます普及している。公開でワークショップを開催し、各分野の優秀な研究者がそれぞれの分野について紹介を行い、意見を交換した。参加者は18名であった。

6) 第6回極限物質科学研究会[平成31年1月18日、理化学研究所]

サブ課題Cが主催となり、“Water and Ice”をテーマに極限物質科学研究会を公開で開催した。最新の研究について発表し、意見を交換した。参加者は6名であった。

7) 第7回極限物質科学研究会[平成31年2月4日、理化学研究所]

サブ課題Cが主催となり、“Silicate Melts and Glasse”をテーマに極限物質科学研究会を公開で開催した。最新の研究について発表し、意見を交換した。参加者は7名であった。

8) 第2回サブ課題D全体研究会 (サブ課題Dワークショップ) [平成30年10月12日、東京大学柏の葉キャンパス駅前 KOIL]

サブ課題Dとして公開でワークショップを開催した。「1) テンソルネットワーク法のアルゴリズム開発, 大規模並列化」「2) テンソルネットワーク法の応用」「3) 量子ダイナミクス, 量子もつれネットワーク」「4) 他のサブ課題との連携」の内容について発表及び討論を行い、研究や連携の推進を図った。参加者は29名であった。

9) Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA2018-2019) [平成30年12月3日～平成30年12月6日、理化学研究所 計算科学研究センター]

当該分野の最先端で研究を進めている若手の研究者を一堂に集めて、テンソルネットワークの高度化のみならず当該研究課題に資する情報交換を通じて、将来取り組むべき挑戦的課題について議論を展開することを目的とした国際ワークショップを開催した。参加者は61名であった。

## ② サブ課題の本格実施研究

本業務は、以下の4つのサブ課題のアプリケーション開発・研究開発で構成する。A. 破壊とカタルフィ、B. 相転移と流動、C. 地球惑星深部物質の構造と物性、D. 量子力学の基礎と情報。

この萌芽的課題を構成する4つのサブ課題A～Dに関し、サブ課題代表者が中心となり、分担機関、および、協力機関などに所属するメンバーの協力を得て、策定した目標に向けて研究を実施した。研究を実施するために、サブ課題会議や研究会、合同研究会等の場を設けて、研究成果や進行状況を共有し、議論を行った。また、平成31年度に行う各サブ課題研究開発の実施計画の策定も行った。

各サブ課題において、実施した研究項目は以下の通りである。

## サブ課題A 破壊とカタストロフィ

### サブ課題A統括（サブ課題A代表者：久保百司（東北大金研））

破壊現象は、材料の場合は原子レベル( $10^{-10}\text{m}$ )から人工構造物(数百 m)の大きさまで、断層破壊(地震)の場合は原子レベルから地殻の大きさ(数百 km)までに及ぶマルチスケールな現象である。材料や地殻のマクロな破壊現象が、それぞれどのような階層メカニズムをもって生起しているかについて、現代科学はまだその答えを持ち合わせていない。本サブ課題Aでは、主に原子レベルの材料研究者と地震メカニズム研究者とのユニークな学際連携により、材料及び地震における破壊メカニズムの共通点を探り、それぞれの破壊現象の理解に供するとともに、その極限として、材料から地球規模までのマルチスケール破壊現象の計算モデルの提唱を行うことを目的としている。その成果は、よりよい材料の開発と地震現象の理解と防災に寄与するものと期待される。平成30年度の研究計画として、以下の項目をあげた。(1) 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算、(2) 断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション、(3) 亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション、(4) 変形・破壊現象に内在する統計性の検討。これに対して、平成30年度の成果として以下を得た。

第一に、これまで開発してきた古典分子動力学シミュレーションコード「LASKYO」に対して、結合次数の配列情報へのメモリアクセスの最適化を行うことで、1億原子以上の大規模計算を可能とし、亀裂先端の化学反応・亀裂生成に加え、腐食・変形をも扱えるように発展させた。約1億原子の大規模多結晶チタンに対して引張り計算を行い、水蒸気環境下ではこれまでの小規模系では観察できなかった表面におけるすべりステップの形成による被膜破壊機構の解明を実現した。また、1億モノマー以上の大規模系を用いて、ポリマーの亀裂生成・破壊現象を扱える粗視化分子動力学シミュレーションコードも開発した。さらに、鉄鋼材料の液体金属脆化の詳細を明らかにするために、鉄に対する液体金属元素、水素、酸素の溶解エネルギー、及び、鉄の結晶粒界における吸着エネルギーを第一原理により計算した。その結果、鉄の格子や粒界における安定性が非常に強い場合と不安定性が非常に強い場合には脆化は生じにくく、中間的な性質の場合には脆化が生じやすいという傾向を明らかにした。

第二に境界積分方程式に基づく断層破壊シミュレーションコードに関して、現行のシミュレータでは摩擦係数が累積滑り量のみ依存する簡素化された摩擦法則を用いてきたが、「滑り速度に依存する摩擦法則」を実装した。さらに、凹凸構造が発達した断層では滑りが抑制され、非地震性のゆっくりした滑りが卓越すること、凹凸構造のもたらす実効的なブレーキを応力の次元で表すことで非地震性滑りを示す領域の増大を統一的に表すことができることを発見した。

第三に金属アモルファス材料にせん断負荷を与えることによる亀裂進展過程の分子動力学計算を行った。その結果、亀裂成長に伴って亀裂部の温度が上昇しており、せん断破壊で摩擦が生じていることを示した。さらに kinetic Monte Carlo 法を用いて、金属アモルファスのせん断応力のせん断速度依存性を検討したところ、ほとんどの温度でその値は正であるが、負になる時に力学的な弱化が起こり、それが構造全体の不安定化を引き起こし、局所すべり変形を引き起こすことを明らかにした。

第四に断続的な亀裂進展量の統計性の温度依存性とひずみ速度依存性の支配因子を明らかにするために、分子動力学法とモンテカルロ法を活用した。その結果、転位の放出を決定する熱活性化過程が温度依存性の支配因子であること、亀裂進展開始と停止に対する亀裂先端の応力場の影響がひずみ速度依存性を示す支配因子の1つであることを示唆した。さらに結晶構造と非晶質構造の異相界面の強い転位源能力が混在系の弱化傾向の一つの要因であり、応力降下量の統計性にも影響を与えている可能性を示した。

## サブ課題A 破壊とカタストロフィ

i) サブ課題A統括、および、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算

i-1) サブ課題A統括、および、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーション

### [研究実施体制]

代表者： 久保百司（東北大金研）

参加者： 鈴木通人、尾澤伸樹、大谷優介、宮崎成正（東北大金研）、樋口祐次（東大物性研）、許 競翔（上海海洋大学）

### [研究の背景と目的]

材料の破壊現象は、原子レベル( $10^{-10}\text{m}$ )から人工構造物(数百 m)の大きさまでに及ぶマルチスケール現象であるため、破壊現象を理解するためには、どのような階層メカニズムをもって破壊プロセスが生起しているかを明らかにすることが重要である。そのためには、まず材料破壊の初期過程である材料変形に対して、原子論的に亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形などをシミュレーションする必要がある。平成 28~29 年度は、古典分子動力学法に基づくシミュレーションコード「LASKYO」を、亀裂先端の化学反応・亀裂生成が扱えるように拡充するとともに、「京」上で 1000 万原子以上の計算を可能にした。そこで平成 30 年度は、上記シミュレーションコード「LASKYO」のさらなる高速化と最適化の実現により、「京」上で 1 億原子以上の計算を可能にし、より大規模系で原子論的に亀裂先端の化学反応、亀裂生成の解析を実現する準備を行った。さらに、1 億原子以上の大規模系モデルを活用し、腐食と変形が扱える新たなモデリング手法を構築するとともに、金属材料について亀裂先端の化学反応・亀裂生成に加え、腐食と変形の大規模分子動力学計算を実施することを目的とした。

### [研究成果]

① 1 億原子以上の大規模モデルを用いて、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱える古典分子動力学法に基づくシミュレーションコードの開発

平成 29 年度は、1000 万原子系のモデルを用いて多結晶の破壊現象についてシミュレーションを行ったが、1000 万原子系のモデルサイズでは現実の多結晶粒のサイズを定量的に再現することはできないという問題点があった。そこで、平成 30 年度は粒のサイズを 50nm とするため 1 億原子以上の大規模系に取り組み、金属の酸化や腐食などの化学反応が亀裂先端の亀裂生成メカニズムに与える影響を明らかにするとともに、材料の変形や化学反応が破壊を促進する応力腐食割れメカニズムを解明することを目的とした。平成 30 年度は、これまでに開発してきた亀裂先端の化学反応・亀裂生成を扱える古典分子動力学法に基づくシミュレーションコード「LASKYO」に対して、プログラム中の結合次数の配列情報へのメモリアクセスの最適化を行うことで、1 億原子以上の大規模モデルを解析することに成功し、腐食環境における原子スケールでの詳細な変形挙動の解析を「京」上で実行可能とした。

② 1 億原子以上の大規模モデルを活用した、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の解明

平成 30 年度は、開発コードの材料の破壊現象への応用例として腐食環境での多結晶チタン金属の粒界型割れプロセスに注力して研究を行った。チタンは航空機タービンなど高温高圧下における腐食環境での構造材料としても応用され、近年のタービンエンジンの燃費削減への要求により、高温高圧での腐食環境での使用に対して耐腐食性の向上が求められている。ここで、タービンプレードのように材料が引張応

力状態と腐食環境に置かれるとき、腐食反応とともに割れの感受性が極端に大きくなる応力腐食割れ現象が知られている。この応力腐食割れメカニズムの理解が、防錆防食技術の技術革新や高耐食性合金の研究開発、より正確な構造寿命予測や低荷重での予期せぬ構造物破壊事故を防ぐために必要である。ここで、応力腐食割れ現象を原子スケールで解析するためには、金属表面での水溶液による酸化といった腐食反応、変形による引張ひずみ負荷、および、き裂発生時においてき裂先端で生じる化学反応と塑性変形といった素過程を複合的に考慮する必要がある。そこで開発シミュレータを用いて、腐食環境における多結晶チタン金属の引張解析を行うことで変形挙動を検討し、化学反応が材料の破壊に与える影響を検討した。

多結晶金属はその粒径が20~100nm程度で最大の強度を持つことが知られ、チタンにおいては直径50nm程度のナノ多結晶材が開発されている[1]。ここで粒径50nmといったサイズを全原子モデルで再現するため、図6のような1億原子多結晶モデルを作成し、水環境中において引張解析を行った。引張時の粒界型割れ挙動および粒内の変形挙動の詳細を検討するため、局所ミーゼスひずみおよび結晶構造と転位の運動を解析した結果を図6に示す。引張ひずみ0.04において引張方向とほぼ垂直な面方向の粒界面と表面との間で初期のき裂が発生した。一方で真空モデルでは同一箇所より部分転位が生成し、粒内で塑性変形する挙動が見られた。このことより、金属表面で水との化学反応により形成された酸化膜は膜直下の金属同士の結合力を低下させることで割れを促進することが分かった。また粒内のHCP構造においてはこれまでに部分転位が運動しFCC構造の積層欠陥が形成されることが議論されているが[2]、大規模モデルにおいても表面や粒界といった欠陥から部分転位が生成し、粒内を運動することで積層欠陥を形成しつつ塑性変形する挙動を捉えた。さらに、高温温度や速いひずみ速度の条件下では部分転位の運動よりも粒界でのすべりが主な変形要因となり、表面においてすべりステップの形成による被膜破壊が生じた。この被膜破壊プロセスにより新生面が形成され新たな腐食反応面となり孔食などの腐食の起点となることが応力腐食割れの要因として実験的に知られているが[3]、従来の1000万原子以下のモデルでは明確に再現することができず、平成30年度の研究において1億原子以上の大規模モデルを用いることで表面におけるすべりステップの形成を初めて捉えることが可能となった。

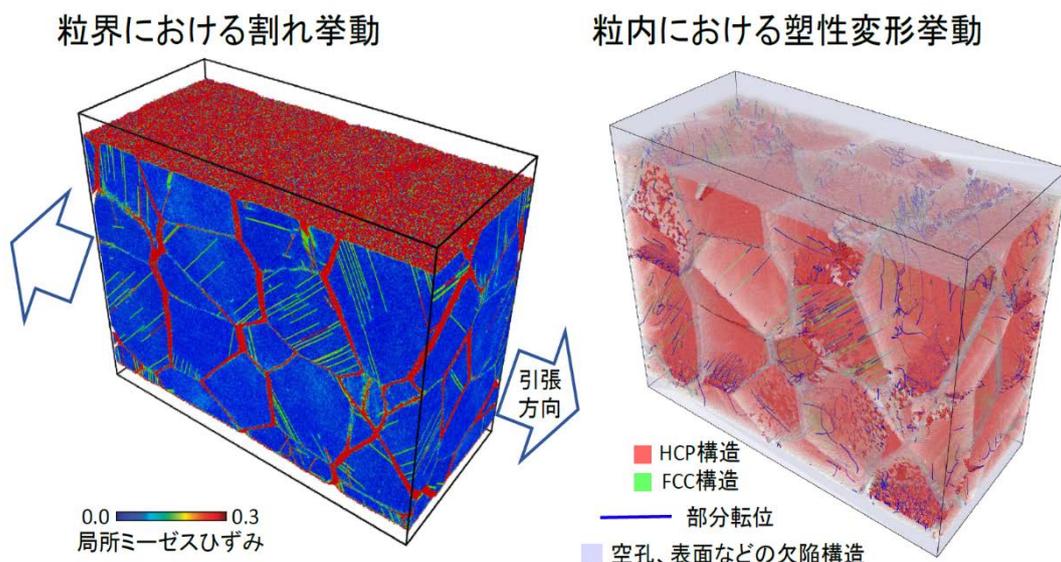


図6 水環境における多結晶チタンの引張時の粒界および粒内の変形挙動

③ 1億モノマー以上の大規模モデルを用いて、ポリマー材料の亀裂生成・破壊現象を扱うことが可能な粗視化分子動力学シミュレータの開発

平成 29 年度は 600 万～1200 万モノマーで構成されるラメラ構造(結晶性高分子の基礎的な構造)の破壊シミュレーションを実施し、結晶層の座屈・断片化現象と引張速度の違いによる空孔の生成の分岐現象を解明した。しかし、より大規模な計算が必要な空孔の成長プロセスが未解決であり、破壊現象の全容を明らかにするには至らなかった。そこで平成 30 年度は、1 億モノマーから構成される結晶性高分子の破壊現象を扱うことを可能とするために、開発済みの粗視化分子動力学シミュレーションコードの改良を行った。1 億モノマーの計算では、平成 29 年度までの計算に比べ粒子数、使用コア数ともに大幅に増加することから、初期条件の読み込み時間を減らすことが必須であり、さらに計算結果の出力データも膨大であることから、ディスクの負荷軽減も必要であった。そこで、入力ファイルの分割方法と結果の出力方法を「京」へ最適化し、出力結果の解析プログラムも改良した。さらに、大規模計算から得られた結果から空孔のサイズや形状を議論可能な解析プログラムも開発した。これは、当初の計画には無い研究成果である。

④ 1億モノマー以上の大規模モデルを活用した、ポリマー材料の亀裂生成・破壊プロセスの解明

これまでに開発したシミュレーションコードを用いて、ポリエチレンやダブルネットワークゲルの破壊プロセス解明に成功している[4-6]。平成 30 年度は結晶性高分子のポリエチレンの研究を実施した。

重工業や航空・宇宙産業では音速に近い速度における極限での破壊現象が問題となっており、実験では解明困難な分子スケールのメカニズム解明が急務である。そこで、1 億モノマーから構成されるラメラ構造を結晶方向に伸長し、大規模破壊シミュレーションを実施した。応力緩和より早く伸長されることから、アモルファス層で無数に生成された空孔が個別に成長した(図 7)。伸長に伴い高分子鎖が配向されていく様子も観察された。応力が緩和する伸長速度では、エネルギーを低下させるように空孔が球状に近いかたちで成長するのに対し、音速の伸長では密度の小さい箇所が緩和することなく空孔として成長していく過程を解明した。

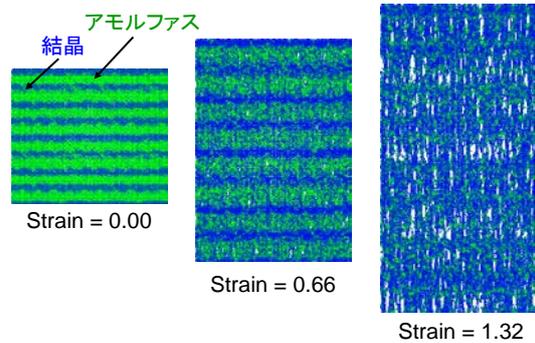


図 7 1 億モノマーから構成される結晶性高分子の破壊プロセス。

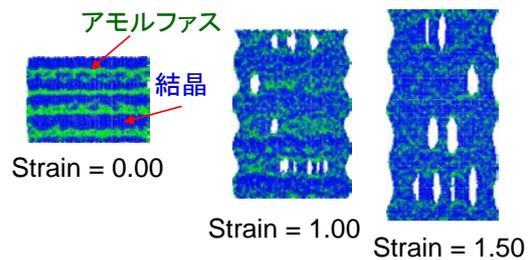


図 8 1500 万モノマーから構成される結晶性高分子の破壊プロセス。

次に、応力緩和する遅い伸長での空孔の生成と成長プロセス解明に取り組んだ。1500万モノマーから構成されるラメラ構造を結晶方向に伸長した。引っ張りに対して、アモルファス層から空孔が生成し、縦方向に成長した(図8、9)。空孔の周囲では高分子鎖が配向し、空孔のつながりが阻害された。一方で、結晶層は堅いブロックのように働き、結晶層を挟んで一つの空孔に成長する様子は観察されなかった。これはエラストマーにおいて空孔が球状に成長するプロセス[7]と、高分子ガラスにおいて高分子鎖が絡まりあいながら空孔が球状には成長しないプロセス[8]の中間的なプロセスと考えられる。大規模シミュレーションで得られた空孔のサイズ  $58,500 \text{ nm}^3$  は実験で観察可能なサイズ  $64,000 \text{ nm}^3$  [9] に近づいており、実験結果と比較可能な計算規模に近づいた。

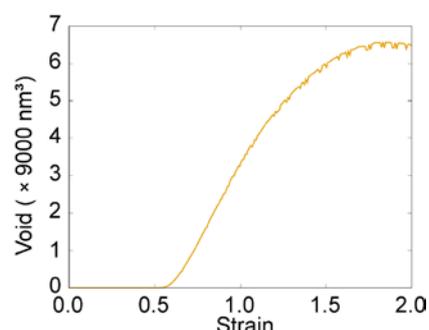


図9 ひずみに対する空孔の成長

#### ⑤ 材料破壊と地震との連携研究のための酸化ケイ素の摩擦過程の検討

材料破壊と地震の研究の連携を進めるために、平成29年度は断層の滑りをモデル化した  $\text{SiO}_2$  構造の摩擦シミュレーションを実施した。その結果、 $\text{SiO}_2$  の摩擦界面で誘起される水との化学反応によって潤滑膜が形成され、低摩擦をもたらすことを明らかにした。平成30年度は、これまでの研究を発展させ、水が断層の破壊強度に与える影響を明らかにするために、断層破壊をモデル化した  $\text{SiO}_2$  のせん断破壊シミュレーションを実施した。従来の実験研究から断層を構成する岩石は、水の存在下で破壊強度が低下することが知られているが、そのメカニズムは明らかになっていない。シミュレーションの結果、水が存在しない場合には、 $\text{SiO}_2$  は変形する一方、水がある場合には  $\text{SiO}_2$  を構成する Si-O 結合を切断する加水分解反応が起こることがわかった。加水分解反応の結果、 $\text{SiO}_2$  にせん断面が形成され、強度が低下することがわかった。これにより、地殻の間隙水との化学反応が断層を構成する岩石の破壊強度を低下させるメカニズムが明らかになった。これは当初の計画には無い成果である。

#### [参考文献]

- [1] I. Semenova, I. Timokhina, R. Islamgaliev, E. Lavernia and R. Valiev, *Metals*, 5 206 (2015). <https://doi.org/10.3390/met5010206>
- [2] M. An, Q. Deng, Li, Yulong H. Song, M. Su and J. Cai, *Materials & Design*, 127 204 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.04.076>
- [3] F.A. Champion, *Symposium on internal stresses in metals and alloys*, Institute of Metals, London, 498 (1948). <https://doi.org/10.1038/164296a0>
- [4] Y. Higuchi and M. Kubo, *Macromolecules* 50, 3690 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.6b02613>
- [5] Y. Higuchi, *Polym. J.* 50, 579 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41428-018-0067-1>
- [6] Y. Higuchi, K. Saito, T. Sakai, J. P. Gong, and M. Kubo, *Macromolecules* 51, 3075 (2018). <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.8b00124>
- [7] A. Makke, M. Perez, O. Lame, and J-L Barrat, *J. Chem. Phys.* 131, 014904 (2009). <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3148381>

[8] J. Rottler and M. O. Robbins, Phys. Rev. E 68, 011801 (2003).

<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.011801>

[9] S. Humbert, O. Lame, J. M. Chenal, C. Rochas, and G. Vigier, Macromolecules 43, 7212

(2010). <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ma101042d>

### i - 2) 亀裂先端の化学反応・亀裂生成の第一原理計算

#### [研究実施体制]

代表者： 山口正剛（原子力機構）

参加者： 板倉充洋、都留智仁、鈴木知明（原子力機構）

#### [研究の背景と目的]

材料破壊のメカニズム解明には、亀裂先端の振る舞いを原子論、電子論的に解明することが不可欠である。材料中の亀裂先端における原子の振る舞いは実験観察が困難であり、よく理解されていない。近年結晶粒界に沿って亀裂が生成・進展する粒界破壊に関して、粒界の原子間結合力(凝集エネルギー)の低下と粒界破壊の程度が密接に関わることが指摘されている。その理解を深めることは、材料破壊現象におけるマイクロからマクロまでのマルチスケールな理解を構築する上で基礎となる。そのため、より詳細な計算結果と実験を比較し理解を進める必要がある。本研究では鉄鋼の水素脆性を例題に挙げ、粒界の凝集エネルギー低下に関する詳細な第一原理計算結果と実験との比較を通して、破壊メカニズムの理解に迫ることを目的とする。

#### [研究成果]

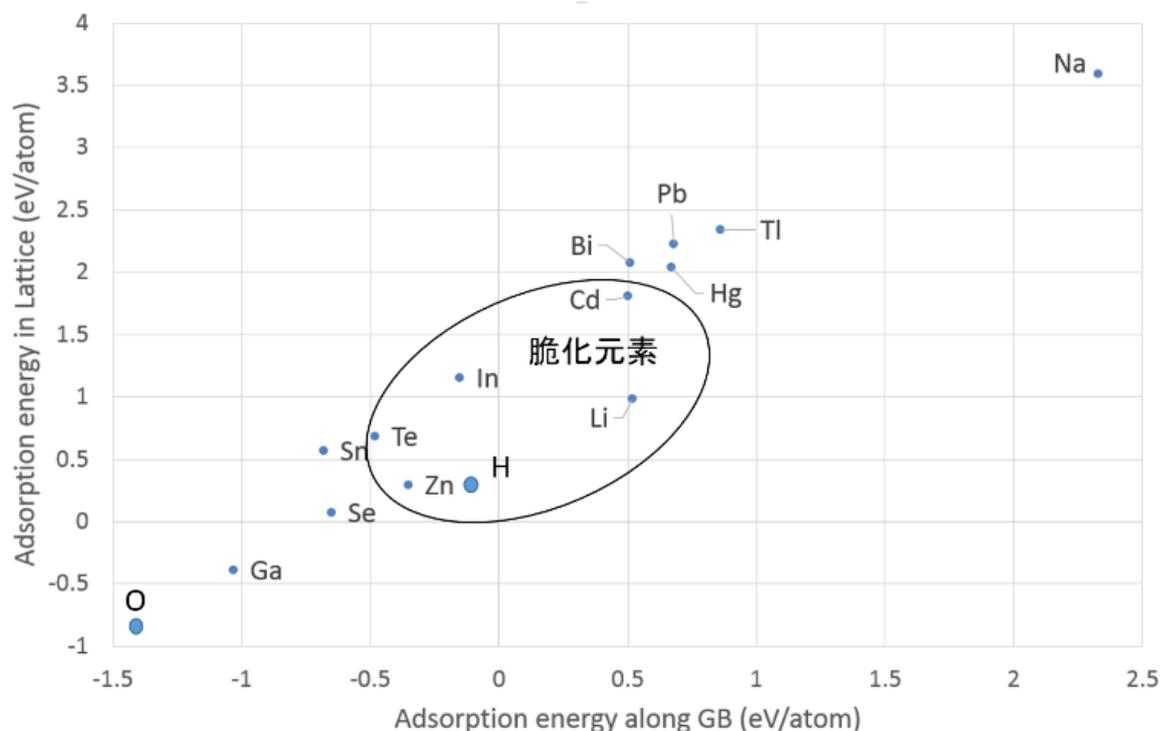


図 10 水素、酸素、液体金属元素の鉄格子と粒界における安定性と脆化の関係

水素ガス雰囲気における鉄の水素脆性においては、鉄表面における水素の解離吸着による表面エネルギー低下により破壊面の形成が容易になることが一つの要因ではないかと言われている。しかし水素ガス中に表面解離吸着のより強い酸素ガスを添加すると、脆化が抑制されることが知られている。つまり、表面吸着をもたらす元素と脆化の関係には明らかでない点が多い。そこで、特定の金属—液体金属元素の組み合わせにおいて生じる液体金属脆化[1]という現象に着目し、脆化との関係を調べた。液体金属脆化破面は水素脆性破面とよく類似していることが知られており、破壊メカニズムの共通性が指摘されている。

鉄に対する液体金属元素、水素、酸素の溶解エネルギー、及び、鉄の結晶粒界における吸着エネルギーを第一原理により計算した結果を図 10 に示す。図に示した元素はすべて鉄の表面に吸着し表面エネルギー低下をもたらすことも計算により判明しており、鉄の破面を安定化する性質を持っている。そして、脆化を起こしやすい元素と起こしにくい元素が、図の中でうまく区別されることが判明した。つまり、鉄の格子や粒界における安定性が非常に強い場合、逆に不安定性が非常に強い場合には脆化は生じにくく、中間的な性質の場合には脆化が生じやすいという傾向が見取れた。そして水素(H)は脆化をもたらすグループに属し、酸素(O)は属さないことが示され、脆化元素の鉄に対する安定性が脆化と関連していることが示唆された。

#### [参考文献]

[1] W. Rostoker, et al. Embrittlement by liquid metals (1960).

#### ii) 断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション

##### [研究実施体制]

代表者： 波多野恭弘（東大地震研）

参加者： 安藤亮輔（東大理）、齋藤拓也（東大地震研）

##### [研究の背景と目的]

地球科学的スケールで発生する地震現象を、原子分子スケールの知見を生かして包括的に理解するために、断層破壊ダイナミクスのシミュレーション研究およびそのためのコード開発を行っている。

① マクロな地震破壊ダイナミクスには断層の屈曲構造が大きな役割を果たしている。しかし実際の断層は大小様々の屈曲構造が入れ子状に連なっており、このような複雑な断層構造を精密にモデル化してシミュレーションしようとする、計算時間は爆発的に増大してしまう。したがってスパコンによる大規模な地震シミュレーション研究を通じて地震を理解するためには、コードの高速化が本質的課題となる。

② 断層破壊は剪断破壊であるから、そのダイナミクスは断層の摩擦法則にも大きく影響される。ゆえに、断層の摩擦法則をシミュレーションコードに適切に実装することが必要である。しかし、断層の摩擦法則は実験では直接検証できないため、これは地震学における積年の課題となっている。ここでの我々の戦略は、ミクロな材料科学的研究から得られた岩石・鉱物の摩擦特性に関する知見を元にして、より大きなスケール(断層)の摩擦法則へ変換していくというものである。その際には、断層面の凸凹を適切に考慮することが重要となるため、ここで述べたふたつの課題は相互に関連し合う。

##### [研究成果]

現行のシミュレータでは簡素化された摩擦法則(摩擦係数が累積滑り量のみ依存するというモデル)

が用いられているが、これは滑り速度依存性などを表現しておらず物質科学的な観点からは単純化し過ぎていたとも言える。そこで、平成 30 年度においては実験的によく確立されている「滑り速度に依存する摩擦法則」をシミュレータに実装した。これによってより現実的な断層モデリングが可能になった。実装後は、いくつかの代表的な断層配置についてシミュレーションを行い、摩擦法則の高度化により地震破壊ダイナミクスがより複雑になることを確認した。

まずは地震の準備過程に注目し、断層の粗さ(凹凸構造)に関する様々な条件を制御したシミュレーションを行った。その結果、凹凸構造が発達した断層では滑りが抑制され、非地震性のゆっくりした滑りが卓越する(地震性の高速破壊に至るまで地震波を出さずに解放するモーメントが増大する)ことを発見した。凹凸構造のもたらす実効的なブレーキを応力の次元で表すことで、非地震性滑りを示す領域の増大を統一的に表すことができることも発見した[1]。同様に、地震の準備過程における応力摂動の効果を調べるシミュレーションも行った。平成 30 年度では断層面上の剪断応力に弱い周期的時間変動が乗った場合を調べ、地震発生率が摂動の強度に対して指数関数的に応答することを確認した。

これらの研究とは独立に、従前のシミュレータを用いて、ニュージーランドにおける 2016 年カイクウラ地震をモデル化したシミュレーションもを行い、複数の断層セグメントにまたがる複雑な断層破壊ダイナミクスを再現することに成功した[2]。

#### [参考文献]

[1] S. W. Ozawa, N. Kame, and T. Hatano, *Geophys. Res. Lett.* 46, 636 (2019)

[2] R. Ando and Y. Kaneko, *Geophys. Res. Lett.* 45, 12875 (2018)

### iii) 亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション

#### [研究実施体制]

代表者： 尾方成信 (阪大院基礎工)

参加者： 君塚 肇、石井明男、謝 紅猷 (阪大院基礎工)

#### [研究の背景と目的]

材料の破壊現象において亀裂進展過程は、破壊を支配する重要過程であり、そのメカニズムを根本的に理解することは破壊抑制、制御の鍵となる。亀裂進展過程は根本的には原子レベル現象であり、分子動力学法を用いた動的解析が有効である。金属アモルファス材料中の亀裂進展過程は実験での直接観察が難しいこともあり、未だ明らかになっていない。本研究では金属アモルファス中の亀裂成長過程を原子レベルから明らかにすることを目的として、大規模原子シミュレーションを実施する。平成 30 年度は平成 29 年度に比べ 3 倍大きな金属アモルファス材料の原子モデルを作成し(平成 29 年度:100 万原子, 平成 30 年度:320 万原子)、作成した原子モデルに対してせん断負荷を与えることにより、金属アモルファス材料中の亀裂成長過程の分子動力学計算を実施した。

また金属アモルファスの局所せん断変形をモデル化したメソスケール kinetic Monte Carlo (kMC) 法を用いて金属アモルファスの引張りシミュレーションを行い、定常状態における平均せん断応力のせん断速度依存性を評価することで、金属アモルファスのせん断すべり過程におけるせん断応力とせん断速度との関係性を明らかにし、摩擦法則との関連性を調べた。

#### [研究成果]

## ① 亀裂成長過程の分子動力学計算

### I. モデルの作成と解析条件

図 11 に液体合金を急冷して作成した金属アモルファスの原子モデルを示す。このモデルは Cu, Zr を含む 2 元系金属アモルファスの平板モデルであり、組成比は Cu : Zr = 50 : 50 である。z 方向には周期境界条件を適用し、x, y 方向は自由表面としている。モデルのサイズは 164nm × 82nm × 4nm であり、総原子数は 320 万原子である。x = 0, y = 41nm の位置に長さ 15nm, 高さ 1nm の切り欠きを有する。原子間の相互作用を示す原子間ポテンシャルには EAM ポテンシャル[1] を使用する。モデルは液体合金を 3000 K より冷却速度  $5 \times 10^{10}$  K/s にて 5 K まで急冷して作成する。作成したモデル

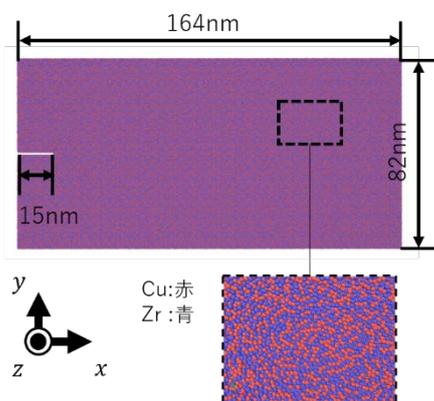


図 11 作成した金属ガラス原子モデル (Cu50Zr50)

の y 方向の上下面から 1nm に存在する原子群を剛体的に z 方向へ 10m/s の速度でそれぞれ逆方向に移動させることで、せん断ひずみをモデルに負荷し、亀裂成長挙動を観察した。モデルの初期温度は 5K とし、垂直応力は常に零になるように制御した。

### II. 解析結果と考察

図 12 に分子動力学シミュレーションにより得られたせん断ひずみ負荷開始より 500ps 時のモデルの yz 平板面内の局所的な原子ひずみ[2]および、温度の分布を示す。原子ひずみは初期構造を基準としてそこからのせん断ひずみと定義している。切り欠き部から原子ひずみの高い領域が帯状に形成されている。これはせん断亀裂の成長を示している。亀裂成長に伴って亀裂部の温度が上昇しており、エネルギーの散逸が生じていることがわかる。これは金属ガラスにおけるせん断破壊で摩擦が生じていることを示している。

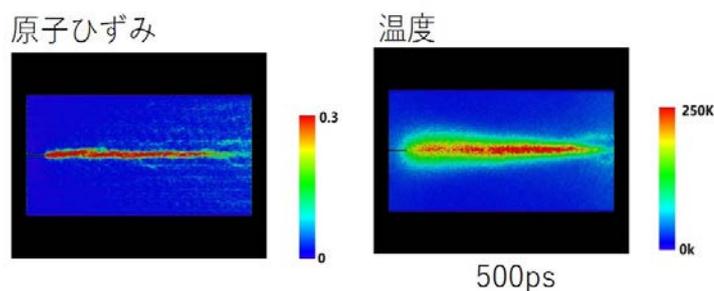


図 12 分子動力学シミュレーションにおける亀裂成長と温度上昇の様子(500ps 時)

これは金属ガラスにおけるせん断破壊で摩擦が生じていることを示している。

## ① せん断すべり過程のメソソスケール kinetic Monte Carlo シミュレーション

### I. モデルの作成と解析条件

金属アモルファスのせん断すべり過程におけるせん断応力とせん断速度との関係を明らかにするため、金属アモルファスの時効効果、せん断応力による構造励起、構造励起による弱化をそれぞれ考慮することにより、金属アモルファスの局所せん断変形モデル化した。これに基づく2次元メソスケールkMC法[3]を用いて、せん断すべり過程を解析した。一般的な分子動力学シミュレーションでは時間スケールに制約があり、実験レベルの遅いひずみ速度のシミュレーションを行えないが、本手法ではそれが可能である。200×120 nmの2次元平板金属アモルファスモデルに対して温度条件10–600K、ひずみ速度( $\dot{\epsilon}$ ) $10 \times 10^{-4}$ ,  $10 \times 10^{-2}$ ,  $10 \times 10^0$ 1/sの条件で引張りシミュレーションを行い、系全体のせん断応力の変化を観察した。定常状態における平均せん断応力( $\bar{\sigma}$ )を計算し、温度ごとにそのせん断速度依存性( $\frac{d\bar{\sigma}}{d\log_{10}\dot{\epsilon}}$ )を評価した。

## II. 解析結果と考察

図13に引張りを行う前のモデルと、温度120Kひずみ速度 $10 \times 10^{-4}$ 1/sの条件にて900秒間伸長した後のモデルの局所的なひずみの変化を示す。伸長方向はx方向である。伸長した後のモデルには帯状に大きなせん断すべりが発生していることがわかる。図14に温度ごとに $\frac{d\bar{\sigma}}{d\log_{10}\dot{\epsilon}}$ を

評価した結果を示す。ほとんどの温度でその値は正であるが、温度120K付近で負となっている。摩擦現象ではこのような負のすべり速度依存性が観察されることがあり、金属アモルファスのせん断すべりと摩擦現象との類似性を示している。またこの時原子構造の力学的な弱化(不安定化)が起きており、それが構造全体の不安定化を引き起こし、最終的に図13の局所すべり変形を引き起こしたと考える。

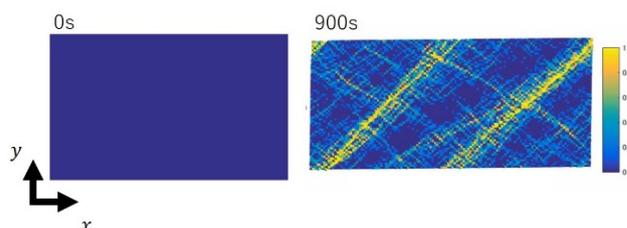


図13 kMCシミュレーションにおける亀裂進展の様子(原子ひずみ表示)

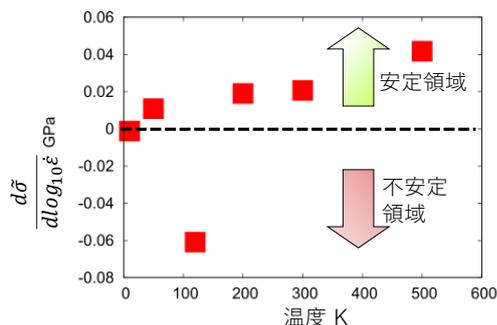


図14 温度ごとの平均せん断応力のせん断速度依存性  $\frac{d\bar{\sigma}}{d\log_{10}\dot{\epsilon}}$

### [参考文献]

- [1] Sheng, H. W., Kramer, M. J., Cadieu, A., Fujita, T., and Chen, M. W., Physical Review B, Vol. 83 No. 13 (2011), pp. 134118-1-20.
- [2] Shimizu, F., Ogata, S., and Li, J., Materials Transactions, Vol. 48, No. 11 (2007), pp. 2923-2927.
- [3] Zhao, P., Li, J. and Wang, Y., International Journal of Plasticity, Vol. 40, No. 1 (2013), pp. 1-22.

### iv) 変形・破壊現象に内在する統計性の検討

#### [研究実施体制]

代表者： 下川智嗣（金沢大理工）

参加者： 新山友暁（金沢大理工）、安田洋平（福井工業大学）

### [研究の背景と目的]

原子レベルの破壊現象とマクロな破壊現象(材料、地震)をつなぐマルチスケールの観点から、様々な構造や組織を有する材料の破壊(変形)現象における統計法則を導き出し、地震現象における統計法則との比較を通じてそれぞれの破壊現象の類似性や相違性を明らかにすることが重要である。平成30年度は断続的な亀裂進展量の統計性の温度依存性とひずみ速度依存性の支配因子を明らかにすることを目的とし、分子動力学シミュレーションとモンテカルロシミュレーションを用いて検討し、更に様々な構造や組織(単結晶、合金、多結晶、非晶質)が示す統計的性質の組織依存性を支配する変形機構を解明することを目的とし、結晶と非晶質が混在した組織の界面における挙動を詳細に調査した。

### [研究成果]

分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、単結晶材料内のモードIの亀裂進展現象を再現し、そこに現れる統計的性質を探求した。これまでの成果より、断続的な亀裂進展現象は、「亀裂先端のへき開現象によるき裂進展の開始」と「亀裂先端からの転位放出現象による亀裂進展の停止」を繰り返すことで生じていることがわかっている[1]。そして、様々な温度や負荷速度において個々の亀裂進展量の頻度分布は、断層の破壊によって生

じる地震の規模分布に現れるべき分布とは異なることが示された。さらに、この断続的な亀裂進展現象の支配因子を調査するためにへき開現象と転位放出現象を亀裂先端の応力場を考慮した熱活性化過程としてモデル化し、動的モンテカルロ(kMC)シミュレーションを実施した。そして、MDシミュレーションとkMCシミュレーションの結果の比較を通じて、断続的な亀裂進展量の支配因子を検討した。結果として、転位の放出を決定する熱活性化過程が温度依存性の支配因子であることが明らかとなった。また亀裂進展開始と停止に対する亀裂先端の応力場の影響がひずみ速度依存性を示す支配因子の1つであることが示唆された。

様々な構造や組織が示す変形中の応力降下量の統計性を分子動力学計算を通じて検討してきているが、平成29年度において、応力降下量の統計性の組織依存性を示した。地震においてもベキ指数が地域や本震前後で変化することが知られており、平成29年度で用いた解析モデルが示すベキ指数の組織依存性を支配する変形機構を明らかにすることは重要である。そのため、強度の弱化傾向を示した結晶と非晶質の混在構造の変形機構の支配因子をその結晶・非晶質界面に着目して検討した。非晶質領域において原子間に生じる反発力は鎖状に繋がっており、外部負荷のあるネットワーク組織で担っていることが確認できた。これはフォースチェーンと呼ばれ、粉体や非晶質体の特徴的な現象である。そのため結晶と非晶質の界面近傍の結晶領域には、非晶質領域のフォースチェーンの終点が現れ、外部負荷の増加に伴いそれを起点に転位が結晶領域に放出する現象を確認した(図15)。つまり、結晶構造と非晶質構造の荷重の担い方の違いに起因した力場の不連続性が有効な転位源として機能したことになる。この異相界面の強い転位

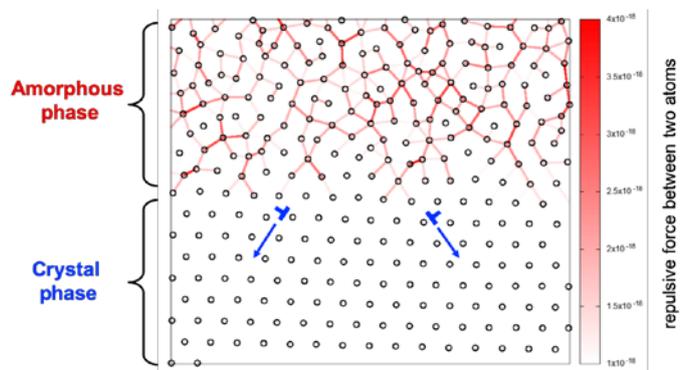


図15 結晶・非晶質界面からの転位の放出現象

源能力が混在モデルの弱化傾向の一つの要因になっている可能性が考えられる。さらに、応力降下量の規模は変形素過程の雪崩的な伝播挙動に強く影響を受けるため、この異相界面の特徴的な現象は応力降下量の統計性にも影響を与えている可能性があることが示唆された。

#### [参考文献]

- [1] 新山友暁、下川智嗣、藤元大志、単結晶材料におけるモード I き裂の断続的な進展ダイナミクス、材料, 67 卷 (2018) 2 号 p. 222-228.

## サブ課題B 相転移と流動

サブ課題B統括（サブ課題B代表者：川勝年洋（東北大院理））

サブ課題Bでは、相転移と流動とがカップルした結果生じる複雑な混相流動を、超並列分子動力学シミュレーションおよびマルチスケール・シミュレーションの手法を用いて解析するための方法論とソフトウェアの開発を進めてきた。

サブ課題Bの代表機関である東北大院理のグループでは、マクロな流動とマイクロな分子スケールの現象とを並列して解くことのできるシミュレーション・プラットフォームとして、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)を開発してきた。平成30年度は、MSSPの2次元プロトタイプ・シミュレータを「京」コンピュータや東大物性研・スーパーコンピュータ等に移植し、大規模なベンチマークテストを実施し、種々の流動現象に関して実験との定量的な対応や分子動力学シミュレーションとの定性的な比較を行った。具体的な対象としては、粘性流体、粘弾性流体および弾塑性体のそれぞれの場合に対する構成方程式のモデルをマイクロシミュレータとして作成し、MSSPに組み込むことで、障害物を過ぎる流れに生じるカルマン渦列やクラックの進展等の現象をシミュレーションし、実験および分子シミュレーションと比較した。粘弾性流体(希薄高分子溶液)については、約10億粒子を用いた大規模シミュレーションによって、実験系において計測された障害物の感じる粘性抵抗係数や障害物後方の振動流速のパワースペクトル等の物性値を定量的に再現することに成功した。これらのシミュレーション結果は、東大グループの実施する超並列分子動力学シミュレーションの結果とも定性的に整合した。また、マルチスケール・シミュレーションのMicroscopic Simulator (MicS)として有効な絡み合い高分子モデル(Slip-Linkモデル)を改良し、高ひずみ速度領域で定量的に正しい計算手法を開発した。さらに、弾塑性体のシミュレーションについてはサブ課題A-B連携の項目で詳しく述べるが、MSSPを弾塑性体の構成方程式に対応させることで障害物による亀裂進展過程をシミュレートし、阪大基礎工のグループの分子動力学法による亀裂進展のシミュレーションとの連携の方法の確立に向けてMSSPの改良を進めた。また、3次元のMSSPに関しては、弾塑性体の亀裂進展のモデルに関して、系の厚み方向の自由度を取り込んだ定式化に着手した。

サブ課題Bの分担機関である東大物性研のグループは、平成29年度までに開発してきた超並列分子動力学シミュレータを、多成分系が扱えるように拡張し、不純物がキャビテーション(気泡生成)に与える効果について調べた。その結果、不純物を含む系においてはキャビテーションの生成率が劇的に向上することがわかった。また、超並列分子動力学計算と上記のMSSPプロトタイプの結果の比較・検証の結果、高分子の添加によるカルマン渦の放出周期の増大など、高分子の添加効果について分子動力学シミュレーションとMSSPのシミュレーションが定性的によく一致する結果を与えることを確認できた。また、流動下で障害物表面にキャビテーションが生成する過程を扱うことのできるシミュレーション・コードの開発を進め、キャビテーション発生のための必要条件を求めた。キャビテーションの発生により、カルマン渦は障害物からより後方に離れたところで形成されることと、障害物での揚力振動が抑制されることなどが明らかになった。

サブ課題Bのもう一つの分担機関である九大院工のグループでは、流体機械内部などで発生し得る気液相変化を伴うキャビテーション流れを対象としたうえで、キャビテーション特有の様々な素過程をモデル化した数値流体力学(CFD)計算を、二次元縮小拡大流路や単独翼周りの乱流場に対して行い、物理的に妥当な結果を得た。また、分子動力学シミュレーションによる気泡初生の生成則の計算結果を反映した

マルチスケール初生モデルを新たに構築し、東北大学で開発されているマルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)との結果比較を可能とした。

### サブ課題B 相転移と流動

i) サブ課題B統括、および、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)の開発、および、複雑流動のシミュレーション

#### [研究実施体制]

代表者： 川勝年洋(東北大院理)

参加者： 村島隆浩、森井洋平(東北大院理)、寺田弥生、芝 隼人(東北大金研)、  
小屋口剛博(東大地震研)、伊藤伸泰(東大院工)、本田 隆(日本ゼオン)、  
大西 領、松田景吾(JAMSTEC)、山本量一、谷口貴志(京大院工)

#### [研究の背景と目的]

サブ課題Bの代表機関である東北大院理のグループでは、マクロな流動を粒子描像にもとづく流体力学モデル(Smoothed Particle Hydrodynamics; SPH)を用いて解く一方で、SPHの各流体粒子にミクロな分子スケールのモデル(Microscopic Simulator; MicS)を埋め込むことで、マルチスケールの流動シミュレーション・プラットフォームMSSPを開発している。異なる流体粒子に埋め込まれた個々のMicSシミュレータは、それぞれSPHのレベルを通じて相互作用するだけなので、基本的に互いに独立であり、効率的な並列化が可能である。また、MSSPでは、MicSとして種々のシミュレータが容易に入れ替えられるように設計されており、多様な複雑流動現象に対して適用可能である。

#### [研究成果]

平成30年度は、HPCIの計算資源を用いて「京」コンピュータおよび東大物性研のスーパーコンピュータ上で、大規模なベンチマークテストを実施し、現実系の実験との定量的な対応や分子動力学シミュレーションとの定性的な比較を行った。具体的な対象としては、粘性流体、粘弾性流体および弾塑性体のそれぞれの場合に対する構成方程式のモデルをマイクロシミュレータとして作成し、MSSPに組み込むことで、障害物を過ぎる流れに生じるカルマン渦列やクラックの進展等の現象をシミュレーションし、実験および分子シミュレーションと比較した。図16に示すのは、粘性流体および粘弾性流体(希薄高分子溶液に相当)の一樣流中に

円筒形状の障害物を置いたときに、流れの下流に生成されるカルマン渦列である。この図および流速のパワースペクトル分析により、高分子を添加したことによる、渦列の生成の振動数の低下や障害

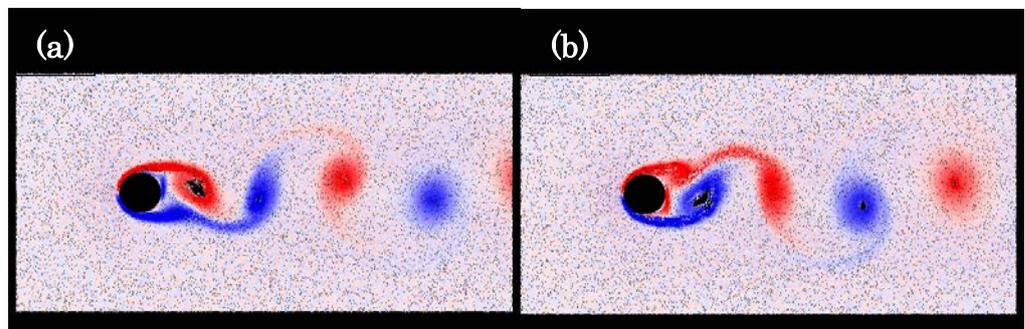


図16 一樣流中に置かれた円筒状の障害物の後方で発生するカルマン渦列のMSSPによるシミュレーション。(a)ニュートン流体および(b)線形粘弾性流体のそれぞれの場合。

物に作用する粘性抵抗力および揚力が低下すること、さらには、その定量的な数値が実際の実験の数値と一致することも確認できた。これらのシミュレーションにおける MicS としては、ニュートン流体および線形粘弾性流体の構成方程式を利用するものに加えて、各流体粒子の内部に 200 個~1000 個程度のダンベル状の分子(高分子を 2 つの球がばねで結ばれたものとして近似したモデル)を埋め込み、応力の時間変化をその場で時々刻々計算するマルチスケール・シミュレーションも行っており、構成方程式のモデルを用いる場合と定量的に一致する結果が得られた。この計算には、最大約 10 億個の粒子が使用されている。また、このカルマン渦列のシミュレーション結果は、東大グループの実施する超並列分子動力学シミュレーションの結果とも定性的に整合した[1]。

また、MicS の候補として高分子のマイクロモデルである Slip-Link モデルを考え、このモデルとマクロな流動を扱う SPH とを組み合わせたマルチスケール・シミュレーションを、ひずみ速度が高い領域 ( $1/\tau_d < \dot{\gamma} < 1/\tau_r$ ) にも適用できるように Slip-Link モデルを改良し、高ひずみ速度領域でのレオロジー予測及びマイクロな高分子の状態の予測を可能とする方法論を開発した[2]。

弾塑性体のシミュレーションについても、適切な構成方程式のモデルを各流体粒子に埋め込み、障害物の進行による亀裂の発展の過程をシミュレートできるようになった。この弾塑性体の MSSP シミュレーションは、阪大基礎工のグループの分子動力学法による亀裂進展のシミュレーションと連携することを目的としており、そのための MSSP の改良を進めた。詳しくはサブ課題間連携の項目で報告している。さらに、亀裂進展に関しては、系の厚み方向の自由度を取り込んだ 3 次元系へ MSSP を拡張する定式化に着手した。

## [参考文献]

[1] Y. Morii and T. Kawakatsu, in preparation.

[2] T. Sato and T. Taniguchi, “Rheology and Entanglement Structure of Well-Entangled Polymer Melts: A Slip-link Simulation Study”, *Macromolecules*, in press.

## ii) 分子動力学計算による複雑流体の解析

### [研究実施体制]

代表者： 野口博司（東大物性研）

参加者： 渡辺宙志、浅野優太（東大物性研）

### [研究の背景と目的]

1) キャビテーションは、高流速の液体中において、局所的な減圧によって生じる気泡の生成・成長を伴う流動現象である。キャビテーションが発生すると、流体機械に対して様々な影響を与えるため、そのメカニズムの解明は工学的に非常に重要である。しかしながら、マクロな流動場中でのマイクロな気泡核のダイナミクスを議論することが困難なため、キャビテーションの発生メカニズムは未だ十分な理解がなされていない。そこで、本研究では、キャビテーションを分子スケールから解析するために、カルマン渦キャビテーションの分子動力学(MD)計算を行った。

2) 計算機の動作周波数の向上が頭打ちになって久しく、近年の計算機の性能は主にコア数と SIMD (Single Instruction Multiple Data) 幅の増加に依存している。ポスト「京」の SIMD レジスタ幅は 512 ビットであることが公開されており、その性能を活かすためにはそのレジスタ幅を有効に活用したプロ

グラムを開発することが必要となる。我々は、この広いレジスタ幅を活かすため、任意の確率で各ビットが独立に1となるようなランダムビット列を高速に生成するアルゴリズムを考案し、実装した。

3) ナビエストークス方程式の離散化において、角運動量保存が失われることがよくあるが、その理由は理解されていなかった。その原因を明らかにし、どのような時に問題が起こりどう対処すべきか、有限体積法を例に用いて示した。

**[研究成果]**

1) 3次元のMDシミュレーションを行い、円柱周りの流動場の解析を行った。流体粒子間の相互作用にはLennard-Jones (LJ)相互作用を用いた。円柱はその表面上にLJ粒子を固定することで表現した。系には周期境界条件を課し、円柱の下流側にLangevin熱浴によって温度と速度の制御を行う領域を設けた。こうすることで、周期境界を通じて均一な流体を一様な流速で円柱の上流側から再流入させることができる。

図17の左側の図は  $T \approx 1.4T_c$  ( $T_c$ : 臨界点温度)における密度場のスナップショットである。円柱近傍で発生した気泡がカルマン渦に巻き込まれていることが見て取れる。また、この温度では、気泡はカルマン渦の放出サイクルに連動して、周期的に発生していることがわかった。図17の右側の図は、粒子間相互作用にWeeks—Chandler—Andersenポテンシャルを用いて計算した単相流の密度場のスナップショットである。単相流と比べると、混相流では円柱背後の再循環領域、及びカルマン渦中での密度の濃淡がはっきりしていることがわかる。

キャビテーションがカルマン渦の放出特性に与える影響を調べるために、ストローハル数  $St$  を求めた。図17の状況では、混相流、単相流ともに  $St \approx 0.2$  が得られたが、温度を下げると、混相流の場合は渦の放出に伴う揚力の振動が消失することがわかった。気泡の発生により渦の形成が阻害され、渦形成長さが著しく増加したためである。一方、単相流の場合は、温度を下げても粘性係数が僅かに変化のみに留まり、流動場にこのような変化は起こらない。したがって、キャビテーションがカルマン渦の形成を阻害することがわかった。

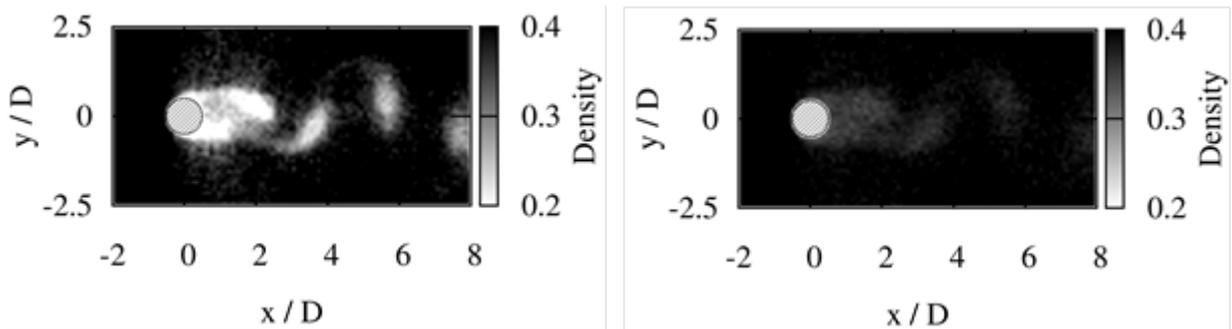


図17 温度  $T \approx 1.4T_c$  ( $T_c$ : 臨界点温度)、レイノルズ数  $Re \approx 100$  における密度場のスナップショット (左: 混相流、右: 単相流)。図中の斜線部は直径  $D$  の円柱である。

2) スピン系でマルチスピニングなどのテクニックを用いる際、各ビットを独立に確率  $p$  で1であるようなランダムなビット列が必要となる。我々は、そのようなランダムビット列を高速に生成する手法を考案した。我々が提案したのはBinomial-Shuffle法、Poisson-OR法、有限桁法の三種類と、そのハイブリッド法である。Binomial-Shuffle法は、予めいくつのビットが立つかを計算し、その後でビット

をシャッフルするアルゴリズムである。立つビット数の計算に Walker's Alias 法を、ビットのシャッフルに Floyd のサンプリング法を使うことで、全体で  $pN+1$  回の乱数生成でランダムビット列を生成できる。Poisson-OR 法は、 $N$  ビットのうちランダムに 1 ビットだけビットが立っているビット列を、 $k$  個論理和 (OR) を取るアルゴリズムである。これは Todo and Suwa のアルゴリズム [1] の特殊な例になっており、ビット列の数  $k$  をポアソン分布に従うように生成することで、指定の確率でビットが立つようにできる。この手法は  $-N\log(1-p)+1$  回の乱数生成を伴う。有限桁法は、確率  $p$  が二進数表記で  $n$  桁で表現される場合、 $n$  回の乱数生成でビット列を生成できる手法である。Binomial-Shuffle 法、Poisson-OR 法ともに、確率  $p$  の値が小さい場合に有効だが、我々は、まず有限桁法で  $p$  に近い確率  $p'$  を持つビット列を生成し、その差  $p'-p$  を Binomial-Shuffle 法もしくは Poisson-OR 法で補正するハイブリッド法を考案した。これにより、32 ビットであればたかだか 7 回、64 ビットでもたかだか 8 回の乱数生成で任意の確率  $p$  でビットが立っているビット列を生成できること示した。我々はこのランダムビット列生成アルゴリズムを Directed-Percolation のマルチスピンコーディングに応用し、スカラー実装に比べて 14 倍の高速化に成功した [2, 3]。このアルゴリズムは他のモデルへの応用も期待されている。

3) ナビエ・ストークス方程式は角運動量保存則のもとで導かれているが、ずれと体積変化の粘性項に縮退があるため、この方程式自体は角運動量保存を保証しない。そのため、この縮退項をそのストレス起源に基づいて分けて処理しなければ、角運動量保存が失われてしまうことを明らかにした [4]。角運動量非保存の影響はバルクでは生じず、境界において人工的なトルクとして現れる。粘性の異なる相を含む混相流においては、相境界で角運動量を保存されることが、正しい流れが得るため不可欠である。

#### [参考文献]

[1] S. Todo and H. Suwa, J. Phys.: Conf. Ser. 473, 012013 (2013).

[2] H. Watanabe, S. Morita, S. Todo, and N. Kawashima, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 024004 (2019).

[3] <https://github.com/kaityo256/rbs>

[4] H. Noguchi, Phys. Rev. E 99, 023307 (2019).

#### iii) 流体機械内部を想定したキャビテーション流れのモデリング

##### [研究実施体制]

代表者： 津田伸一 (九州大工)

参加者： 國嶋雄一 (九州大工)

##### [研究の背景と目的]

キャビテーションは、比較的高速な液相流において、その局所低圧場で発生する気泡の初生/崩壊を伴う現象であり、ポンプや水車に代表される流体機械、あるいは管路系などでしばしば発生し、性能・効率の低下や不安定流動をもたらす。キャビテーションは、気泡の初生/崩壊、膨張/収縮、蒸発/凝縮、合体/分裂をはじめとする様々な素過程から構成される現象であり、各素過程に対してこれまで多数の研究が展開されてきているが、気泡の初生条件およびそのメカニズムについては、依然として十分な解明には至っていない。この一因は、作動流体の物性にも依存して、気泡初生の空間スケールが  $1\text{nm}$  から  $100\mu\text{m}$  オーダの非常に幅広いスケール階層性を有することにあり、そのマルチスケール性を適切に考慮したキャビテーション気泡の初生予測、ひいてはキャビテーション流れの高度な数値解析手法が求められている。

## [研究成果]

平成 30 年度の研究成果は次の 2 点に集約される。すなわち、(1)気泡初生のマルチスケールモデルを構築したこと、(2)キャビテーション特有の様々な素過程モデル(多重プロセス型モデル[1])を適用した乱流計算手法が完成したこと、である。このうち(1)については、近年、分子動力学シミュレーションにより、オストワルド成長と呼ばれる微小気泡(気泡核)の粗大化が生じ得ることが示されている[2]ことを踏まえ、オストワルド成長でみられる気泡核のサイズ分布の自己相似性に着目したマルチスケールな気泡初生モデルを構築したことである。また、水の場合、本モデルが与える気泡初生の速度が、水中で計測されている気泡核のサイズ分布から予測される気泡初生の速度と、定性的に良い一致を示すことも確認された。一方、(2)については、流体機械内部流れの大規模乱流解析で実績を誇るソルバー、Front Flow/Blue(開発者は加藤千幸教授(東京大学))に対して、本研究グループの代表者が開発してきた多重プロセス型モデル[2]を導入し、適切な検証結果が得られたことである。図 18 は、二次元縮小拡大流路内のキャビテーションを計算した例であるが、従来の計算手法とは異なり、乱流渦の中で発生するキャビテーションについて、気泡数の時空間変化をはじめ、気泡サイズ分布の詳細まで捉えることが可能となっている。

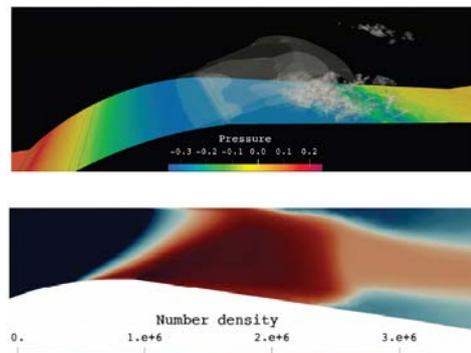


図 18 二次元縮小拡大流路内のキャビテーション解析 (上図：下壁面の圧力分布とキャビテーション気泡(白色)の様相, 下図：気泡数の空間分布)

## [参考文献]

- [1] S. Tsuda and S. Watanabe, CFD Simulation of Thermodynamic Effect Using a Homogeneous Cavitation Model Based on Method of Moments, Proc. 10th International Symposium on Cavitation, CAV18-05050, (2018).
- [2] H. Watanabe et. al., Ripening Kinetics of bubbles: A molecular dynamics study, J. Chem. Phys., 145, 124707, (2016).

## サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性

### サブ課題C統括 (サブ課題C代表者：飯高敏晃 (理研))

太陽系の惑星は、太陽に近く温度が高い方から地球型惑星、木星型惑星、天王星型惑星に分類され、それぞれ岩石(珪酸塩、Fe)、ガス(H<sub>2</sub>, He)、氷(H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>, CO<sub>2</sub>)を主成分としている。サブ課題Cではこのような地球惑星進化の理解に資する物質の極限環境下での物性研究と物質探索を行うことを目指す。

人類が生きる地表は、低温真空の宇宙空間と高温高压の地球深部のあいだにある薄い皮のような存在であり、地表に海と陸が共存し生命が誕生しうる適度な地表水の量は、地球深部鉱物に含まれる膨大な水(水素)との微妙なバランスの結果であると考えられるが、水の全地球的輸送現象を理解するために必要な地球深部での水の存在形態を我々は未だ良く知らない。そこで本課題では、地球深部における含水鉱物の振る舞いを正確に理解するために第一原理計算を行った。平成30年度には、平成29年度に発見した下部マントル条件で安定な含水鉱物高压相 MgSiO<sub>4</sub>H<sub>2</sub>について有限温度状態方程式、および非含水鉱物フォルステライト中での水の存在形態を第一原理計算により理論的に分析した。また、定温定圧経路積分型分子動力学法を用いて高压氷および含水鉱物における核量子効果を定量的に評価した。さらに、前述の含水鉱物高压相を考慮したプレート・マントルダイナミクスモデリングを開発し、海洋の寿命は地球形成初期に獲得した水の量に強く依存することを明らかにした。

珪酸塩鉱物は温度圧力等の環境条件により融解して珪酸塩融体(マグマ)となり、密度、粘性などの物性が大きく変化する。珪酸塩融体には数々の特異な物性挙動が知られているが、それらは珪酸塩融体の短距離構造だけでなく珪酸塩融体が持つ中長距離の多階層ネットワーク構造、ナノ不均一性に由来すると考えられる。しかし極限環境下の実験的測定、経験的古典分子動力学の適用には限界があり、密度汎関数法が扱える系の大きさは中長距離構造、ナノ不均一性の再現には小さすぎるので、その詳細は未解明のままである。そこで平成30年度は、密度汎関数法における原子数の限界を突破して数千~数万原子の計算を実現する極限環境オーダーN第一原理分子動力学法を開発・適用した。膨大なプロジェクトリーデータからその系に特徴的な原子構造を直観的に把握することは非常に困難なので、クラスター解析法、最小要素分割解析法、可視化解析法などを開発した。それらの解析法を用いて珪酸ナトリウム融体のナノ構造と拡散の関係およびムライト融体の特徴的構造を明らかにした。ネットワークの結合状態を探るための有力な実験手法であるX線ラマン散乱スペクトルに関する第一原理計算による解析法も発展させた。

地球惑星物質の研究は、数々の新しい物理の潮流を生み出してきた。例えば1935年にWignerとHuntingtonが指摘した巨大ガス惑星中心部で水素が金属化する可能性の指摘は、実験と理論による紆余曲折を経て2015年夏には硫化水素の155GPaの圧力下におけるT<sub>c</sub>=203Kの高温超伝導の実験的発見へと至った。そこでは結晶構造予測法が重要な役割を果たしたが、本課題でも密度汎関数法を用いて地球惑星深部物質の結晶構造相転移の研究を推進してきた。平成30年度は、スーパーアース深部での珪酸塩鉱物の結晶構造を明らかにするとともに、地球深部条件下でハロゲン化鉄が安定に存在することを明らかにした。高压下では結晶内の原子間距離が縮まるので電子が原子間を移動しやすくなる。一定以上の圧力下では電子が結晶内を自由に運動し、結晶が金属化する。金属化の指標は電子の励起に必要なエネルギー(バンドギャップ)がゼロになることであるが、GGA近似等をもちいた密度汎関数法ではバンドギャップを正確に評価できず、金属化圧力の正確な推定は困難であった。平成30年度は、この限界を乗り越える一つの方法である量子モンテカルロ法によるバンドギャップ評価の誤差解析を行った。

## サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性

### i) サブ課題C統括、および、地球惑星深部物質の構造と物性の研究

#### [研究実施体制]

代表者： 飯高敏晃（理研）

参加者： Le The Anh（理研）、河津 励（理研）、土屋 旬（愛媛大地球深部研、理研）、中川貴司（香港大学、理研）、池田隆司（量研、理研）、梅本幸一郎（東工大地球生命研、理研）、石河孝洋（物材機構、阪大院基礎工、理研）、前園 涼（北陸先端大院情報、理研）、本郷研太（北陸先端大院情報、理研）、吉本芳英（東大院情理）、立川仁典（横浜市大院生命ナノ、理研）、則竹史哉（山梨大院工、理研）、Nguyen Van Hong（HUST、理研）、Pham Khac Hung（HUST）、Mai Thi Lan（HUST）、福井宏之（兵庫県立大院理、理研）

#### [研究の背景と目的]

地球の進化過程やダイナミクスを理解には、水をはじめとした揮発性物質の地球内部における挙動を調べるのが重要なポイントである。本研究項目では地球深部への水の輸送に関わる含水物質の第一原理計算を行い、実物実験では困難な高温高压下での詳細な安定性や物性を決定することを目的とする[1]。水素など軽元素の自由エネルギーは零点エネルギーなどの原子核量子効果の影響を強く受けることが予想される。これらの原子核量子効果を調和振動子近似を越えて非調和効果を取り込んだ形で水素を含んだ鉱物の計算をするための手法として、優れた並列特性を持つ経路積分型分子動力学法を中心にプログラムの開発・適用を行う。

地球や系外惑星深部に相当する超高压条件下(0.1TPa~1TPa)における地球惑星構成物質の物性を、各種第一原理計算を用いて研究する。巨大なスーパーセルが必要になる不純物を含んだ系や、非調和効果が重要になると期待される高温系を「京」を用いて計算することにより、系外惑星内部のマントル対流シミュレーションに必要な物性量を計算することを目的とする。極限環境下における物質の結晶構造を自由度の高い複雑系でも高精度に特定できるようにするために、結晶構造予測法の開発及びそのコード開発を行う。GGA 近似等をもちいた密度汎関数法ではバンドギャップの正確な評価が困難であった。その困難を克服する方法の一つとして量子モンテカルロ法が期待されているが、幾つかの個別評価事例が知られているだけで、この手法に内在するバイアスの在りようや発生機構については殆ど知られていない。そこで、それらについての系統的な研究を行う。

本研究項目では、地球惑星進化の理解に資する極限環境下でのネットワーク性液体の構造と物性を研究するための多階層構造解析アルゴリズムの開発を目的とする[1]。ネットワーク性液体、とくに、珪酸塩融体(マグマ)に関する知見は、初期地球におけるマグマオーシャンなど地球科学上の数々の現象を理解するために究めて重要であるが、その特異な物性挙動は珪酸塩融体の短距離構造だけでなく中長距離の多階層ネットワーク構造、ナノ不均一性に由来すると考えられている。このようなナノスケールの構造に由来する物性に関する信頼性の高い解析は、数千~数万原子系分子動力学計算を行うことによりはじめて可能になる。そこで経験的古典分子動力学法およびオーダーN法密度汎関数法の連携により多階層構造解析アルゴリズムの開発と応用を進める。

また、第一原理計算などから解明された下部マントル条件で安定な含水鉱物を導入したプレートマントルダイナミクスモデリングを行い、海洋の寿命の推定を行う。

## [研究成果]

平成 29 年度に発見した下部マントル条件で安定な含水鉱物高压相  $\text{MgSiO}_4\text{H}_2$  の有限温度状態方程式[2]、および非含水鉱物フォルステライト中での水の存在形態[3]を第一原理計算により理論的に分析した。また、定温定圧経路積分型分子動力学法を用いて高压氷、ハイドレートおよび含水鉱物における核量子効果を定量的に評価した。さらに、前述の含水鉱物高压相を考慮したプレート・マントルダイナミクスモデリングを開発し、海洋の寿命は地球形成初期に獲得した水の量に強く依存することを明らかにした[4]。

スーパーアース深部での珪酸塩鉱物の結晶構造を明らかにする[5]とともに、地球深部条件下でハロゲン化鉄が安定に存在することを明らかにした。従来の GGA 近似等をもちいた密度汎関数法ではバンドギャップを正確に評価できず、金属化圧力の正確な推定は困難であった。この限界を乗り越える一つの方法である第一原理量子モンテカルロ法によるバンドギャップ評価の誤差解析を行った[6]。

第一原理量子モンテカルロ法では、大きなスーパーセルを取ることが計算コストの制約上難しいため、有限サイズの周期モデルで真値を見積もる上での「有限サイズ誤差補正」が問題となる。基底エネルギー値に対する誤差補正については、様々な原因系に対する多大な研究蓄積があり、補正スキームがよく確立している。エネルギーギャップ評価に対する有限サイズ誤差の素過程的な原因系として、励起子束縛エネルギーのシステムサイズ依存性が挙げられる。本研究では、様々な励起子半径を持つ系の当該依存性を評価する事で、誤差補正スキームの設計に資する知見を獲得した。励起子系を対象とした第一原理量子モンテカルロ法の此迄の研究蓄積から、励起子半径を自在に調整して束縛エネルギーを評価する研究実施体制を活用する事が出来る。図 19 に示されるように、誤差補正に重要となる依存性は、励起子半径とシステムサイズとの大小関係に大きく依存する。励起子半径は、系の相互作用遮蔽と大きく関わっており、遮蔽の効きが弱まるような低次元系、特に近年注目されている層状物質では、物質系ごとに励起子半径は大きく変化する。層状物質のギャップ値評価では、有限サイズ誤差補正に注意を要する事が結論された。本研究では、その他、ギャップ値評定に現れる節固定近似誤差や時間ステップバイアスなどの影響も詳細に研究した。節固定誤差については、スレータ・ジャストロ型試行関数での評価値と、バックフロー変換やマルチデターミナントを適用した場合の変化高とを比較する事で考察を展開した。その結果、拡散モンテカルロ法の適用を省略して、変分モンテカルロ法の範囲内でバックフロー自由度を緩和させる方法で十分な精度を達成できる事がわかった。また、時間ステップバイアスについては、ギャップ算定に要求される時間ステップ幅は、通常、基底エネルギー計算で必要となるようなステップ幅よりも、ずっと大きい値で十分で、計算コストが大きく軽減されるということを見出した。

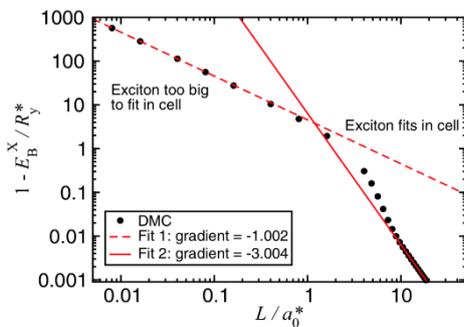


図 19 励起子束縛エネルギー評価値のシステムサイズ依存性 [1]。横軸はシステムサイズ、縦軸が束縛エネルギー値で、夫々、励起子ボーア半径、励起子リトベルグでスケールされている。量子モンテカルロ法で算定されるエネルギーギャップ値の有限サイズ誤差補正を設計する上で、当該依存性を知る事が重要な鍵となる。エキシトン半径とシステムサイズとの大小で依存性が大きく変わる様子が捕捉されている。

珪酸塩融体の圧力誘起構造変化を明らかにするためにネットワーク性液体のクラスター解析法、最小要素分割解析法、可視化解析法などを引き続き開発した。それらを用いて珪酸ナトリウム融体のナノ構造と拡散の関係[7]およびムライト融体の特徴的構造[8]を明らかにした。ネットワークの結合状態を探るための有力な実験手法である X 線ラマン散乱スペクトルに関する第一原理計算による解析法も発展させた。

なお、上記のうち参考文献[2-8]は平成 30 年度の本課題成果を含む。

#### [参考文献]

- [1] 特集：極限の探求：スーパーコンピュータ「京」による挑戦，高圧力の科学と技術 27 (2017).  
[http://www.jstage.jst.go.jp/browse/jshpreview/27/3/\\_contents/-char/ja](http://www.jstage.jst.go.jp/browse/jshpreview/27/3/_contents/-char/ja)
- [2] M. Nishi, J. Tsuchiya, T. Arimoto, S. Kakizawa, T. Kunimoto, Y. Tange, Y. Higo, and T. Irifune, Thermal equation of state of MgSiO<sub>4</sub>H<sub>2</sub> phase H determined by in situ X-ray diffraction and a multianvil apparatus, *Physics and Chemistry of Minerals* 45, 995 (2018). <http://dx.doi.org/10.1007/s00269-018-0980-z>
- [3] T. Qin, R. M. Wentzcovitch, K. Umemoto, M. M. Hirschmann, and D. L. Kohlstedt, Ab initio study of water speciation in forsterite: Importance of the entropic effect, *Am Mineral* 103, 692 (2018). <http://dx.doi.org/10.2138/am-2018-6262>
- [4] T. Nakagawa, H. Iwamori, R. Yanagi, and A. Nakao, On the evolution of the water ocean in the plate-mantle system, *Progress in Earth and Planetary Science* 5, 51 (2018).  
<http://dx.doi.org/10.1186/s40645-018-0209-2>
- [5] A. P. van den Berg, D. A. Yuen, K. Umemoto, M. H. G. Jacobs, and R. M. Wentzcovitch, Mass-dependent dynamics of terrestrial exoplanets using ab initio mineral properties, *Icarus* 317, 412 (2019). <http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.icarus.2018.08.016>
- [6] R. J. Hunt, M. Szyniszewski, G. I. Prayogo, R. Maezono, and N. D. Drummond, Quantum Monte Carlo calculations of energy gaps from first principles, *Phys. Rev. B* 98, 075122 (2018). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.98.075122>
- [7] P. K. Hung, L. T. Vinh, N. T. T. Ha, N. V. Hong, and F. Noritake, Diffusion and microstructure in sodium silicate liquids, *The European Physical Journal B* 91, 306 (2018). <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2018-90383-2>
- [8] M. T. Lan, T. Iitaka, and N. V. Hong, Simulation of structural characteristics of Mullite melt at high pressure, *International Journal of Modern Physics B* 32, 1850271 (2018). <http://dx.doi.org/10.1142/S0217979218502715>

#### ii) 極限環境オーダーN第一原理分子動力学法の研究

##### [研究実施体制]

代表者： 宮崎 剛 (物材機構)

参加者： Zamaan Raza、中田彩子 (物材機構)

協力者： David R. Bowler (University College London)

### [研究の背景と目的]

実験によって得られる情報が限られる高圧下などの極限環境においては、古典力場の信頼性には大きな疑問が残る。一方、密度汎関数法にもとづく第一原理計算手法は電子状態を解くことによって全エネルギーや原子間に働く力を計算するために、様々な環境において信頼性の高い計算が可能となるが、膨大な計算量が必要となる。特に、通常の第一原理手法では計算量がシミュレーションを行う系の含む原子数  $N$  の 3 乗で急激に増大するために、数千原子以上を含む巨大系に対する第一原理分子動力学は極めて困難である。物材機構の研究グループでは英国 University College London (UCL) の Prof. David R. Bowler のグループと共同で、局在軌道、オーダー  $N$  法 [1] を用いた第一原理計算プログラム CONQUEST [2, 3] を開発してきた。本研究ではプログラム CONQUEST を用い、局在軌道、オーダー  $N$  法による大規模第一原理手法でストレス計算を可能とし、温度一定、圧力一定の大規模第一原理分子動力学を実現可能とする。萌芽的課題の終了時までには数万原子程度の大規模系に対する温度一定、圧力一定の長時間第一原理分子動力学を実用化することを目標とする。そのために効率的な計算手法の導入、さらにプログラムの実行・並列化効率を高めて 1 ステップの速度向上に努める [4]。開発されたプログラムは課題終了時までには一般公開する予定である。

### [研究成果]

平成 30 年度は、平成 29 年度までに開発した手法を高温高圧下のケイ酸塩(シリカ  $\text{SiO}_2$ ) 融体の系に適用し、電荷移動が大きな系に対するオーダー  $N$  法第一原理分子動力学の安定性、効率の改善を行った。具体的には、二つの古典力場(BKS: van Beest, Kramer, Santen, 1990、FG3: Feuston, Garofalini, 1988) を用いて得られたシリカのスナップショット構造(999 原子系と 9999 原子系)を初期座標として、温度一定(3000K)、圧力一定(0-40GPa)のオーダー  $N$  法第一原理分子動力学を実現した。古典分子動力学による初期構造は、則竹史哉氏(山梨大)によって作成されたものである。密度汎関数法における交換相関項は通常の PBE、擬ポテンシャルは Pseudo Dojo データベース [5] のものを使用し、局在基底は SZ, SZP を用いている。オーダー  $N$  法を実現するための密度行列最適化法における補助密度行列のカットオフ半径は 16 bohr を用いているが、ストレステンソルの計算値はこのカットオフ半径で十分収束していることを確認している。SZ 基底は最小基底であるが、局在長として適切なものを選ぶと高圧(約 8-50 GPa)安定相の stishovite 構造と常圧安定相の  $\alpha$ -quartz 構造の二つに対して、平面波基底の第一原理計算 (Quantum Espresso) による最適化体積、さらに数百 GPa 程度の圧力までの体積変化に対するストレステンソルの計算値を十分な精度で再現することが分かった(図 20)。

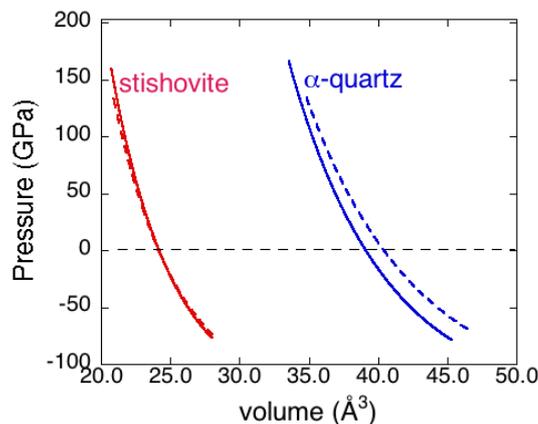


図 20  $\text{SiO}_2$  の  $\alpha$ -quartz 構造と stishovite 構造に対する圧力の体積依存性。実線が CONQUEST、破線が平面波計算 (Quantum Espresso) の結果。

一方、高温高压下のシリカ融体に対するオーダーN法第一原理分子動力学は当初、電子状態計算が不安定であったが、電荷 mixing や Kerker preconditioning を密度行列最適化ステップにおいても使用することによって安定した計算が可能になった。図 21 に、999 原子系に対する第一原理分子動力学において、密度が変化して収束する様子を示す。FG3 の古典力場によって得られた初期構造を用いた計算は平衡状態の密度に達するのに多くのステップ数がかかるが、BKS の古典力場を用いて計算したものは比較的短時間の分子動力学で密度は収束することが分かった。ただし、どちらの初期構造を用いた計算においても、最終的には同じ密度が得られることを確認した。BKS の古典力場の結果は比較的 CONQUEST によって得られる密度に近いが、FG3 の結果は密度が過小評価される傾向が大きいことが分かった。

9999 原子系に対する 1MD ステップの計算時間は、SZ 基底の場合は材料数値シミュレータ 72 ノード (Xeon E5-2680V3, 2.5GHz, 1728 コア) を用いて約 200-400 秒であった。計算時間のふらつきは、電子状態の収束回数の違いとノード配置の違いに起因するが、後者の方が大きな差になっていると考えられる。一方、SZP 基底の場合は「京」コンピュータで 640 ノード (5120 コア) を用いた計算で 1MD ステップ 約 720 秒であった。

一方、高精度基底関数の精度を保ちながら、最小基底の数の局在軌道で計算するマルチサイト法を様々な系に適用することも行った。この方法は絶縁体や半導体の系だけではなく、金属系についても適用できるので[6]、適用範囲が広い手法である。本研究課題では、特に氷の表面の計算において約 4000 原子を含む系に適用した。今後、氷表面におけるステップ構造に対する研究を進めていく。

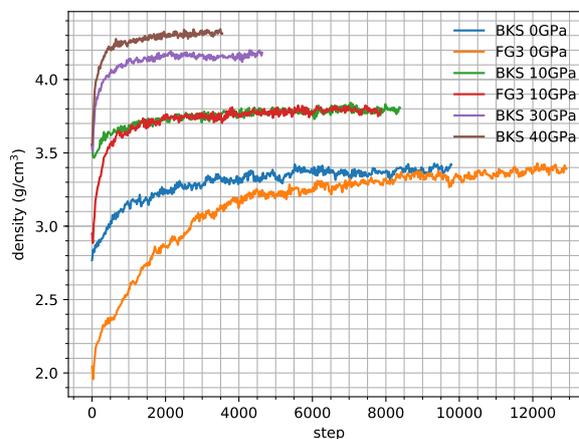


図 21 3000K, 0-40GPa, SiO<sub>2</sub> の温度圧力一定第一原理分子動力学における密度変化。999 原子を含む系で初期構造は二つの力場 (BKS, FG3) で 0GPa, 10GPa の古典分子動力学によるスナップショット構造を用いている。

## [参考文献]

- [1] D. R. Bowler and T. Miyazaki, Rep. Prog. Phys. 75, 036503 (2012).  
<http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/75/3/036503>
- [2] <http://www.linear-scaling.org>
- [3] T. Miyazaki, ECS Transactions. 86, 269 (2018). <http://dx.doi.org/10.1149/08607.0269ecst>
- [4] 宮崎剛、高圧力の科学と技術 27, 189-197 (2017).  
<http://dx.doi.org/10.4131/jshpreview.27.189>
- [5] <http://www.pseudo-dojo.org>
- [6] C. Romero-Muniz, A. Nakata, P. Pou, D. R. Bowler, T. Miyazaki, Ruben Perez, J. Phys. : Condens. Matter 30, 505901 (2018). <http://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/aaec4c>

## サブ課題D 量子力学の基礎と情報

サブ課題D統括（サブ課題D代表者：川島直輝（東大物性研））

トポロジカル量子相や量子色力学(QCD)計算など、多くのグランドチャレンジ問題を数値的に扱う際、従来の計算手法を用いると、必ず負符号問題と呼ばれる困難に遭遇し、大規模な計算ができない。負符号問題の制約なく、任意に与えられた系の計算を多項式時間で行いうる計算手法を得ることは、量子力学の創始以来の大きなブレイクスルーとなる。本課題で中心的な手法と位置付けているテンソルネットワーク法では、負符号問題の困難なく、高精度の計算を実現できる。これによって、新しいメカニズムによる超伝導体など、強相関電子系における物質探索の問題、宇宙や物質の起源に迫る有限密度 QCD における相構造解析の問題、量子計算や量子通信との関連で議論される量子シミュレータや量子アニーリングの問題など多岐にわたる問題の解決が可能となる。こうした背景から、サブ課題Dでは、量子力学的多体問題の一般的手法を開発し、従来計算不可能だった問題を解決するため、物質科学、素粒子論、応用数理、量子通信の諸分野の連携によって、テンソルネットワーク法、機械学習の手法、数値対角化法や量子マスター方程式法、などに基づく新しい並列化アルゴリズム/コードを開発し、その諸分野における応用例を示すことを目的としている。平成 30 年度の成果の概要を以下に列挙する。

第1に、テンソルネットワーク法アルゴリズム開発として、平成 29 年度までに開発した乱数を使う特異値分解法に基づき、テンソルネットワーク表現による繰り込み群コードを開発した。これを応用して、2 次元 q-状態ポッツモデルの臨界現象の数値評価に世界で初めて成功した。また、テンソルネットワーク表現に基づく角転送行列法を利用して、スピン 1/2 カゴメ格子磁性体であるカドミウムカペラサイトの実験と直接対応する数値計算を行った。これによって、実験で観測される多段プラトーをカゴメ格子の六角形に局在したマグノンの描像で説明することに成功した。

第2に、非可換ゲージ理論への拡張として、3 次元  $Z_2$ ゲージ理論を HOTRG(Higher Order Tensor Renormalization Group)法によって数値計算するためのアルゴリズム開発を行い、有限温度相転移の高精度解析に成功した。不純物テンソル法によってグリーン関数計算を行うコードを実装し、4 次元イジングモデルに対して相転移現象の解析を行った。さらにスカラー理論における自発的対称性の破れを扱うためのベンチマークモデルとして 2 次元  $\phi^4$ 理論に着目し、TN 法による自発的対称性の破れの解析を行った。

第3に、量子ダイナミクスの計算手法の開発と実装を継続するとともに、その応用計算を行った。特に、外場に駆動されている系の非平衡定常状態、具体的には光共振器系での動的な協力現象について「京」コンピュータを用いた大規模シミュレーションを実現した。また、レーザー強度が周期的に変調する場合に現れるヒステリシスループの特徴について調べ、動的な相転移現象が現れることを見出した。

第4に、スピン量子クラウドメモリーをより高精度に量子制御・情報抽出するために、機械学習を応用したハミルトニアン学習の手法を開発した。実際に制御マイクロ波の最適波形を求め、多体量子もつれ操作の実験を行った。とくに、NV 中心近傍の同位体炭素核子への選択的な量子テレポーテーション転写に成功した。また、第一原理計算プログラム TOMBO を用いてダイヤモンド NV 中心の GW 計算を行った。

第5に、サブ課題Bとの連携課題として、Brownian Dynamics 分子動力学シミュレーションで得られる巨視的な応力テンソルの時系列のデータに対して、LASSO(Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)などの機械学習の方法を適用して、連続体計算に必要な粗視化モデルを構築した。また、線形最小二乗問題を、テンソルネットワークの一種である行列積状態の形式を用いて効率的に解くアルゴリ

ズムを実装した。

## サブ課題D 量子力学の基礎と情報

### i) サブ課題D統括、および、計算物性科学の手法革新

#### [研究実施体制]

代表者： 川島直輝（東大物性研）

参加者： LEE Hyunyoung、白井達彦、玉井敬一（東大物性研）

#### [研究の背景と目的]

物理学において多くのグランドチャレンジ問題を数値的に扱う際、従来の計算手法では必要な計算時間が系のサイズとともに指数関数的に増大するため、大規模な計算ができない。系のサイズに関して多項式時間で計算ができる計算手法を確立することが、本課題の中心的なテーマである。そのなかで、物性研究所では テンソルネットワーク (TN) 法、数値対角化法、量子マスター方程式法など、量子多体問題の各側面に対してベストな手法をベースにしつつ、TN 繰り込み群法など、最近になって得られたマルチスケール性を手法にも取り入れる知見を応用して、大規模並列計算のための一般的かつ強力な新手法を開発し、ポスト「京」用に最適化されたコードを開発している。これは、従来法と比較して、計算コストの体積依存性が小さいことや符号問題がないことなどの明確な優位性を持つ新手法となる。一般性の高い理論手法として確立し、計算プログラム自体は公開コードとしてプロジェクト外の研究者にとっても利用可能な資産として公開することを目指している。物性理論の諸課題への応用を念頭におき、それぞれに特化した計算プログラムの開発・高度化も行っている。また、そのためのサブ課題D全体の活動の統括をするとともに、開発された手法やソフトウェアの物性科学への応用を担当している。

#### [研究成果]

(1) 数値計算的な観点から見た場合、多くの TN 法計算の主要部はテンソル縮約(行列・行列積)と特異値分解である。平成 29 年度までに、新しい特異値分解のアルゴリズムとそれに基づくテンソルネットワーク繰り込み群のプログラムを開発するとともに、大規模計算による性能検証を行った。平成 30 年度は、これらの成果を、従来の数値解法では困難であった統計力学の基礎的な問題に適用することで更に高度な実証研究を行った。平成 29 年度までは TRG (Tensor Renormalization Group) 法が応用対象であったのに対して、

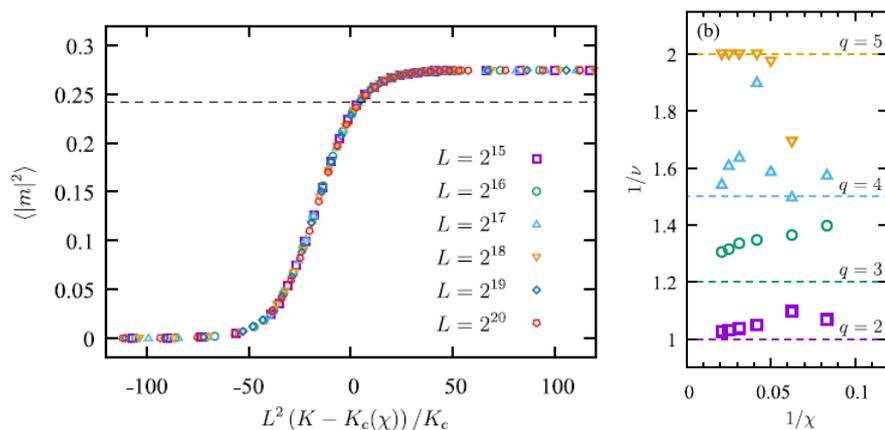


図 22 (左) 5 状態ポッツモデルの磁化の 2 乗の有限サイズスケールリング。従来のモンテカルロ法で  $L=10^4$  程度が限界だったところ、 $L=10^6$  までの計算に成功した。(右) 臨界指数  $1/\nu$  の評価値の近似精度パラメータ  $\chi$  の逆数に対するプロット。 $q=5$  のときのみ、収束値が 1 次転移で期待される 2 であり、5 状態ポッツモデルの 1 次転移性を明確に示している。

平成 30 年度は HOTRG 法をベースとしたコード開発を行いそれを用いて実証研究を行った[1]。HOTRG 法は単純な正方格子以外の格子や高次元への拡張性などにおいて、TRG 法よりも優れている。ターゲットとして取り上げた問題は、統計力学で最も基礎的なモデルである  $q$ -状態ポッツモデルである。このモデルについては、 $q=4$  以下で 2 次転移、 $q=5$  以上で 1 次転移を示すといわれているが、 $q=5$  での 1 次転移が非常に弱く、数値計算で直接転移の次数を確定した計算例はこれまで無かった。我々の開発した HOTRG 法を用いると、 $L=2^{20}=10^6$  程度までの平衡状態計算が可能であり、図 22 左は磁化の高次モーメント計算結果(図では 2 次を表示。計算は 4 次まで行った。)に基づく有限サイズスケールリングプロットである。プロットの際に仮定したスケールリング倍率は 1 次転移の場合のものであり、このプロットで様々なサイズの計算結果が同一曲線状によく載っていることは 5 状態ポッツモデルの相転移が 1 次転移であることを明確に示している。図 22 右は、 $q=1, 2, 3, 4, 5$  の場合にボンド次元  $\chi$  の逆数に対して、臨界指数  $\nu$  の評価値をプロットしたものであり、この図からも  $q=5$  の場合のみ 1 次転移となっていることが明瞭に見て取れる。

さらに、平成 30 年度は、テンソルネットワーク表現に基づく角転送行列法を利用して、スピン 1/2 カゴメ格子磁性体であるカドミウムカペラサイトの実験と直接対応する数値計算を行った[2]。数値計算により多段ステップを含む磁化曲線(磁化の外部磁場依存性カーブ詳細を明らかにした(図 23 左)。実際の磁化曲線は、この単純なモデル計算によるものと比べてステップ構造が明瞭ではない。そこで、実験的に重要と思われるジャロシンスキー守谷相互作用を加えた場合の理論曲線を求め実験と比較したところ、弱磁場から中磁場領域で良い一致がみられた(図 23 右)。これらの結果から、実験で観測される多段プラトーをカゴメ格子の六角形に局在したマグノンの描像で説明することに成功した。

この他、関連して、フラストレート量子スピン系である  $S=1$  スター格子反強磁性体の特性の研究[3]、ランダムビットの効率的な発生法に関する研究[4]、などを行った。

(2) 量子多体系の研究においてもっとも基本的である数値対角化法は、メモリ量や計算時間の指数関数的増大のため、利用範囲が限られてきた。我々は、並列計算機の進歩や、新しい量子統計力学の計算手法を取り入れた現代的

な量子格子モデルソルバーの開発を行っている。平成 30 年度は量子ダイナミクスの計算手法の開発と実装を継続するとともに、その応用計算を行った。特に、外場に駆動されている系の非平衡定常状態や、散逸のある系における緩和過程を解析するための手法である量子マスター方程式の手

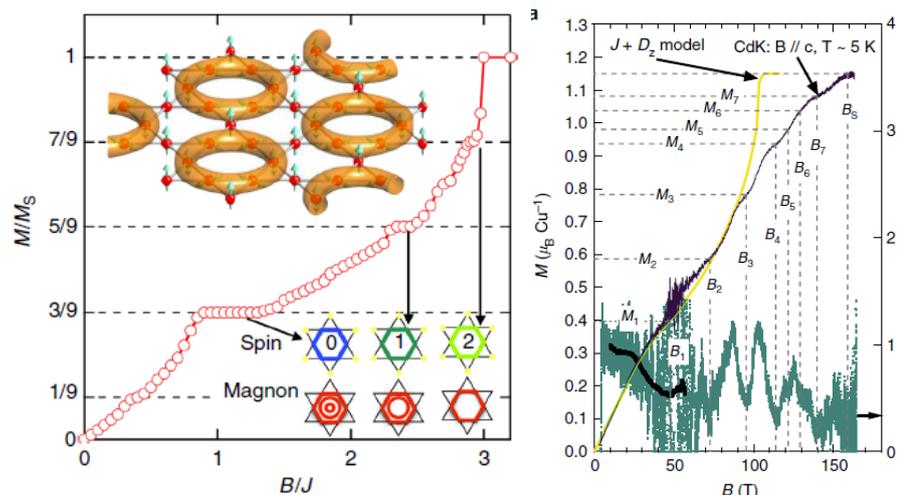


図 23 (左) Cd-kapellasilite (CdK) に対応する最も単純なスピンモデルである  $S=1/2$  カゴメ格子反強磁性ハイゼンベルクモデルのテンソルネットワーク法による理論磁化曲線。(右) ジャロシンスキー守谷相互作用の効果を含めた理論計算と CdK 実験との比較。

法の並列化、共振器系での動的な協力現象についての「京」コンピュータを用いた大規模シミュレーションを進めた。離散的なエネルギー準位をもつスピンの閉じ込められた共振器系(図 24)の外部レーザー駆動に対する応答は、共振内の光子数によって異なる特徴を持つ。レーザー強度に対して共振器中の光子数が双安定な状態を示し、またその間を不連続に跳ぶといった一次相転移現象に似た現象が発生する。これまで、スピン数が大きな極限における平均場近似による解析、粒子数が少なく光子数の多い極限での数値計算がなされていた。我々は光子数に関する並列化やスピン状態の対称性を利用して大規模なシミュレーションを実現し、これまで調べられていなかった低光子密度状態における時間発展演算子の固有値・固有状態から、定常状態での光子数分布関数のサイズ依存性、および緩和時間のサイズ依存性を調べた。低光子密度領域では準安定状態のレーザー周波数依存性がこれまで調べられてきた領域とは定性的に異なることを明らかにし、さらに光双安定状態の特徴を動的な一次相転移の実効的自由エネルギー描像から議論した[5]。また、レーザー強度が周期的に変調する場合に現れるヒステリシスループ(図 24)の特徴についてフロケ演算子の立場から数値計算を行い、その周期に対し動的な相転移現象が現れることを明らかにした[6]。

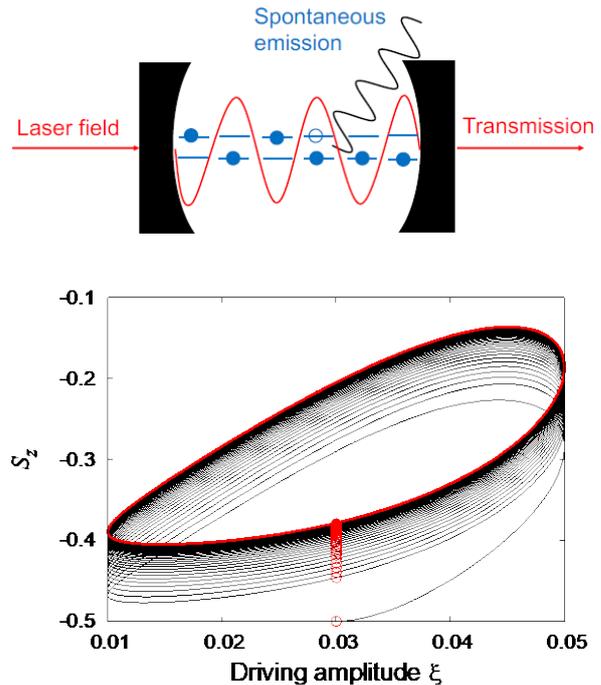


図 24 共振器中の多数のスピン(上)に対して周期的に強度が変調するレーザーを入射した場合に現れるヒステリシスループとそのリミットサイクル(下)。フロケ演算子に基づく解析を行うことで周期毎のサイクルの収束(赤シンボル)を議論した。

#### [参考文献]

- [1] Satoshi Morita, Naoki Kawashima, "Calculation of higher-order moments by higher-order tensor renormalization group", Computer Physics Communications 236, (65-71) (2019)
- [2] R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo, A. Miyake, A. Matsuo, K. Kindo, M. Tokunaga, N. Kawashima, S. Takeyama and Z. Hiroi, "A series of magnon crystals appearing under ultrahigh magnetic fields in a kagome antiferromagnet", Nature Communications 10, 1229(1-7) (2019).
- [3] Hyun-Yong Lee, and Naoki Kawashima, "Spin-one bilinear-biquadratic model on a star lattice", Phys. Rev. B 97, 205123(1-7) (2018)
- [4] Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Synge Todo, and Naoki Kawashima, "Fast algorithm for generating random bit strings and multispin coding for directed percolation", J. Phys. Soc. Jpn. 88, 024004 (2019)
- [5] T. Shirai, S. Todo, H. de Raedt and S. Miyashita, "Optical bistability in a low-photon-

density regime”, Phys. Rev. A 98, 043820 (2018)

[6] T. Shirai, S. Todo, H. de Raedt and S. Miyashita, in preparation.

## ii) テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用と数理的・計算機科学的な高度化開発

### [研究実施体制]

代表者： 藏増嘉伸（筑波大）

参加者： 吉村友佑、櫻井鉄也、今倉 暁、二村保徳、山下 巧、稲川裕太、山田悠加（筑波大）

### [研究の背景と目的]

自然科学は、その研究対象の広がりとともに細分化の歴史を辿って来た。例えば、素粒子物理学は物質の最小構成単位とその基本的相互作用を研究対象とするが、物質科学は物質の構造・性質などの巨視的性質を微視的な基本法則を用いて解明しようとする。たとえ諸分野の研究対象が異なっていたとしても、自然科学の本質は多体(多自由度)問題の研究である。一般的に多体問題は理論的解析が困難であり、そのため自然科学の諸分野で数値的手法を用いた研究が発展してきた。テンソルネットワーク(TN)スキームとは、多体問題を TN 形式によって定式化し、高精度解析を行う一群の理論的・数値計算手法的枠組みである。この定義から容易に推測できるように、TN スキームは分野を越えた可搬性を持つ。特に、2000 年代以降、量子情報分野との邂逅によってエンタングルメント(量子もつれ)の概念の重要性が認識され、様々な分野で急速に注目を集めている。本サブ課題では、ポスト「京」で想定される大規模並列度に適応した TN スキームに基づく数値的研究手法を開発し、従来の数値計算アルゴリズムが成し得なかった計算科学研究の基盤を構築することが目的であり、本分担機関では、特に TN 法の素粒子物理学への応用と数理的・計算機科学的な高度化開発に取り組む。

### [研究成果]

TN 法の素粒子物理学への応用における重要な目標の一つとして、TN 法を用いた 4 次元格子 QCD (Quantum Chromodynamics) の解析がある。4 次元格子 QCD では、離散化された 4 次元時空(空間 3 次元+時間 1 次元)の格子点上にクォークと呼ばれる相対論的フェルミオンが定義され、最隣接格子点間を結ぶリンク上にゲージ場が定義されている。QCD の場合、ゲージ場は非可換な SU(3) 行列で表されている。2014 年、代表者(藏増)を中心とした研究グループによって、テンソル繰り込み群(これまで提案されている TN 法の一つ)がグラスマン数も扱えるように拡張され(グラスマンテンソル繰り込み群)、相対論的フェルミオン入りゲージ理論への応用に成功している。具体的には、グラスマンテンソル繰り込み群を用いて、 $\theta$  項が有る場合と無い場合の 1 フレーバーの 2 次元格子 Schwinger モデル(2 次元格子 QED: ゲージ場は可換な U(1) 行列で表される)における相構造が調べられた[1, 2]。この研究により、グラスマンテンソル繰り込み群が、相対論的フェルミオン入りゲージ理論が内包する負符号問題や複素作用問題を解決していることを示すことに成功している。このような経緯を踏まえ、本萌芽課題においては、(i) 非可換ゲージ理論への拡張、(ii) 高次元モデルへの応用、(iii) 物理量計算のための手法開発、(iv) 興味深い低次元素粒子論モデルへの応用、という 4 つの課題に取り組んでいる。(i)、(ii) は 4 次元格子 QCD への応用を目指すために必要な研究課題である。TN 法では、分配関数の計算手法はよく知られているが、グリーン関数計算のための手法開発はほとんどなされていないのが現状である。グリーン関数から得られる重要な物理量も数多く存在するため、課題(iii)の設定が必要である。素粒子物理学では、これまで知られている素粒子とその相互作用を記述する標準理論だけでなく、それを越えた未知の物理の理論的・実験的探索も重要な研究対象である。そのため、課題(iv)では、標準理論を超えるような興味深い素粒子論モデルへの TN

法の応用を検討する。平成 30 年度における課題(i)～(iv)の研究開発状況は以下の通りである。

課題(i) : 3次元  $Z_2$ ゲージ理論を TN 法によって数値計算するためのアルゴリズム開発を行った。具体的には、Higher Order Tensor Renormalization Group(HOTRG)法をベースとしたアルゴリズム改良を行い、3次元  $Z_2$ ゲージ理論における有限温度相転移の高精度解析に成功した。現在論文を学術雑誌に投稿中である[3]。

課題(ii)、(iii) : 一般的に、TN 法はモデルの次元が上がるにつれて計算コストが増大する。そのため、これまで TN 法の主な応用例は 2次元モデルに限られており、4次元モデルへの適用例は存在しない。われわれは、4次元における最も簡単なモデルであるイジングモデルに対して HOTRG 法を応用し、相転移現象の解析を試みた。その際、不純物テンソル法と呼ばれるグリーン関数計算手法を用いて内部エネルギーを計算し、その温度・体積依存性を詳細に調べることによって相転移の次数決定を可能とした。今後論文の取り纏めの作業に入る予定である。

課題(iv) : 素粒子標準理論およびそれを超える理論の重要な構成要素としてスカラー理論における自発的対称性の破れがある。その低次元モデルとして 2次元  $\phi^4$ 理論に着目し、TN 法による自発的対称性の破れの解析に取り組んだ。具体的には、自発的対称性の破れが起きる臨界結合定数の高精度計算を行い、これまで他の数値計算手法で得られている結果との比較を行った。現在論文を学術雑誌に投稿中である[4]。

数理的・計算機科学的な高度化開発においては、ポスト「京」上で TN 法の高速化を行うための各種技術の開発、及び CCSD (Coupled-cluster singles-and-doubles) 法の高速化のための理論検討を進めた。TN 法の計算の主要部は縮約および行列の低ランク近似であるため、ポスト「京」において性能を発揮する縮約計算法および行列の低ランク近似計算手法について開発を行った。具体的には、以下の 4点である。

#### ① 計算対象が独立に求められることを利用した高次テンソル繰り込み群の大規模並列計算法の開発

単純格子に対する高次テンソル繰り込み群の計算において、粗視化により作られる新しいテンソルの各要素の計算には元のテンソルの要素の一部のみが必要であることを利用した並列計算アルゴリズムを開発し実装した。現在、サブ課題D 内の他のチームと共同で、実装したコードを用いた物理量の計算及びコード開発へのフィードバックが進められている。

#### ② テンソル繰り込み群計算の高速計算法の開発

テンソル繰り込み群(TRG)計算の高速化として、テンソルのスパース化による特異値分解の近似高速化法を開発した。適切な閾値を設定する事により、大きく精度を劣化させることなく TRG の高速化が可能であることを示した。また、高次テンソル繰り込み群(HOTRG)計算の高速化として、3次元問題に対して、テンソルのリオーダーリングコストを最小化する縮約手順およびリオーダーリング手順を解析的に求めた。さらに、解析的に求めた計算手順に基づき並列実装を行い、「京」コンピュータを用いた数値実験において、ナイーブな実装に対してリオーダーリング部において 6.88 倍、高次テンソル繰り込み群計算全体として 1.59 倍の高速化を実現した。現在、n次元 HOTRG におけるリオーダーリング手順の最適化についても併せて開発を進めている。

#### ③ テンソル繰り込み群計算の基盤アルゴリズム開発

TN 計算法の基盤アルゴリズムとして、行列の低ランク近似がある。本開発では、超並列固有値解法である周回積分型固有値解法を利用した高並列な低ランク近似計算手法の開発を行った。また、非線形変数変換を利用した精度改善手法についても併せて開発を進めている。

④ CCSD (Coupled-cluster singles-and-doubles) 法の高速化のための理論検討

CCSD (Coupled-cluster singles-and-doubles) 法の高速化に向けて、「極限マテリアル」サブ課題Aグループと共同で並列計算アルゴリズムを現在考案中である。

[参考文献]

- [1] “Grassmann tensor renormalization group approach to one-flavor lattice Schwinger model”, Y. Shimizu and Y. Kuramashi, Physical Review D90 (2014) 014508.  
DOI: 10.1103/PhysRevD.90.014508
- [2] “Critical behavior of the lattice Schwinger model with a topological term at  $\theta = \pi$  using the Grassmann tensor renormalization group”, Y. Shimizu and Y. Kuramashi, Physical Review D90 (2014) 074503.  
DOI: 10.1103/PhysRevD.90.074503
- [3] “Three-dimensional finite temperature Z2 gauge theory with tensor network scheme”, Y. Kuramashi and Y. Yoshimura, arXiv:1808.08025 [hep-lat].
- [4] “Tensor network analysis of critical coupling in two dimensional  $\phi^4$  theory”, D. Kadoh, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, R. Sakai, S. Takeda, and Y. Yoshimura, arXiv:1811.12376 [hep-lat].

iii) 量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーシミュレーション

[研究実施体制]

代表者： 小坂英男（横国大）

参加者： 大野かおる（横国大）

[研究の背景と目的]

貴重な秘匿情報に安全・安心にアクセスするため量子暗号通信や、その延長上にある超並列な分散処理性能が期待できる量子計算機の実現に向け、量子もつれネットワークのノードを構成する量子メモリー素子の開発環境を整備することを目的とする。本研究では、量子メモリーとしてダイヤモンドに代表される常磁性スピンを持つ固体を想定し、光検出電子・核スピン磁気共鳴(ODMR)により得られるデータを計算機トモグラフィ(CT)により解析することにより、マルチモードの量子クラウドメモリーとして利用するためのハミルトニアンエンジニアリングを目標とする。ダイヤモンド中の欠陥の一種である窒素空孔欠陥(NV中心)は、実用上も十分な電子スピン位相保持特性を示すのみならず量子効率が1に近い光学活性を示すため、量子もつれネットワークの伝送メディアとして利用される光量子(光子)と量子メモリーを構成する記憶メディアとしてのスピン量子との間の量子メディア変換インターフェースとして期待されている。NV近傍の窒素核スピン、炭素同位体核スピンなどスピン環境のハミルトニアンをNV中心ごとに正確に把握し、得られたハミルトニアンを基にスピン集団を最適に量子制御・情報抽出するためのマイクロ波あるいはラジオ波の位相振幅(IQ)制御された波形を算出する。これにより、NV周辺のスピン集団をマルチモードの量子メモリーとして利用する。従来、固体中の核スピン集団は電子スピンの位相緩和をもたらす環境要因とされ、スピンエコーなどの手段で位相緩和が除去されてきた。本プロジェクトにより、この量子環境をクラウド的な量子メモリー資源として有効活用する道を開く。量子クラウドメモリーが実現す

れば、量子もつれネットワークを用いた量子暗号通信やその延長上にある量子計算機の開発環境を整備することができる。本成果により、従来のような人工的な物理系構築ではなく、膨大な計算能力の活用により自然をありのままに生かしたボトムアップ的な科学機器の開発を主導する。本研究は、量子力学、量子情報理論などの基礎科学を計算科学を通じて実社会につなげる革命的なイノベーションとなる。

## [研究成果]

### ① ダイヤモンド中の量子クラウドメモリーへの量子テレポーテーション転写 (小坂)

量子通信や量子計算の基礎となる量子もつれネットワークの実現に向け、量子テレポーテーションの原理を用いた光子から核子への量子テレポーテーション転写の実験を行ってきた。平成 28 年度は、量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーの実験系の準備を実施し、ダイヤモンド中の窒素空孔(NV)中心の窒素核子への転写実験を行った[1]。しかしながら、窒素は一つの NV 中心につき一つしかないため、多くの量子情報を保持することができない。そこで平成 29 年度は、ダイヤモンド NV を記述するハミルトニアン<sup>1</sup>の導出を実施するとともに、平成 28 年度に準備した実験系を用いて多体量子もつれ操作の実験を実施し、NV 中心近傍の同位体炭素 ( $^{13}\text{C}$ ) 核子の転写実験に成功した。平成 30 年度は、平成 29 年度に得たハミルトニアンを基にしてスピン量子クラウドメモリーをより高精度に量子制御・情報抽出するために、機械学習を応用したハミルトニアン学習の手法を開発し、高精度の多体量子もつれ操作の実験を行った(図 25)。具体的には、電子・窒素・同位体炭素 2 つからなる 4 体量子系のハミルトニアンを高精度に測定し、GRAPE(最急上昇法)で生成した最適制御波形のマイクロ波により高精度かつロバストに量子もつれ操作を行った。その結果、4 つ核子の中から 1 つの炭素核子だけを選択的に電子ともつれさせることに成功し、NV 中心近傍の二つの同位体炭素核子のうち一つの同位体炭素核子への選択的な量子テレポーテーション転写を試み、忠実度は 70%程度とまだ低いながらも、古典限界の 67%を超える目途を得た(図 26)。同位体炭素は、ダイヤモンド中においてその存在確率を任意に設定でき、窒素核子と異なり NV 中心に局在する電子からの距離も遠く、超微細相互作用が小さい同位体炭素核子を複数用意できる。同位体炭素核子を用いれば、量子メモリーを集積化できるだけでなく、窒素核子で 10 秒を超えるコヒーレンス時間[1]をさらに延長することが期待できる。無磁場下で多体量子系の量子もつれ操作を行うことで、幾何学的スピンエコーによる量子メモリー時間の最大化[2]、ホロミック量子ゲート操作[3-5]の忠実度を最大化を行えるという多くの利点をもつ。

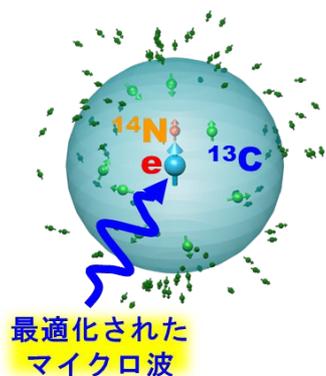


図25 ハミルトニアン学習により最適化された量子クラウドメモリーの最適量子操作

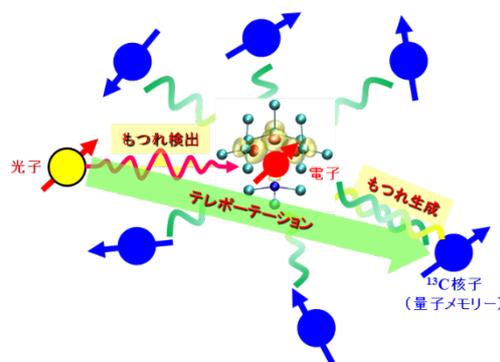


図26 同位体炭素により構成される量子クラウドメモリーへの量子テレポーテーション転写

## ② 超微細相互作用とダイヤモンド NV 中心の第一原理計算 (大野)

量子暗号通信や量子計算の基礎となる量子もつれネットワークの実現に向け、実験と連動した第一原理計算を行うために、平成30年度は独自開発の全電子混合基底法に基づく第一原理計算プログラム TOMBO を用いてダイヤモンド NV 中心の試験的 GW 計算を行うことに成功した。スーパーセルの中に NV 中心を 1 個導入しマイナス 1 価に帯電した状況の下で計算を行った。3 重項基底状態に対応して、フェルミ準位直下に NV 中心に局在した 2 個の  $\uparrow$  スピン電子を占有する 2 重縮退した状態が現れることを確認した。また、世界初の自己無撞着 GW $\Gamma$  計算を励起状態に拡張した。さらに、超微細相互作用の双極子相互作用の評価にこれまで無視していた周囲の原子の原子軌道関数の効果を取り入れるようプログラムを改良した。

### [参考文献]

- [1] Sen Yang, Hideo Kosaka, Joerg Wrachtrup, et.al., “High fidelity transfer and storage of photon states in a single nuclear spin”, *Nature Photonics*, 10, 507-511(2016).
- [2] Hideo Kosaka\*, Naeko Niikura, “Entangled Absorption of a Single Photon with a Single Spin in Diamond”, *Physical Review Letters*, 114, 053603 (2015).
- [3] Yuhei Sekiguchi, Yusuke Komura, Shota Mishima, Touta Tanaka, Naeko Niikura and Hideo Kosaka\*, “Geometric spin echo under zero field”, *Nature Communications*, 7, 11668 (2016).
- [4] Yuhei Sekiguchi, Naeko Niikura, Ryota Kuroiwa, Hiroki Kano and Hideo Kosaka\*, “Optical holonomic single quantum gates with a geometric spin under a zero field”, *Nature Photonics*, 11, 309 (2017).
- [5] Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno, “GW( $\Gamma$ ) methods without the Bethe-Salpeter equation for photoabsorption energies of spin-polarized systems”, *Phys. Rev. A* 97, 060502(R);1-6 (2018).

### ③ サブ課題間連携

サブ課題ごとに実施する本格実施研究に加え、成功が保証されない挑戦的な課題として、サブ課題間で連携を行う下記課題の研究開発を行った。

- ・サブ課題AとBの連携により、サブ課題Bで開発する Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法をサブ課題Aで取り扱う破壊現象まで扱えるシミュレーション手法に発展させる。
- ・サブ課題BとDの連携により、ウェーブレット解析など階層間を連続的につなぐアイデアを並列計算に生かした新しい方法論を確立する。
- ・サブ課題CとDの連携により、サブ課題Dで開発される量子モデル Solver とサブ課題Cで開発される地球惑星深部で登場する物質科学的問題との接点を検討する。

連携を行うサブ課題のサブ課題代表者が中心となり、分担機関、および、協力機関などに所属するメンバーの協力を得て、各サブ課題間連携の目標を詳細に設定した。さらに、連携を行うサブ課題のサブ課題代表者、分担機関、および協力機関が協力をを行い、具体的なサブ課題間連携課題の研究を実施した。また、研究の円滑な遂行と連携を実施するためにサブ課題間連携研究会等の場を設けて、研究成果、進行状況、連携方法、今後の研究計画などについて議論を行った。

## サブ課題A-B連携 弾塑性体のマルチスケール・シミュレーション

### [研究実施体制]

サブ課題B： 森井洋平、川勝年洋（東北大院理）

サブ課題A： 石井明男、尾方成信（阪大院基礎工）

### [研究の背景と目的]

本連携課題が対象とするのはアモルファス固体の破壊現象である。この現象は、亀裂先端部分における原子スケールでのボンドの切断現象と、固体を連続体と見なせるスケールでの弾性場中の亀裂の進展とが相互に絡み合ったマルチスケールの共同現象である。サブ課題A阪大尾方グループでは、この問題をミクロな分子動力学(MD)シミュレーションで再現しようと試みているが、弾性場の持つ長距離の相互作用のために境界条件の影響による有限サイズ効果が大きく、亀裂進展の様相が現実系のものとは異なってしまふという懸念がある。図 27 に同グループで実施された金属ガラス中の亀裂進展の MD シミュレーション結果の一例を示す。本原子モデルは  $x$  と  $y$  方向に自由表面を持つ。上下表面から 1nm 内に存在する原子群にそれぞれ  $\pm 10\text{m/s}$  の速度を  $z$  方向与えて、せん断負荷を与えている。図中の色の変化は局所的な原子ひずみであり、原子ひずみの高い領域は亀裂進展した領域である。自由表面とした境界の影響により無限体中の亀裂進展を模擬することができていないことに加えて、進展とともに自由表面に近づき、さら

に境界条件の影響を受けていることが理解できる。この問題を解決するために、サブ課題 B で開発している Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法を用いた弾性体のシミュレーションにより、長距離の弾性場を解きながら、その中にミクロな MD シミュレーションを埋め込むことで、現実的な境界条件の下で亀裂の伸展を解くシミュレーション手法をサブ課題 A B の共同で開発している。

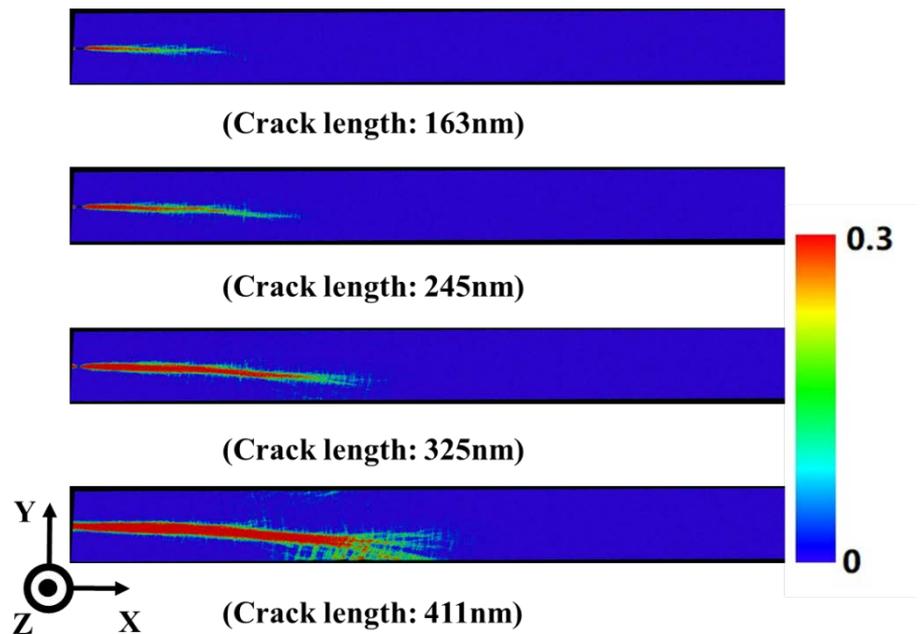


図 27 金属ガラス中の亀裂進展 MD シミュレーション

### [研究成果]

亀裂進展の MD シミュレーションで得られる歪-応力曲線をモデル化した弾塑性体の構成方程式を導出し、サブ課題 B で作成したマルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム (MSSP) をもちいて、亀裂進展の解析をおこなった。この MSSP を用いたシミュレーションでは、ターゲットをアモルファス金属に置き、弾性場の SPH 法を用いてマクロな弾性場を解きながら、ミクロシミュレータ (MicS) を用いてミクロな塑性変形を表現する構成方程式を並列して解くことで、亀裂進展のマルチスケール・シミュレーションを実現した。計算にもちいた各物質パラメータと構成方程式のデータは、サブ課題 A の阪大・尾方グループから提供を受けた[1]。

図 28 は MicS 側にもちいた弾塑性モデルの歪-応力関係式である。赤が線形弾性体のモデルを用いた関係式で、緑が破壊塑性変形を非線形項として取り入れた粒子モデルから得られた関係式である。線形弾性体モデルでは表現できない、ミクロな破壊現象による応力の降伏が粒子モデルによって再現されていることがわかる。また、使用したパラメタは、尾方グループによる MD 計算で得られた歪-応力曲線(図 29)を再現するように決めた。このような粒子を用いた MicS モデルを内包した弾性体 SPH に対して、剛体棒をもちいた引き裂きを行なった計算結果が図 30 である。赤色が強い場所が、粒子モデル側の塑性破壊が進行した場所である。MSSP を用いたこのシミュレーションを用いて、ミクロな塑性破壊が進行している箇所マクロな亀裂進展も同期して生じることを定性的に示すことができた。図 31 は MicS 側で計算された粒子モデルの分子の配向状態であり、赤い色が強い場所ほど強い歪が生じている場所である。円柱進行方向の前面及び、亀裂進行方向に対して、粒子モデルに強い配向が生じていることがわかる。

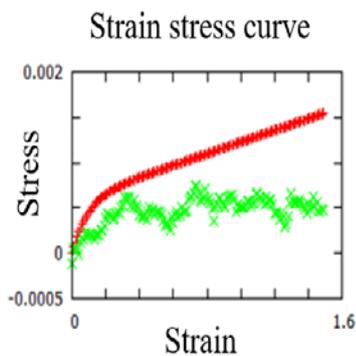


図 28 連続体と粒子モデルの歪-応力曲線

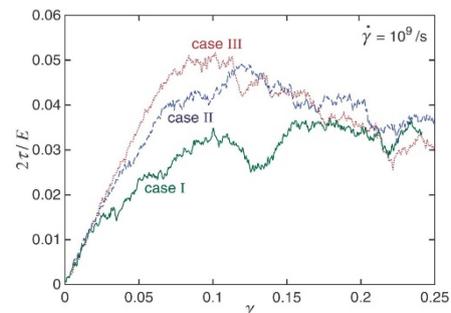


図 29 MD 計算で得られる歪-応力曲線

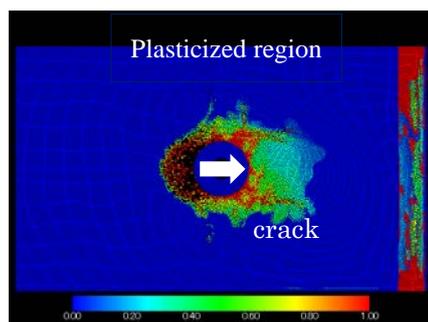


図 30 MSSP で計算した弾性体の塑性変形の状態

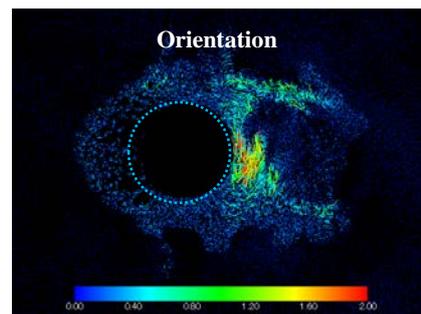


図 31 塑性変形下での粒子モデル配向状態

## [参考文献]

[1] F. Shimizu, S. Ogata, and J. Li, Mater. Trans., 48 (2007) 2.

## サブ課題B-D連携 分子動力学計算からの機械学習による複雑流体の解析

### [研究実施体制]

サブ課題D： 玉井敬一、川島直輝（東大物性研）

サブ課題B： 川勝年洋（東北大院理）、野口博司（東大物性研）

### [研究の背景と目的]

流体内部に原子・分子よりも大きなスケールの内部構造を持つ複雑流体では、Navier—Stokes 方程式で記述されるニュートン流体とは質的に異なる流動現象が数多く見られる。そのメカニズムを理解し、振る舞いを定量的に正確に予測できるようにすることは、基礎科学として興味深いだけでなく、材料や構造物の設計に向けた重要な課題である。複雑流体の流動現象に関する問題を難しくしているのは、微視的な動力学と巨視的な流動が密接に関係しており、2つのスケールを適切に橋渡しするマルチスケールの手法

が不可欠な点である。この点を克服すべく、サブ課題Bでは、微視的スケールのBrownian Dynamics シミュレーションの結果から得られる応力テンソルを、流体粒子(ラグランジュ)描像に基づく巨視的な流体シミュレーション(Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法)で用いるマルチスケールシミュレータの開発が進められている。本連携課題では、このようなマルチスケールシミュレーションの効率化に向けて、サブ課題Dで研究が進められているテンソルネットワークや、特異値分解に基づく情報圧縮を活用できる可能性を模索し、両サブ課題に有用な知見を得るべく研究を展開している。

#### [研究成果]

平成30年度は、先述のSPH法を用いたマルチスケールシミュレータとの連携に向けた準備段階として、(a) Brownian Dynamics シミュレーションで得られる時系列データに対する機械学習、(b) 最適化問題を解くためのテンソルネットワーク関連手法の整備の2つの方向から研究を進めた。

(a)に関しては、ビーズがバネで繋がれたダンベル型の分子の集合系に対してBrownian Dynamics シミュレーションを行い、得られた巨視的な応力テンソルの時系列のデータに対して機械学習による有効モデルの構築を試みた。ダンベルモデルをはじめ、マルチスケールシミュレーションが必須となる系では、一般に応力テンソルが履歴に対する依存性を示す。一定のせん断速度を与え続けた時に定常状態に至るまでにかかる典型的な時間を、系が履歴を記憶してられる時間として、その期間におけるせん断速度の時系列を入力変数、次の時間ステップにおける応力テンソルを出力変数として、機械学習で標準的に知られるLeast Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO)の手法によって有効モデルを構成した。記憶の時間についても学習を行う手法として知られる回帰型ニューラルネットワークと比べると、最適化(学習)にかかるコストが比較的軽く、また構築される有効モデルの解釈可能性が担保されることが大きなメリットである。線形バネを用いたダンベルモデルで、有効モデルと解析解の間でよい一致が見られた。(b)に関しては、データ数が巨大な場合の線形最小二乗問題を、行列積状態の形式を用いて効率的に解くアルゴリズムを実装した。一般に、線形最小二乗問題は行列AのMoore-Penrose擬似逆行列 $A^+$ を求める問題に帰着し、特異値分解を用いて解くことが出来るが、もとの行列のサイズが大きくなると計算量の面で困難が生じる。しかし、よりサイズの小さい行列を用いた行列積状態で近似できる場合、その小さい行列(コア)に対して順次特異値分解を施すことで興味のある線形最小二乗問題を解くことが出来る。それを実現するアルゴリズムを実装した。これを足掛かりに、Brownian Dynamicsのような確率的ゆらぎを伴うようなデータに対して効率よく予測を与えるような学習フレームワークに発展させていくのが、平成31年度の課題である。

#### サブ課題C-D連携 テンソルネットワーク時代の地球惑星物質科学

##### [研究実施体制]

サブ課題C： Le The Anh (理研)、福井宏之 (兵庫県立大)、飯高敏晃 (理研)

サブ課題D： 大久保毅 (東大)、川島直輝 (東大)

##### [研究の背景と目的]

サブ課題Cとサブ課題Dの連携により、成功が困難な挑戦的課題群に取り組む。量子多体系の大規模な格子模型の効率的解法としてサブ課題Dが研究している「テンソルネットワーク」の手法を地球惑星物質科学の問題に適用することにより新しい研究領域を開拓する。また、サブ課題Cが得意とする「ランダムベクトルによる有限温度相関関数の計算」の手法をテンソルネットワークに拡張し今までに無い「ランダ

ムテンソルネットワークによる有限温度相関関数の計算」の手法を確立し、サブ課題Dが実施するテンソルネットワークによる物性研究に貢献する。さらにサブ課題C、サブ課題D以外のサブ課題や萌芽的課題、理化学研究所・革新知能統合研究センターなどとも連携し「テンソルネットワーク」の手法を物質科学に限定されない学際的研究に広げる。

**(1) 氷の水素結合ネットワークにおける量子多体効果:** 氷と磁石は、太古より知られた地球惑星関連の代表的物質である。氷の特徴は、水分子  $H_2O$  がアイスルールに従った水素結合ネットワークを形成して結晶化することである。水素結合している二つの酸素原子間には水素の安定位置が二箇所あり、この二状態間を量子トンネリングすると考えられる。磁石では、鉄原子上の電子スピンの上向き下向きの二状態があり、相互作用によりスピンの向きがそろふことにより磁性を示す。ある種の磁性体は、そのスピン配置が  $H_2O$  氷のアイスルールと類似の規則を満たすことから「スピンアイス」と呼ばれ盛んに研究されている。スピンアイスをさらに冷やすとスピンの量子ゆらぎにより液体化するとされる。翻って  $H_2O$  氷では、低圧相である Ih 相の準弾性中性子散乱の測定結果から量子多体効果が議論されている[1-3]。しかし、低圧相では水素のトンネリング振幅は小さいと考えられるので、サブ課題Cでは高圧中性子散乱実験[4]を想定して圧縮によりトンネリング振幅の増大が期待される  $H_2O$  氷高圧相(VII 相)の水素結合ネットワークにおける量子多体効果を探究している[5]。サブ課題Dとの連携研究ではスピン系で成功しているテンソルネットワーク法を氷高圧相の量子多体効果の研究に適用することを目指す。

**(2) 固体酸素の電子状態:** X線回折(XRD)は結晶構造の有力な測定手段であるが、軽元素や非晶質では、XRDにより極限環境下で得られる構造情報は非常に限られている。XRDの相補的な測定手段の一つにX線ラマン散乱(XRS)がある[6]。XRSでは、高エネルギーX線が原子の内核電子を励起する際に失うエネルギーのスペクトルを測定することにより原子近傍の電子状態に関する情報を得る。酸素は地球内部に豊富に存在する元素であるが、地球深部における珪酸塩融体の構造研究の基礎として、本研究では端物質である固体酸素の K 殻 XRS スペクトルの測定結果を第一原理計算により解釈することを目的とする。固体酸素  $\epsilon$  相の磁性を調べる過程で取りわけスピン偏極計算において密度汎関数法(GGA+U 法)を越えた量子多体的な手法の必要性が明らかになった[7, 8]。そのような方法としては、第一原理量子モンテカルロ法などがあるが、サブ課題Dとの連携研究として量子化学の計算方法とテンソルネットワーク法を組み合わせた計算方法[9]を検討する。

**(3) 有限温度動的線形応答関数:** 有限温度動的線形応答関数は時間依存相関関数

$$\delta B(t) = 2 \operatorname{Im} \frac{\operatorname{Tr}[e^{-\beta H} e^{+iHt} B e^{-iHt} A]}{\operatorname{Tr}[e^{-\beta H}]}$$

のフーリエ変換

$$\chi_{BA} = \left\langle \left\langle \int_0^T dt e^{+i(\omega+i\eta)t} \delta B(t) \right\rangle \right\rangle$$

として計算される。サブ課題Cで保有している「ランダムベクトルを用いた有限温度線形応答関数の計算」[10]の手法ではこの状態和の計算をランダムベクトル  $|\xi\rangle$  [11]を使って

$$\delta B(t) = 2 \operatorname{Im} \frac{\langle \xi | e^{-\beta H/2} e^{+iHt} B e^{-iHt} A e^{-\beta H/2} | \xi \rangle}{\langle \xi | e^{-\beta H} | \xi \rangle}$$

と確率的・近似的・効率的に評価する。この方法を「テンソルネットワーク形式による波動関数の効率的な表現」へと拡張することにより、さらに効率的な新規アルゴリズムを開発しサブ課題Dの行うテンソルネットワークの研究に貢献する。

**(4) 学際的テンソルネットワーク：**テンソルネットワークは複雑系を理解するための強力な道具であり、物質科学に限らず脳科学、機械学習、量子機械学習などの分野で急速に利用が広がっている。各分野で活躍する「テンソルネットワーク」の研究者が集い、互いの分野の情報を交換し議論することにより学際的な研究の芽を育てる。

なお、上記のうち参考文献[7]は平成30年度の本課題成果を含む。

## [研究成果]

**(1) 氷の水素結合ネットワークにおける量子多体効果：**第一原理計算とWKB近似をもちいて氷VII相での水素の協奏的トンネリング振幅を圧力の関数として評価する手法を確立した。これは、より正確なインスタントン近似によるトンネリング振幅の計算の基礎になるものであり、今後テンソルネットワーク計算を行う際の格子モデルのパラメータに使われる。氷VII相の水素結合は、3次元の自己クラスレート型ネットワーク構造を持っているので、テンソルネットワーク法を3次元系へ拡張することが課題であることが明らかになった。

**(2) 固体酸素の電子状態：**固体酸素の問題は、一見、格子モデルが必要なテンソルネットワークに馴染まないように見えるが、各原子に付随する局在基底をもちいて波動関数を表現すれば各原子における量子化学の問題をテンソルネットワークで繋いだものと見なせる[9]。そのような手法は1次元系においてすでに成功しているので、ここでも3次元系でのテンソルネットワークの開発が今後の課題となることが分かった。一方、サブ課題Cでもともと問題になっていたGGA+U法に関する問題は、より正確なメタGGA近似(SCAN)[12]を使用することで回避できることがわかった。そもそも密度汎関数法には+Uに相当するクーロン力は含まれており、密度汎関数に準局所近似を用いた際に近似しきれなかった部分を補正するために+Uが導入されたので、より正確なSCAN密度汎関数を用いることで+Uを用いずに $\epsilon$ 相の良い計算結果が得られることが明らかになった[7]。

**(3) 有限温度動的線形応答関数：**ランダムベクトル法[10, 11]におけるランダムベクトル $|\xi\rangle$ の代わりにランダムテンソルネットワーク $|\Phi\rangle$ を用いて相関関数における状態和を計算することにより、ランダムベクトル法をテンソルネットワーク形式に拡張できることを数学的に証明した。また、1次元ハイゼンベルク鎖( $N_{\text{spin}}=100$ )について有限温度における平均エネルギーを数値計算し従来法であるMETTS法[13]と同等程度以上の性能を持つことを確かめた。サブ課題Dで行われるテンソルネットワーク計算で活用されることが期待される。

**(4) 学際的テンソルネットワーク：**サブ課題C、サブ課題Dのメンバーに加えて、ポスト「京」萌芽的課題4「思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用」、理化学研究所・革新知能統合研究センター、理化学研究所・開拓研究本部などから計18人が参加して、テンソルネットワークの基礎および量子力学、機械学習、量子機械学習などへの応用について活発に議論した。上記のサブ課題C独自の

ランダムテンソルネットワーク法のアイデアは、このワークショップでの大久保毅博士との議論に触発されて生まれたものである。

**[参考文献]**

- [1] O. Benton, O. Sikora, and N. Shannon, Phys. Rev. B 93, 125143 (2016).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.93.125143>
- [2] L. Bove et al., Phys. Rev. Lett. 103, 165901 (2009).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.165901>
- [3] A. I. Kolesnikov et al., Phys. Rev. B 98, 064301 (2018).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.98.064301>
- [4] 文科省科研費新学術領域研究新学術領域研究(領域提案型), 高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学, <http://yagi.issp.u-tokyo.ac.jp/shingakujutsu/index.html>
- [5] 飯高敏晃, 高圧力の科学と技術 27, 174 (2017).  
<http://dx.doi.org/10.4131/jshpreview.27.174>
- [6] 福井宏之, 高圧力の科学と技術 18, 31 (2008).  
<http://dx.doi.org/10.4131/jshpreview.18.31>
- [7] L. T. Anh et al., (unpublished).
- [8] E. B. Linscott et al., Phys. Rev. B 98, 235157 (2018).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.98.235157>
- [9] S. Szalay et al., International Journal of Quantum Chemistry 115, 1342 (2015).  
<http://dx.doi.org/10.1002/qua.24898>
- [10] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. Lett. 90, 047203 (2003).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.047203>
- [11] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. E 69, 057701 (2004).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.69.057701>
- [12] J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 115, 036402 (2015).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.036402>
- [13] S. R. White, Phys. Rev. Lett. 102, 190601 (2009).  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.190601>

### 4-3. 活動（研究会等）

別添3をご参照ください。

### 4-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
① サブ課題A 破壊とカタストロフィ	国立大学法人東北大学	金属材料研究所 教授 久保 百司
	国立大学法人東京大学	地震研究所 准教授 波多野 恭弘
	国立大学法人大阪大学	大学院基礎工学研究科 教授 尾方 成信
	国立大学法人金沢大学	理工研究域 教授 下川 智嗣
	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構	システム計算科学センター 研究主幹 山口 正剛
② サブ課題B 相転移と流動	国立大学法人東北大学	大学院理学研究科 教授 川勝 年洋
	国立大学法人東京大学	物性研究所 准教授 野口 博司
	国立大学法人九州大学	大学院工学研究院 准教授 津田 伸一
③ サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性	国立研究開発法人理化学研究所	情報システム本部 計算工学応用開発ユニット 専任研究員 飯高 敏晃
	国立研究開発法人物質・材料研究機構	国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 MANA 主任研究者 宮崎 剛
④ サブ課題D 量子力学の基礎と情報	国立大学法人東京大学	物性研究所 教授 川島 直輝
	国立大学法人筑波大学	計算科学研究センター 教授 藏増 嘉伸
	国立大学法人横浜国立大学	大学院工学研究院 教授 小坂 英男
プロジェクトの総合的推進	国立大学法人東北大学	金属材料研究所 教授 久保 百司

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」（サブ課題A 破壊とカタストロフィ）（サブ課題B 相転移と流動）

機関名 国立大学法人東北大学

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
量子分子動力学法に基づくCVD成長シミュレータの開発と応用（招待講演）	久保百司	日本学術振興会透明酸化物光・電子材料第166委員会第79回研究会（東京工業大学/東京）	H30.4	国内
計算科学の基礎と材料設計への応用（招待講演）	久保百司	技術情報協会セミナー（技術情報協会/東京）	H30.4	国内
トライボケミカル反応の計算科学シミュレーション（招待講演）	久保百司	トライボロジー会議2018春（国立オリンピック記念青少年総合センター/東京）	H30.5	国内
水潤滑下における炭化ケイ素と窒化ケイ素のなじみ過程の違い：第一原理分子動力学シミュレーション解析（口頭発表）	大谷優介、 中村文哉、 久保百司	トライボロジー会議2018春（国立オリンピック記念青少年総合センター/東京）	H30.5	国内
粗視化モデルを用いた高分子材料の破壊シミュレーション（招待講演）	樋口祐次	つくばソフトマター2018（産業技術総合研究所/茨城）	H30.6	国内
Multiscale Modeling on Complex Multiphase Flows（招待講演）	Toshihiro Kawakatsu	Nano-structured soft matter: a synergy of approaches to amphiphilic and block	H30.6	国外

		copolymer systems (Lincoln/UK)		
マテリアルインフォマティクス・計算科学を活用した材料設計とその応用事例 (招待講演)	久保百司	日本テクノセンターセミナー (日本テクノセンター/東京)	H30.7	国内
Super-Large Scale Molecular Dynamics Simulation on Sintering Dynamics of Solid Oxide Fuel Cell System (口頭発表)	Momoji Kubo	International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE) 2018 (Singapore/Singapore)	H30.7	国外
岩石のミクロな摩擦現象と地震メカニズムに関する連携研究 (口頭発表)	大谷優介、 久保百司、 波多野恭弘	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
サブ課題B『相転移と流動』の進捗と体制 (招待講演)	川勝年洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
サブ課題AB連携『マルチスケールシミュレーションを用いたアモルファス固体の破壊シミュレーション』 (招待講演)	川勝年洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Elongational Flow of Polymer Melts (口頭発表)	Takahiro Murashima	First International Conference on 4D Materials and Systems	H30.8	国外

		(Yamagata University/Yamagata)		
摩擦界面における化学反応ダイナミクス of マルチフィジックスシミュレーション (招待講演)	久保百司	日本分析化学会第67年会 (東北大学川内キャンパス/仙台)	H30.9	国内
1千万原子系大規模分子動力学解析による多結晶チタンの粒界割れメカニズムの検討 (口頭発表)	宮崎成正、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司	日本金属学会 2018年秋期講演大会 (東北大学川内キャンパス/仙台)	H30.9	国内
大規模粗視化分子動力学法による分子論的立場からの結晶性高分子の破壊 (口頭発表)	樋口祐次	第67回高分子討論会 (北海道大学札幌キャンパス/札幌)	H30.9	国内
Lecture 1: Fundamentals/Methodology: Multiscale Simulation Methods in Complex Fluids (招待講演)	Toshihiro Kawakatsu	2018 International Symposium on Multiple Scale Modelling of Complex Fluids - Fundamental Challenge and Industrial Applications (Guangzhou/China)	H30.9	国外
Lecture 2: Applications: Dynamics of Polymer/Surfactant Systems (招待講演)	Toshihiro Kawakatsu	2018 International Symposium on Multiple Scale Modelling of Complex Fluids - Fundamental Challenge and Industrial Applications (Guangzhou/China)	H30.9	国外
高分子材料等の複雑流動解析のためのマルチスケールシミュレーション手法 (招待講演)	森井洋平、川勝年洋	第67回高分子討論会 (北海道大学札幌キャンパス/札幌)	H30.9	国内

SPHとMDを用いたマルチスケールシミュレーション手法の提案II (口頭発表)	森井洋平、川勝年洋	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30. 9	国内
新スーパーコンピューティングシステム “MASAMUNE-IMR” のトライボロジー研究への応用 (招待講演)	久保百司	2018年度第2回トライボケミストリー研究会 (函館市臨海研究所/北海道)	H30. 10	国内
Supercomputer Post-K Project in Japan “Challenge of Basic Science - Exploring Extremes through Multi-Physics and Multi-Scale Simulations” (口頭発表)	Momoji Kubo	First Symposium on Multi-Scale and Multi-Physics Computational Materials Science (Taipei/Taiwan)	H30. 10	国外
Multi-Physics Simulation on Fracture and Wear Processes with Chemical Reactions (口頭発表)	Momoji Kubo, Narumasa Miyazaki, Yusuke Ootani and Nobuki Ozawa	Summit of Materials Science 2018 (Sendai/Japan)	H30. 10	国外
Supercomputer Post-K Project “Challenge of Basic Science - Exploring Extremes through Multi-Physics and Multi-Scale Simulations” (口頭発表)	Momoji Kubo	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30. 10	国外
Large-Scale Reactive Molecular Dynamics Analysis for the Intergranular Stress Corrosion Cracking Mechanism on Titanium under Water Environment (ポスター発表)	Narumasa Miyazaki, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo	Summit of Materials Science 2018 (Sendai/Japan)	H30. 10	国外

Molecular Dynamics Simulation Study on the Structure, Role, and Formation Mechanism of Tribofilms of Silicon-Based Materials in Water (口頭発表)	Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Naoki Takahashi, Koshi Adachi and Momoji Kubo	the 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling(MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30.10	国外
Molecular Dynamics Simulation Study on Tribolayer Formation of Silicon-Based Ceramics in Water Lubrication System (ポスター発表)	Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Naoki Takahashi and Momoji Kubo	Summit of Materials Science 2018 (Sendai/Japan)	H30.10	国外
複雑混相流道のマルチスケールシミュレーション (招待講演)	川勝年洋	PCoMSシンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会 2018 (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.10	国内
両親媒性分子膜の粗視化モデル (招待講演)	川勝年洋	研究会：ベシクルの変形の物理と数理 (東北大学数理科学記念館/仙台)	H30.10	国内
Multiscale simulation of polymeric solids for fracture processes (ポスター発表)	Takahiro Murashima, Shingo Urata	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling(MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30.10	国外
On the fly computation of intermediate scattering function (口頭発表)	Takahiro Murashima	The 6th International Conference on Smart Systems Engineering 2018 (Yamagata University/Yamagata)	H30.10	国外

Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations on Growth, Etching, and Polishing Process of Electronics Materials (招待講演)	Momoji Kubo	Lectures at the State Key Laboratory for Manufacturing System Engineering (Xi'an/China)	H30.11	国外
高分子材料の変形・破壊プ ロセス解明に向けた大規模 粗視化分子動力学 シミュレ ーション (招待講演)	樋口 祐次	新化学技術推進協会 先端 化学・材料技術部会 コン ピュータケミストリ分科 会高分子WG 講演会 (旭 化成株式会社基盤技術研 究所/静岡)	H30.11	国内
Large-scale coarse- grained molecular dynamics simulations on fracture processes of lamellar structure in crystalline polymers (口 頭発表)	Yuji Higuchi	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling(MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30.11	国外
Molecular Dynamics Simulation Study on Friction and Wear Mechanism of Polymer Brush (口頭発表)	Momoji Kubo, Shuichi Uehara, Zhongmin Liu, Narumasa Miyazaki, Jingxiang Xu, Yuji Higuchi, Yusuke Ootani and Nobuki Ozawa	第28回日本MRS年次大会 (北九州国際会議場/仙 台)	H30.12	国内
伸長流動の粗視化分子動力 学シミュレーション (口頭 発表)	村島隆浩	2018年度高分子基礎物性 研究会・高分子計算機科 学研究会・高分子ナノテ	H30.12	国内

		クノロジー研究会 合同 討論会 (大阪大学/大阪)		
Multi-Physics Simulations on Materials Design by Superlarge-Scale Molecular Dynamics Method (招待講演)	久保百司	シミュレーションによる 「自然科学における階層 と全体」研究会 (犬山国 際観光センター/愛知)	H31.1	国内
マルチフィジックス・マル チスケールシミュレーショ ンの材料設計・プロセス設 計への応用と今後の展望 (招待講演)	久保百司	ナノ材料シミュレーショ ンセミナー ～古典分子 動力学、量子化学計算、 第一原理計算、GUI～ (山 王健保会館/東京)	H31.1	国内
分子シミュレーションによる 結晶性高分子の劣化と破壊 (招待講演)	樋口祐次	18-5 ポリマーフロンテ ィア21 (積水化学工業 (株) 京都研究所講堂/京 都)	H31.1	国内
Introduction of Our New Supercomputing System MASAMUNE-IMR and Its Application to Stress Corrosion Cracking Process of Metals under Water Environment (口頭発 表)	Momoji Kubo	TU-USTB Joint Lab 3rd Workshop (Guangzhou/China)	H31.1	国外
1億原子系大規模金属モデ ルにおける応力腐食割れの 分子動力学シミュレーショ ン (口頭発表)	宮崎成正、 大谷優介、 尾澤伸樹、 久保百司	第2回ポスト「京」萌芽的 課題「基礎科学の挑 戦」・「極限マテリア ル」合同公開ワークショ ップ (ステーションコン ファレンス東京/東京)	H31.1	国内
粗視化分子動力学法を用い た1億原子シミュレーショ ンによる結晶性高分子の伸 長プロセス (口頭発表)	樋口祐次	第2回ポスト「京」萌芽的 課題「基礎科学の挑 戦」・「極限マテリア ル」合同公開ワークショ ップ (ステーションコン ファレンス東京/東京)	H31.1	国内

サブ課題B「相転移と流動」の全体概要と体制（招待講演）	川勝年洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ（ステーションコンファレンス東京/東京）	H31.1	国内
弾塑性体のマルチスケールシミュレーション（招待講演）	森井洋平、川勝年洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ（ステーションコンファレンス東京/東京）	H31.1	国内
Multi-Physics Simulation for Material Design by Supercomputer（招待講演）	久保百司	第34回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ（大阪大学豊中キャンパス/大阪）	H31.2	国内
Molecular Dynamics Simulations on Tribochemical Reaction Dynamics for Super-low Friction and Wear Materials（口頭発表）	Momoji Kubo	Fusion Research for Sustainable Society, Tohoku (Sendai/Japan)	H31.2	国外
焼結現象のマルチスケール計算科学シミュレーション（招待講演）	久保百司	日本学術振興会先進セラミックス124委員会第156回研究会（東京工業大学田町キャンパス/東京）	H31.2	国内
<マテリアルズインフォマティクスの根幹を担う>計算科学シミュレーション技術の基礎と応用（招待講演）	久保百司	情報機構セミナー（品川区立総合区民会館/東京）	H31.3	国内
金属表面における応力腐食割れプロセスの超大規模反応分子動力学シミュレーション（口頭発表）	宮崎成正	「原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用」研究会（大阪	H31.3	国内

		大学豊中キャンパス/大阪)		
複雑流体のマルチスケールシミュレーション (招待講演)	森井洋平、川勝年洋	研究会：原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用 (大阪大学・基礎工学研究科/大阪)	H31.3	国内
高分子等の複雑流動のマルチスケールモデリング (招待講演)	森井洋平、川勝年洋	公益社団法人新化学技術推進協会 先端化学部会 コンピュータケミストリ分科会 講演会 (新化学技術推進協会/東京)	H31.3	国内
分子動力学法による中間散乱関数のオンザフライ計算と高分子溶融体への応用 (口頭発表)	村島隆浩	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
Fracture process of double-network gels by coarse-grained molecular dynamics simulation	Yuji Higuchi, Keisuke Saito, Takamasa Sakai, Jian Ping Gong and Momoji Kubo	Macromolecules, 51(8), 3075-3087 (2018).	H30.4	国外
Effect of Fluorination on Friction Forces between Concentrated Polymer Brushes in the Dry State:	Shuichi Uehara, Zhongmin Liu, Jingxiang	Chemistry Letters, 47(6), 784-786 (2018).	H30.4	国内

All-atom Molecular Dynamics Simulation Study	Xu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa and Momoji Kubo			
Contrasting Roles of Water at Sliding Interfaces between Silicon-Based Materials: First-Principles Molecular Dynamics Sliding Simulations	Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Takahiro Hatano and Momoji Kubo	Jurnal of Physical Chemistry C, 122(19), 10459-10467 (2018).	H30.5	国外
Molecular Interactions between Pentacene and Imidazolium Ionic Liquids: A Molecular Dynamics Study	Ida Bagus Hendra Prastiawan, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Yuji Matsumoto and Momoji Kubo	Chemistry Letters, 47(9), 1154-1157 (2018).	H30.7	国内
Ionic Conductivity in Ionic Liquid Nano Thin Films	Shingo Maruyama, Ida Bagus Hendra Prastiawan, Kaho Toyabe, Yuji Higuchi, Tomoyuki	ACS Nano, 12(10), 10509-10517 (2018).	H30.9	国外

	Koganezawa, Momoji Kubo and Yuji Matsumoto			
Thinning Approximation for Calculating Two- Dimensional Scattering Patterns in Dissipative Particle Dynamics Simulations under Shear Flow	Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Nobuyuki Iwaoka	Polymers, 10(11), 1224/1-15 (2018).	H30.11	国外
Elongational viscosity of weakly entangled polymer melt via coarse-grained molecular dynamics simulation	Takahiro Murashima, Katsumi Hagita, and Toshihiro Kawakatsu	日本レオロジー学会誌, 46(5), 207-220 (2018).	H30.12	国内

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」（サブ課題A 破壊とカタストロフィ）

機関名 国立大学法人東京大学 地震研究所

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Tidal effects on seismic activity and rupture nucleation process（口頭発表）	波多野恭弘	JpGU2018（幕張メッセ/千葉）	H30.5	国内
地震の核形成過程に対する周期的応力摂動の効果（口頭発表）	齋藤拓也	JpGU2018（幕張メッセ/千葉）	H30.5	国内
Effects of stress perturbation on rupture nucleation process（招待講演）	波多野恭弘	CoMFoS18（京都大学/京都）	H30.6	国内
核形成過程と地震発生率の一般的関係と潮汐応答への応用（口頭発表）	波多野恭弘	日本地震学会秋季大会（ビッグパレットふくしま/福島）	H30.10	国内
地震の核形成過程における応力摂動の影響（口頭発表）	齋藤拓也	日本地震学会秋季大会（ビッグパレットふくしま/福島）	H30.10	国内
Fracture of random media: mechanical instability and enhanced susceptibility（招待講演）	波多野恭弘	Physics of jammed Matter (Kyoto University/Kyoto)	H30.10	国外
Creep rupture and Omori-Utsu law: fiber bundle	波多野恭弘	The 9th International Conference on	H30.10	国外

model approach (口頭発表)		Multiscale Materials Modeling(MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)		
Rupture of random media: mechanical instability and enhanced susceptibility (招待講演)	波多野恭弘	Dynamics Days Asia Pacific 10 (Xiamen/China)	H30.11	国外
Fate of accelerating slip on self-affine rough interfaces (招待講演)	波多野恭弘	Soft Matter Physics: from the perspective of the essential heterogeneity (九州大学/福岡)	H30.12	国外
Rupture precursor on self-affine rough interface (招待講演)	波多野恭弘	Modeling Tribology: friction and fracture across scales (Lausanne/Switzerland)	H31.1	国外

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
Creeplike behavior in athermal threshold dynamics: Effects of disorder and stress	Subhadeep Roy and Takahiro Hatano	PHYSICAL REVIEW E, 97(6), 062149/1-12 (2018).	H30.6	国外
Simple statistics for complex Earthquake time distributions	Teimuraz Matcharashvili, Takahiro Hatano, Tamaz Chelidze,	Nonlinear Processes in Geophysics, 25(3), 497-510 (2018).	H30.7	国外

	and Natalia Zhukova			
Geological implication of grain-size segregation in dense granular matter	Ryo Ito and Takahiro Hatano	Philosophical Transactions A, 377(2136), 20170390 (2018).	H30.8	国外
Rheology of Cohesive Granular Particles under Constant Pressure	Yuta Yamaguchi, Satoshi Takada, and Takahiro Hatano	Journal of Physical Society of Japan, 87(9), 094802/1-8 (2018).	H30.8	国外
Dynamic Rupture Simulation Reproduces Spontaneous Multifault Rupture and Arrest During the 2016 Mw 7.9 Kaikoura Earthquake	Ryosuke Ando and Yoshihiro Kaneko	Geophysical Research Letters, 45(23), 12875-12883 (2018).	H30.12	国外
Longer Migration and Spontaneous Decay of Aseismic Slip Pulse Caused by Fault Roughness	So W. Ozawa, Nobuki Kame, and Takahiro Hatano	Geophysical Research Letters, 46(2), 636-643 (2019).	H31.1	国外

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 (基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)」(サブ課題A 破壊とカタストロフィ)

機関名 国立大学法人大阪大学 大学院基礎工学研究科

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
岩石破壊とアモルファス塑性をつなぐメゾスケールモデルの統計性：地震学と材料科学の連携 (口頭発表)	新山友暁、 下川智嗣、 石井明男、 尾方成信、 波多野恭弘	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
Temperature dependent shear friction in metallic glass (口頭発表)	Akio Ishii, Tomoaki Niiyama, Takahiro Hatano, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30.10	国外
System-spanning shear avalanches induced by thermal structural relaxation in metallic glasses (口頭発表)	Tomoaki Niiyama, Masato Wakeda, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30.10	国外

Origin of negative strain rate dependency of metallic glass flow stress (ポスター発表)	Akio Ishii, Tomoaki Niiyama, Takahiro Hatano, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata	2018 MRS Fall Meeting & Exhibit (MRS2018) (Boston/USA)	H30.11	国外
固体材料の塑性現象における突発的・臨界的な変形挙動 (口頭発表)	新山友暁、下川智嗣、譯田真人、石井明男、尾方成信、波多野恭弘	第59回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内
地震と材料破壊をつなぐすべり破壊モデルの構築～金属ガラスのすべり弱化の物理～ (口頭発表)	石井明男、新山友暁、波多野恭弘、下川智嗣、尾方成信	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ (ステーションコンファレンス東京/東京)	H31.1	国内

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」（サブ課題A 破壊とカタストロフィ）

機関名 国立大学法人金沢大学 理工研究域

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Mechanical Behaviors Affected by Defect Structures and Intermittent Plasticity in Nano-Scale Materials (口頭発表)	T. Niiyama, T. Shimokawa	2018 MRS Spring Meeting & Exhibit (MRS2018) (Phoenix/USA)	H30.4	国外
転位組織の崩壊に起因する弾性波と強度の関係：原子シミュレーションによる検討（ポスター発表）	谷野公亮、 新山友暁、 下川智嗣	日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム（高知工科大学/高知）	H30.5	国内
二原子混合固体材料における組織・強度の原子間ポテンシャル依存性（ポスター発表）	園田郁未、 新山友暁、 下川智嗣	日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム（高知工科大学/高知）	H30.5	国内
熱的構造緩和を加えた金属ガラスにおける雪崩的な塑性挙動と変形局在化（ポスター発表）	新山友暁、 譚田真人、 下川智嗣、 尾方成信	日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム（高知工科大学/高知）	H30.5	国内
規則・不規則混合固体材料の強さと変形機構の検討（口頭発表）	原一輝、 新山友暁、 下川智嗣	日本材料学会第3回マルチスケール材料力学シンポジウム（高知工科大学/高知）	H30.5	国内

フェライト/セメンタイト層状組織の延性に界面の転位吸収能力が及ぼす影響の結晶塑性シミュレーション (口頭発表)	安田洋平、大橋鉄也、下川智嗣、新山友暁	日本材料学会第67期通常総会・学術講演会 (高知工科大学/高知)	H30. 5	国内
分子動力学シミュレーションによるナノ組織材料の変形・力学解析 (招待講演)	下川智嗣	日本機械学会 第8回材料力学における異分野融合に関する研究会 (金沢大学/金沢)	H30. 7	国内
固体材料の非弾性変形における非平衡臨界挙動 (口頭発表)	新山友暁、下川智嗣	日本金属学会 2018年秋期講演大会 (東北大学川内キャンパス/仙台)	H30. 9	国内
フェライト・セメンタイト積層体の延性に対する界面の役割: マルチスケールアプローチ (口頭発表)	下川智嗣、安田洋平、大橋鉄也、新山友暁	日本金属学会 2018年秋期講演大会 (東北大学川内キャンパス/仙台)	H30. 9	国内
Evolution of shear deformation avalanches in annealed metallic glasses (招待講演)	T. Niiyama, M. Wakeda, T. Shimokawa, S. Ogata	Physics of Jammed Matter (Kyoto University/Kyoto)	H30. 10	国外
き裂進展現象の温度およびひずみ速度依存性に対する決定論的・確率論的シミュレーション (ポスター発表)	藤元大志、新山友暁、下川智嗣	日本機械学会第31回計算力学講演会 (徳島大学/徳島)	H30. 11	国内
System-spanning shear avalanches induced by thermal structural relaxation in metallic glasses (口頭発表)	T. Niiyama, M. Wakeda, T. Shimokawa, S. Ogata	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30. 11	国外
塑性変形に起因したアコースティック・エミッション	谷野公亮、新山友暁、下川智嗣	日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス (福井大学/福井)	H30. 12	国内

の分子動力学解析（口頭発表）				
原子シミュレーションによる結晶と非晶質の混在組織における力学特性解析（口頭発表）	園田郁未、 新山友暁、 下川智嗣	日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス（福井大学/福井）	H30.12	国内
Influence of Interface-mediated plasticity on mechanical properties of nanostructured materials（招待講演）	Tomotsugu Shimokawa	7th ESISM Workshop in Kyoto, “Fundamental Issues of Structural Materials”（Kyoto University/Kyoto）	H31.1	国外
結晶・非晶質混在構造の変形と強度に関する原子シミュレーション（招待講演）	下川智嗣、 新山友暁	日本金属学会2019年春期講演大会（東京電機大学/東京）	H31.3	国内

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 (基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)」(サブ課題A 破壊とカタストロフィ)

機関名 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
鉄の液体金属脆化：第一原理計算 (口頭発表)	山口正剛、海老原健一、鈴木知明、板倉充洋	日本金属学会 2018年秋期講演大会 (東北大学川内キャンパス/仙台)	H30. 9	国内
Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel (招待講演)	Masatake Yamaguchi	The Nuclear Materials Conference, NuMat2018 (Seattle/USA)	H30. 10	国外
Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel (口頭発表)	Masatake Yamaguchi	The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (Osaka International Convention Center/Osaka)	H30. 11	国外

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）」（サブ課題B 相転移と流動）（サブ課題D 量子力学の基礎と情報）

機関名 国立大学法人東京大学 物性研究所

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
希薄高分子溶液のカルマン渦の分子動力学シミュレーション（招待講演）	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会 「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所/千葉）	H30.4	国外
テンソルネットワークくりこみ群を用いた磁化の高次モーメント計算と有限サイズスケリング（ポスター発表）	森田悟史	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会 「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所/千葉）	H30.4	国内
有向浸透臨界現象におけるエントロピーから見たユニバーサリティクラス（ポスター発表）	原田健自	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会 「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所/千葉）	H30.4	国内
分子動力学法による複雑流体中のカルマン渦の解析（ポスター発表）	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	ガラス転移と関連分野の最先端研究（東京大学物性研究所/千葉）	H30.5	国内
フラストレーション系の量子スピンネマティック相（口頭発表）	坂井徹	新学術領域科研費J-Physics：多極子系伝導系の物理 平成30年度領域全体会議（東北大学/仙台）	H30.5	国内

分子動力学法による複雑流体中のカルマン渦の解析 (口頭発表)	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	つくばソフトマター研究会2018 (産業技術総合研究所/茨城)	H30.6	国外
複雑流体中のカルマン渦 (口頭発表)	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司、 森井洋平、 川勝年洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
サブ課題D「量子力学の基礎と情報」進捗と体制 (招待講演)	川島直輝	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
Exotic Quantum Spin Liquid of Kagome Lattice Antiferromagnet (口頭発表)	T. Sakai	International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018) (Sendai International Center/Sendai)	H30.7	国外
Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration (ポスター発表)	T. Sakai	21th International Conference on Magnetism(ICM2018) (San Francisco/USA)	H30.7	国外
Quantized magnon-excitation continuum in quasi-one-dimensional S=1 antiferromagnetic spin systems (ポスター発表)	T. Suzuki	21st International Conference on Magnetism(ICM2018) (San Francisco/USA)	H30.7	国外
Field dependence of THz spectra of effective	T. Suzuki	21st International Conference on	H30.7	国外

models for $\alpha$ -RuCl <sub>3</sub> (ポスター発表)		Magnetism(ICM2018) (San Francisco/USA)		
Quantized excitation spectra by magnon confinement in quasi S=1 spin-chain systems (口頭発表)	T. Suzuki	21st International Conference on Magnetism(ICM2018) (San Francisco/USA)	H30.7	国外
Dynamical properties of $\alpha$ -RuCl <sub>3</sub> in magnetic fields (ポスター発表)	T. Suzuki	HFM2018 (California/USA)	H30.7	国外
Tensor network study on Kitaev materials (招待講演)	T. Okubo	21st International Conference on Magnetism(ICM2018) (San Francisco/USA)	H30.7	国外
テンソルネットワーク法の情報処理 (招待講演)	川島直輝	物性研短期研究会「量子情報・物性の新潮流 — 量子技術が生み出す多様な物性と情報処理技術 —」(東京大学柏キャンパス/千葉)	H30.8	国内
エンタングルメント分岐とその活用 (口頭発表)	原田健自	物性研短期研究会「量子情報・物性の新潮流 — 量子技術が生み出す多様な物性と情報処理技術 —」(東京大学柏キャンパス/千葉)	H30.8	国内
カルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション (口頭発表)	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	日本物理学会 2018年秋 季大会 (物性) (同志社 大学京田辺キャンパス/ 京都)	H30.9	国内
高次テンソルくりこみ群におけるエンタングルメントフィルタリング (口頭発表)	森田悟史	日本物理学会 2018年秋 季大会 (物性) (同志社 大学京田辺キャンパス/ 京都)	H30.9	国内
Field Induced Spin Nematic Phase of Low	T. Sakai	The 16th International Conference on	H30.9	国外

Dimensional Magnets (口頭発表)		Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics (The University of Tokyo Kashiwanoha Campus/Japan)		
シェルピンスキーのホットカーペットにイジング乗せてみた (口頭発表)	西野友年	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30. 9	国内
蜂の巣格子磁性体 $\alpha$ -RuCl <sub>3</sub> の有効模型と磁場中励起2 (口頭発表)	鈴木隆史	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30. 9	国内
エントロピーを用いた(1+1)次元有向浸透現象の動的過程の特徴付け (口頭発表)	原田健自	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30. 9	国内
Angular-momentum conservation in the discretization of Navier-Stokes equation of viscous fluids (口頭発表)	Hiroshi Noguchi	Workshop on Simulations for the Dynamics of Soft-Matters (2018) (名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー/愛知)	H30. 10	国外
Quantum Monte Carlo for Spin Systems and Beyond (招待講演)	川島直輝	Jim Gubernatis and Quantum Monte Carlo (Los Alamos/USA)	H30. 10	国外
Tensor network quantum states and their application to quantum spin systems (招待講演)	T. Okubo	Interdisciplinary Workshop on Tensor Network (理化学研究所/埼玉)	H30. 10	国外
カルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション (口頭発表)	浅野優太、渡辺宙志、野口博司	第32回分子シミュレーション討論会 (産業技術総合研究所/茨城)	H30. 11	国内

低次元量子スピン系におけるスピンネマティック相 (ポスター発表)	坂井徹	第12回物性科学領域横断研究会 (奈良先端科学技術大学院大学/奈良)	H30. 11	国内
直交ダイマー系の量子相転移とESR禁制遷移 (口頭発表)	坂井徹	第57回電子スピンサイエンス学会年会 (北海道大学/札幌)	H30. 11	国内
擬一次元S=1反強磁性スピン鎖における離散磁気励起 (口頭発表)	鈴木隆史	基研研究会「スピン系物理の最前線」 (京都大学基礎物理学研究所/京都)	H30. 11	国内
Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation (ポスター発表)	Kenji Harada	International Conference on Advances in Physics of Emergent orders in Fluctuations (APEF2018) (The University of Tokyo, Hongo Campus/Tokyo)	H30. 11	国外
フラストレートした正方格子ハイゼンベルグ模型における大きなスピン揺らぎと1/2磁化プラトー (招待講演)	大久保毅	基研研究会「スピン系物理の最前線」 (京都大学基礎物理学研究所/京都)	H30. 11	国内
Efficient Tensor Decomposition and Its Application (招待講演)	川島直輝	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for Computational Science/Kobe)	H30. 12	国外
Improvement and enhancement of the higher-order tensor renormalization group method (招待講演)	森田悟史	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for Computational Science/Kobe)	H30. 12	国外

低次元量子スピン系におけるスピンネマティック相 (口頭発表)	坂井徹	東京大学物性研究所短期研究会「量子多体効果が生み出す液晶的電子状態」(東京大学物性研究所/千葉)	H30.12	国内
Field Induced Spin Nematic Phases in Low Dimensional Quantum Antiferromagnets (口頭発表)	T. Sakai	International Workshop on j-fermion Physics and Materials (Dunedin/New Zealand)	H30.12	国外
擬一次元S=1反強磁性スピン鎖における離散磁気励起 (ポスター発表)	T. Suzuki	ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」第4回シンポジウム(東京大学柏キャンパス/千葉)	H30.12	国内
Quantized excitation spectra by magnon confinement in quasi-one-dimensional S=1 spin systems (ポスター発表)	T. Suzuki	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for Computational Science/Kobe)	H30.12	国外
Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation (招待講演)	Kenji Harada	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for Computational Science/Kobe)	H30.12	国外
Tensor network study on Kitaev materials: Search for Kitaev spin liquid (招待講演)	T. Okubo	The 2nd Asia Pacific Workshop on Quantum Magnetism (Bangalore/India)	H30.12	国外

カルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション (口頭発表)	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ (ステーションコンファレンス東京/東京)	H31.1	国内
From Kitaev Model to String Gas via Tensor Networks (招待講演)	川島直輝	KEK連携コロキウム・研究会エディション (KEK つくばキャンパス/茨城)	H31.1	国内
低次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック相 (口頭発表)	坂井徹	第13回量子スピン系研究会 (東海村産業・情報プラザ/茨城)	H31.1	国内
カルマン渦に対するキャビテーションの影響 (口頭発表)	浅野優太、 渡辺宙志、 野口博司	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
S=2反強磁性鎖の磁化プラトー (招待講演)	坂井徹	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
Magnetization Process of the Triangular- and Kagome-Lattice Antiferromagnets (口頭発表)	T. Sakai	APS March meeting 2019 (Boston/USA)	H31.3	国外
謝爾賓斯基 (Sierpinski) 三角形上の横磁場イジングを HOTRG で調べてみた (口頭発表)	西野友年	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
蜂の巣格子拡張Kitaev模型の基底状態相図 (口頭発表)	鈴木隆史	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
Quantized magnon-excitation continuum in	T. Suzuki	APS March meeting 2019 (Boston/USA)	H31.3	国外

quasi one-dimensional antiferromagnetic S=1 Heisenberg systems (口頭発表)				
吸収状態に支配される有向浸透現象のエントロピー (口頭発表)	原田健自	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation (口頭発表)	Kenji Harada	APS March Meeting 2019 (Boston/USA)	H31.3	国外

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
Polymer effects on Karman vortex	Yuta Asano, Hiroshi Watanabe, Hiroshi Noguchi	Journal of Chemical Physics, 148(14), 144901 (2018).	H30.4	国内
Effective model with strong Kitaev interactions for $\alpha$ -RuCl <sub>3</sub>	T. Suzuki and S. Suga	Phys. Rev. B, 97(13), 134424/1-11 (2018).	H30.4	国外
Spin-one bilinear-biquadratic model on a star lattice	Hyun-Yong Lee, and Naoki Kawashima	Phys. Rev. B, 97(20), 205123/1-7 (2018).	H30.5	国外
層流・乱流遷移 - 非平衡相転移としての乱流	佐野 雅己、玉井 敬一	日本物理学会誌, 73(7), 463-468 (2018).	H30.7	国外
Spin Thermal Hall Conductivity of a Kagomé Antiferromagnet	Hayato Doki, Masatoshi Akazawa, Hyun-Yong Lee, Jung Hoon	Phys. Rev. Lett., 121(9), 097203/1-4 (2018).	H30.8	国外

	Han, Kaori Sugii, Masaaki Shimozawa, Naoki Kawashima, Migaku Oda, Hiroyuki Yoshida, and Minoru Yamashita			
Ground-State Phase Diagram of an Anisotropic $S = 1/2$ Ladder with Different Leg Interactions	T. Tonegawa, T. Hikihara, K. Okamoto, S. C. Furuya and T. Sakai	J. Phys. Soc. Jpn., 87(10), 104002 (2018).	H30.9	国外
Field dependence of THz spectra of effective models for $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$	T. Suzuki and S. Suga	AIP Advances, 8(10), 101414 (2018).	H30.9	国外
Field-enhanced quantum fluctuation in an $S=1/2$ frustrated square lattice	H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo, M. Yoshida, T. Kida, M. Hagiwara, Y. Kono, S. Kittaka, T. Sakakibara, M. Takigawa, Y. Iwasaki, and Y. Hosokoshi	Phys. Rev. B, 98(9), 094402/1-6 (2018).	H30.9	国外

Calculation of higher-order moments by higher-order tensor renormalization group	Satoshi Morita, Naoki Kawashima	Computer Physics Communications, 236(-), 65-71 (2018).	H30.10	国外
Optical bistability in a low-photon-density regime	Tatsuhiko Shirai, Synge Todo, Hans de Raedt, and Seiji Miyashita	Phys. Rev. A, 98(4), 043802/1-13 (2018).	H30.10	国外
SIMD vectorization for the Lennard-Jones potential with AVX2 and AVX-512 instructions	Hiroshi Watanabe and Koh M. Nakagawa	Computer Physics Communications, 237(-), 1-7 (2018).	H30.11	国外
Quantized excitation spectra by magnon confinement in quasi-one-dimensional S=1 spin systems	T. Suzuki and S. Suga	Phys. Rev. B [Editors' choice], 98(18), 180406(R) (2018).	H30.11	国外
Tensor-network study of a quantum phase transition on the Sierpiński fractal	Roman Krmar, Jozef Genzor, Yoju Lee, Hana Cencarikova, Tomotoshi Nishino, Andrej Gendiar	Phys. Rev. E, 98(6), 062114 (2018).	H30.12	国外
How to experimentally probe universal features of absorbing phase transitions using steady state	Keiichi Tamai and Masaki Sano	Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2018(-), 123207 (2018).	H30.12	国外

Canonical ensemble calculations of the magnetic susceptibility for a spin-1/2 spherical kagome cluster with Dyzloshinskii-Moriya interactions by using microcanonical thermal pure quantum states	K. Inoue, Y. Maeda, H. Nakano and Y. Fukumoto	IEEE Transactions on Magnetics, 55(2), 2700103 (2018).	H30.12	国外
Fast algorithm for generating random bit strings and multispin coding for directed percolation	Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Synge Todo, and Naoki Kawashima	J. Phys. Soc. Jpn., 88(2), 024004/1-8 (2019).	H31.1	国外
Snapshot spectra in the world-line quantum Monte Carlo for one-dimensional quantum spin systems	Kouichi Seki, Kouichi Okunishi	J. Phys. Soc. Jpn., 88(2), 24003/1-10 (2018).	H31.1	国外
Angular-momentum conservation in discretization of the Navier-Stokes equation for viscous fluids	Hiroshi Noguchi	Physical Review E, 99(2), 023307 (2019).	H31.2	国外
A series of magnon crystals appearing under ultrahigh magnetic fields in a kagomé antiferromagnet	R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo, A. Miyake, A. Matsuo, K. Kindo, M. Tokunaga, N. Kawashima, S. Takeyama, and Z. Hiroi	Nature Communications, 10(-), 1229/1-7 (2019).	H31.3	国外

Detecting signals of weakly first-order phase transitions in two- dimensional Potts models	Shumpei Iino, Satoshi Morita, Anders W. Sandvik, and Naoki Kawashima	J. Phys. Soc. Jpn., 88(3), 034006/1-8 (2019).	H31.3	国外
---	---	---	-------	----

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 (基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)」(サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性)

機関名 国立研究開発法人理化学研究所

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
第一原理計算の産業応用に関する現状 (招待講演)	前園涼	(公財)計算科学振興財団主催・第2回産業用クラウドスパコン利用推進協力会 (北陸先端科学技術大学東京サテライト/東京)	H30.3	国内
第一原理計算とベイズ統計を融合したデータ駆動型物質探索 (招待講演)	本郷研太	一般社団法人近畿化学協会エレクトロニクス部会平成30年度第1回研究会 (大阪科学技術センター/大阪)	H30.5	国内
Computational Approach to Material Design (招待講演)	R. Maezono	3rd RSU National and International Research Conference on Science and Technology, Social Science, and Humanities 2018 (RSUSSH 2018) (Bangkok/Thailand)	H30.5	国外
Recent progresses of Materials Informatics (招待講演)	Ryo Maezono	Seminar talk at Faculty of Science (Physics and Chemistry) (Bangkok/Thailand)	H30.5	国外

High Performance Computing and Materials Simulations (招待講演)	Ryo Maezono	NECTEC (National Institute of Electronics and Communication Technology) (Bangkok/Thailand)	H30.5	国外
First principles investigation of the vibrational properties of hydrous wadsleyite and hydrous ringwoodite (口頭発表)	J. Tsuchiya	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
Low-pressure analogs of MgSiO <sub>3</sub> post-perovskite at ultrahigh pressures by first principle (口頭発表)	K. Umemoto, R. Wentzcovitch	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
First principles determination of the stability field of the phase H (MgSiO <sub>4</sub> H <sub>2</sub> ) at lower mantle conditions (口頭発表)	J. Tsuchiya and K. Umemoto	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
混合アルカリ効果の再考 (口頭発表)	則竹史哉	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
Computational study of the quantum fluctuation on the $\delta$ -AlOOH crystal structure (口頭発表)	河津励、 飯高敏晃	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
地球深部液体の構造と物性 (招待講演)	飯高敏晃	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内
The failure of DFT and DFT+U on predictions of structural and magnetic properties of epsilon-oxygen (口頭発表)	The Anh Le, Masahiro Wada, Hiroshi Fukui,	JpGU2018 (幕張メッセ/千葉)	H30.5	国内

	Toshiaki Iitaka			
First Principles Investigation of the High-pressure Behavior of the FeOOH-AlOOH-Phase H System (口頭発表)	J. Tsuchiya	AOGS 15th Annual Meeting (Honolulu/USA)	H30.6	国外
Computational phonon analysis applied to ThCr <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> -type compounds (招待講演)	Aniwat Kesorn, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono	12th International Conference on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications (CMCEE) (Singapore/Singapore)	H30.7	国外
地球深部における揮発性元素循環モデルの構築に関する連携研究 (口頭発表)	土屋旬	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
高圧氷の第一原理経路積分セントロイド分子動力学シミュレーション (口頭発表)	池田隆司	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
水素化物高温超伝導体の探索と放射光実験への期待 (招待講演)	石河孝洋	SPring-8シンポジウム・サテライト研究会「計算科学による分光理論の進展 ～SPring-8との連携を目指して～」 (SPring-8 萌光館/兵庫)	H30.8	国内
Eigenstate-analysis using Sakurai-Sugiura method	A. Nakata, Y. Futamura,	ELSI Workshop 2018 (Virginia/USA)	H30.8	国外

with O(N)-DFT code CONQUEST (招待講演)	T. Sakurai, D. R. Bowler, T. Miyazaki			
First principles investigation of the high-pressure behavior of the FeOOH-AlOOH-phase H (MgSiO <sub>4</sub> H <sub>2</sub> ) system	J. Tsuchiya	IMA2018 (Melbourne/Australia )	H30.8	国外
Post-post-perovskite transitions in MgSiO <sub>3</sub> by first principles (招待講 演)	K. Umemoto	IUCr HP 2018 (Honolulu/USA)	H30.8	国外
物性データ生成エンジンと しての第一原理計算 (招待 講演)	本郷研太	Mi2iチュートリアルセミ ナー 第8回 ~基礎から 応用まで~ 第一原理計 算ベース 「ハイスルー プット計算のすべて」 (科学技術振興機構/東 京)	H30.9	国内
Large-Scale DFT Study of Ge/Si 3D Nanoislands and Core-Shell Nanowires (招 待講演)	T. Miyazaki	AiMES 2018 Meeting (Cancun/Mexico)	H30.9	国外
Difficulty to capture non-additive enhancement of stacking energy by conventional ab initio methods (招待講演)	Ryo Maezono	CECAM Workshops "Improving the accuracy of ab-initio predictions for materials" (Paris/France)	H30.9	国外
進化論的アルゴリズムを活 用したマテリアルズ・イン フォマティクスによる超伝 導水素化合物の探索 (口頭 発表)	石河孝洋、 中西章尊、 清水克哉	日本物理学会 2018年秋 季大会 (物性) (同志社 大学京田辺キャンパス/ 京都)	H30.9	国内

Pressure-induced structural change in magnesium silicate(基調講演)	T. Iitaka	International Symposium of New Emergent Materials at Extreme Conditions (Tianjin/China)	H30.9	国外
高圧氷の第一原理定温定圧セントロイド分子動力学シミュレーションII (口頭発表)	池田隆司	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30.9	国内
シロキサン架橋の電子状態の再考 (口頭発表)	則竹史哉	日本鉱物科学会2018年会 (山形大学/山形)	H30.9	国内
Machine Learning Clustering Technique Applied to X-Ray Diffraction Patterns to Distinguish Alloy Substitutions (口頭発表)	Ryo Maezono	2018 MRS Fall Meeting & Exhibit (MRS2018) (Boston/USA)	H30.11	国外
MgSiO <sub>3</sub> ポストポストペロブスカイト転移のためのアナログ物質の探索 (ポスター発表)	梅本幸一郎、 R. Wentzcovitch	第59回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内
固体硫酸の高圧賞に関する第一原理的研究 (口頭発表)	石河孝洋、 中西章尊、 清水克哉、 小田竜樹	第59回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内
地球深部における含水鉱物の分解と氷の存在状態 (招待講演)	土屋旬	第15回水素アトムクス研究会/第1回ハイドロジェノミクス研究会 (東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト/千葉)	H30.11	国内
含水鉱物における圧力による水素同位体分別の理論的研究 (口頭発表)	河津励、 飯高敏晃	第59回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内
DFT calculation for K-edge X-ray Raman spectrum	Le The Anh, Masahiro Wada,	第60回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内

of epsilon phase of solid oxygen (口頭発表)	Hiroshi Fukui, Toshiaki Iitaka			
Pressure-induced structural change in magnesium silicate melts (口頭発表)	Toshiaki Iitaka, Hong Van NGUYEN	第61回高圧討論会 (岡山理科大学/岡山)	H30.11	国内
Liquid Iron Alloys with Light Elements at Outer Core Conditions by First Principles (ポスター発表)	K. Umemoto, K. Hirose	AGU Fall meeting 2018 (Washington DC/USA)	H30.12	国外
First principles determination of the dissociation boundary of phase H (MgSiO <sub>4</sub> H <sub>2</sub> ) and possible existence of ice VII at lower mantle conditions (ポスター発表)	J. Tsuchiya and K. Umemoto	AGU Fall meeting 2019 (Washington DC/USA)	H30.12	国外
Discovering materials with machine learning based on evolutionary algorithm (ポスター発表)	石河孝洋、三宅隆	TIA “Kakehashi”, Survey on innovative analysis methods of materials by data assimilation of simulations and experimental measurements (The University of Tokyo Kashiwanoha Campus Station Satellite/Chiba)	H30.12	国外
Search for superconducting hydrides	石河孝洋	The 2nd International Conference on ROOM TEMPERATURE	H30.12	国外

from first principles (招待講演)		SUPERCONDUCTORS (NIMS/Ibaraki)		
Phase transitions in mantle silicates and the internal structure of terrestrial exoplanets (招待講演)	K. Umemoto	APS March Meeting 2019 (Boston/USA)	H31.3	国外

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
A Stable, Narrow-Gap Oxyfluoride Photocatalyst for Visible- Light Hydrogen Evolution and Carbon Dioxide Reduction	Ryo Kuriki, Tom Ichibha, Kenta Hongo, Daling Lu, Ryo Maezono, Hiroshi Kageyama, Osamu Ishitani, Kengo Oka, and Kazuhiko Maeda	J. Am. Chem. Soc., 140 (21), 6648-6655 (2018).	H30.4	国外
Ab initio study of water speciation in forsterite: Importance of the entropic effect	T. Qin, R. M. Wentzcovitch, K. Umemoto, M. Hirschmann, and D. Kohlstedt	Am. Mineral., 103(5), 692-699 (2018).	H30.5	国外
Compositional redistribution in CaO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> glass induced by the migration of a steel microsphere due to	Tetsuo Kishi, Tetsuto Kokan, Yukihiro Yoshida,	Optic Express, 26(10), 13020-13026 (2018).	H30.5	国外

continuous-wave-laser irradiation	Tatsuki Iwamoto, Hirofumi Hidai, Fumiya Noritake, Nobuhiro Matsushita, and Tetsuji Yano			
Thermal Conductivity of Solids from First-Principles Molecular Dynamics Calculations	J. S. Tse, N. J. English, K. Yin, T. Iitaka	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 122(20), 10682-10690 (2018).	H30.5	国外
Undoped Layered Perovskite Oxynitride Li <sub>2</sub> LaTa <sub>2</sub> O <sub>6</sub> N for Photocatalytic CO <sub>2</sub> Reduction with Visible Light	Oshima T, Ichibha T, Qin KS, Muraoka K, Vequizo JJM, Hibino K, Kuriki R, Yamashita S, Hongo K, Uchiyama T, Fujii K, Lu D, Maezono R, Yamakata A, Kato H, Kimoto K, Yashima M, Uchimoto Y, Kakihana M, Ishitani O, Kageyama H, *Maeda K	Angew. Chem. Int. Ed., 57(27), 8154-8158 (2018).	H30.5	国外

Thermal equation of state of MgSiO <sub>4</sub> H <sub>2</sub> phase H determined by in situ X-ray diffraction and a multianvil apparatus	Masayuki Nishi, Jun Tsuchiya, Takeshi Arimoto, Sho Kakizawa, Takehiro Kunimoto, Yoshinori Tange, Yuji Higo, Tetsuo Irifune	Physics and Chemistry of Minerals, 45(10), 995-1001 (2018).	H30.6	国外
Development of persistent phosphor of Eu <sup>2+</sup> doped Ba <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> by Er <sup>3+</sup> codoping based on vacuum referred binding energy diagram	Kazuki Asami, Junpei Ueda, Kotaro Yasuda, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Mikhail G. Brik, Setsuhisa Tanabea	Optical Materials, 84(-), 436-441 (2018).	H30.7	国外
Structures and Stability of Iron Halides at the Earth's Mantle and Core Pressures: Implications for the Missing Halogen Paradox	XiangPo Du, Ziwei Wang, Hongbo Wang, Toshiaki Iitaka, Yuanming Pan, Hui Wang, and John S. Tse	ACS EARTH AND SPACE CHEMISTRY, 2(7), 711-719 (2018).	H30.7	国外
Quantum Monte Carlo calculations of energy gaps from first principles	R. J. Hunt, M. Szyniszewski, G. I. Prayogo, R.	Phys. Rev. B, 98(7), 75122 (2018).	H30.8	国外

	Maezono, and N. D. Drummond			
On the evolution of water ocean in the plate-mantle system	Takashi Nakagawa, Hikari Iwamori, Atsushi Nakao, Ryunosuke Yanagi	Prog. Earth Planet. Sci., 5(1), 51 (2018).	H30.9	国内
Exotic high-pressure behavior of double nitride CuPN <sub>2</sub>	D. Xu, B. T. Li, T. Iitaka, Q. L. Cui, H. B. Wang, H. Wang	COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE, 152(-), 217-222 (2018).	H30.9	国外
Bandgap reduction of photocatalytic TiO <sub>2</sub> nanotube by Cu doping	S. Khajoei Gharaei, M. Abbasnejad, and Ryo Maezono	Scientific Report, 8(-), 14192 (2018).	H30.9	国外
Simulation of structural characteristics of Mullite melt at high pressure	Mai Thi Lan, Toshiaki IITAKA, Nguyen Van Hong	INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS B, 32(24), 1850271 (2018).	H30.9	国外
Enhanced thermionic emission performance of LaB <sub>6</sub> by Ce doping	S. Y. Ning, T. Iitaka, X. Y. Yang, Y. Wang, J. J. Zhao, Z Li, J. X. Zhang	Journal of Alloys and Compounds, 760(5), 1-5 (2018).	H30.9	国外

Diffusion and microstructure in sodium silicate liquids	Pham Khac Hung, Le The Vinh, Nguyen Thi Thu Ha, Nguyen Van Hong, Fumiya Noritake	European Physical Journal B, 91(12), 306 (2018).	H30.10	国外
Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead Titanium Oxyfluoride Photocatalysts Pb <sub>2</sub> Ti <sub>4</sub> O <sub>9</sub> F <sub>2</sub> and Pb <sub>2</sub> Ti <sub>2</sub> O <sub>5.4</sub> F <sub>1.2</sub>	Haruki Wakayama, Keishu Utimura, Tom Ichibha, Ryo Kuriki, Kenta Hongo, Ryo Maezono, *Kengo Oka, and *Kazuhiko Maeda	J. Phys. Chem. C, 122(46), 26506–26511 (2018).	H30.10	国外
First-Principles Study on Superconductivity of P- and Cl-Doped H <sub>3</sub> S	中西章尊、 石河孝洋、 清水克哉	J. Phys. Soc. Jpn., 87(12), 124711 (2018).	H30.11	国外
High pressure synthesis of A <sub>2</sub> NiO <sub>2</sub> Ag <sub>2</sub> Se <sub>2</sub> (A = Sr, Ba) with a high spin Ni <sup>2+</sup> in square planar coordination	Yuki Matsumoto, Takafumi Yamamoto, Kousuke Nakano, Hiroshi Takatsu, Taito Murakami, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Hiraku Ogino,	Angew. Chem. Int. Ed., 58(3), 756–759 (2018).	H30.12	国外

	Song Donjgoon, Craig M Brown, Cedric Tassel, Hiroshi Kageyama			
Mass-dependent dynamics of terrestrial exoplanets using ab initio mineral properties	A. P. van den Berg, D. A. Yuen, K. Umemoto, M. H. G. Jacobs, and R. M. Wentzcovitch	Icarus, 317(1), 412-426 (2019).	H31.1	国外
NaPN2: Deep-ultraviolet nonlinear optical material with unprecedented strong second-harmonic generation coefficient	Zhi Li, Abudukadi Tudi, Peng Ren, Yun Yang, Toshiaki Iitaka, Takami Tohyama, Zhihua Yang, Shilie Pan, and Haibin Su	Physical Review Materials, 3(2), 025201 (2019).	H31.2	国外

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 (基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)」(サブ課題D 量子力学の基礎と情報)

機関名 国立大学法人筑波大学 計算科学研究センター

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
Optimization of Reordering Procedures in HOTRG for Distributed Parallel Computing (口頭発表)	Haruka Yamada, Akira Imakura, Toshiyuki Imamura, Tetsuya Sakurai	PDSEC2018 (Vancouver/Canada)	H30.5	国外
Tensor network study of two dimensional lattice $\phi^4$ theory (口頭発表)	Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Sinji Takeda and Yusuke Yoshimura	The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (East Lansing/USA)	H30.7	国外
$Z_2$ gauge theory with tensor renormalization group (口頭発表)	Yusuke Yoshimura and Yoshinobu Kuramashi	The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018) (East Lansing/USA)	H30.7	国外

n次元モデル向けHOTRGの分散並列計算における配列の並び替えの最適化（口頭発表）	山田悠加、 今倉暁、 今村俊幸、 櫻井鉄也	2018年並列／分散／協調処理に関する『熊本』サマー・ワークショップ SWoPP2018（熊本市国際交流会館/熊本）	H30.7	国内
テンソルくりこみ群による2次元 $\phi^4$ 理論の臨界結合定数の計算（口頭発表）	坂井涼、 加堂大輔、 藏増嘉伸、 中村宜文、 武田真滋、 吉村友佑	日本物理学会 2018年秋季大会（素宇）（信州大学松本キャンパス/松本）	H30.9	国内
計算手順と配列の並び替え手順の最適化によるn次元HOTRGの計算時間の削減（ポスター発表）	山田悠加、 今倉暁、 今村俊幸、 櫻井鉄也	日本応用数理学会2018年度年会（名古屋大学/名古屋）	H30.9	国内
テンソルくりこみ群による3次元有限温度 $Z_2$ ゲージ理論の解析（口頭発表）	吉村友佑	萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dワークショップ（柏の葉オープンイノベーションラボ/千葉）	H30.10	国内
テンソルくりこみ群による2次元 $\phi^4$ 理論の臨界結合定数の計算（口頭発表）	坂井涼	萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dワークショップ（柏の葉オープンイノベーションラボ/千葉）	H30.10	国内
高次テンソル繰り込み群計算に対する保守性と拡張性を考慮した並列計算コードの開発（口頭発表）	山下巧	萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dワークショップ（柏の葉オープンイノベーションラボ/千葉）	H30.10	国内
Application of Tensor Network Scheme to Particle Physics（招待講演）	Yoshinobu Kuramashi	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for	H30.12	国外

		Computational Science/Kobe)		
Time-efficient tensor reordering procedures for HOTRG in distributed parallel environment (口頭発表)	Haruka Yamada, Akira Imakura, Toshiyuki Imamura, Tetsuya Sakurai	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (RIKEN Center for Computational Science/Kobe)	H30.12	国外
高次テンソル繰り込み群による並列計算を用いた分配関数の計算 (口頭発表)	山下巧、今倉暁、二村保徳、櫻井鉄也	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ (ステーションコンファレンス東京/東京)	H31.1	国内
テンソルくりこみ群による3次元有限温度 $Z_2$ ゲージ理論 (口頭発表)	吉村友佑、藏増嘉伸	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内
高次テンソル繰り込み群を用いた4次元Ising模型の比熱の解析 (口頭発表)	秋山進一郎、藏増嘉伸、吉村友佑、山下巧	日本物理学会 第74回年次大会(2019年) (九州大学伊都キャンパス/福岡)	H31.3	国内

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
Optimization of Reordering Procedures in HOTRG for Distributed Parallel Computing	Haruka Yamada, Akira Imakura, Toshiyuki Imamura,	In proceeding of 2018 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW), 1(-), 957-966 (2018).	H30.8	国外

	Tetsuya Sakurai			
Cost-efficient cutoff method for tensor renormalization group with randomized singular value decomposition	Haruka Yamada, Akira Imakura, Tetsuya Sakurai	JSIAM Letters, 10(-), 61-64 (2018).	H30.10	国内

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦 (基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求)」(サブ課題D 量子力学の基礎と情報)

機関名 国立大学法人横浜国立大学 大学院工学研究院

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会等名)	発表した時期	国内・外の別
Holonomic quantum control of hybrid spin qubits in an NV center in diamond (招待講演)	H. Kosaka	Coherent Control of Complex Quantum Systems (C3QS) 2018 (沖縄科学技術大学院大学/沖縄)	H30.4	国外
GW without BSE 法による光吸収スペクトルの計算:GWΓ法の適用 (ポスター発表)	磯部智遥	ナノ学会第16回大会 (東京大学浅野キャンパス/東京)	H30.5	国内
マテリアルズ・インフォマティクスを材料設計開発ツールとするための高信頼性データベース構築 (口頭発表)	川添良幸	ナノ学会第16回大会 (東京大学浅野キャンパス/東京)	H30.5	国内
分子と水クラスター間の吸着エネルギーのクラスターサイズ依存性 (ポスター発表)	桑畑和明	ナノ学会第16回大会 (東京大学浅野キャンパス/東京)	H30.5	国内
Holonomic Quantum Gates and Quantum Teleportation into Solid (招待講演)	H. Kosaka	1st Advances in Quantum Engineering International Meeting (AQE2018) (Singapore/Singapore)	H30.6	国外
Holonomic Quantum Control of Geometric Spin Qubits in Diamond (招待講演)	H. Kosaka	The 19th International Symposium on the Physics of	H30.7	国外

		Semiconductors and Applications (ISPSA2018) (Jeju/Korea)		
量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーのハミルトニアンラーニング (口頭発表)	倉見谷航洋	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム (東北大学金属材料研究所/仙台)	H30.7	国内
Holonomic quantum control of geometric spin qubits in an NV center in diamond (招待講演)	H. Kosaka	34th International Conference on Physics of Semiconductors (ICPC2018) (Montpellier/France)	H30.7	国外
Geometric spin qubits in an NV center in diamond for quantum repeaters (招待講演)	H. Kosaka	Qttech2018 (China-Japan international workshop on quantum technologies) (Hefei/China)	H30.8	国外
TOMBO Tutorial: Lecture II (招待講演)	Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM) (Hanoi/Vietnam)	H30.9	国外
First-principles calculations of hyperfine structures of some atoms and radicals (ポスター発表)	Hiroyuki Terada	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM) (Hanoi/Vietnam)	H30.9	国外
Excited state force calculation in TOMBO code (ポスター発表)	Yoshihito Maeda	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting	H30.9	国外

		(ACCMS-TM) (Hanoi/Vietnam)		
LDA/ oneshot-GW + spin-orbit coupling calculation for Si2p level (ポスター発表)	Takeru Nakashima	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM) (Hanoi/Vietnam)	H30.9	国外
光と固体中の電子スピンの織り成す新奇量子現象 (招待講演)	小坂英男	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30.9	国内
Development of First-principles Phase Field Model (招待講演)	Kaoru Ohno	The 12th Conference of Asian Consortium of Computational Materials Science - Theme Meeting (ACCMS-TM) (Hanoi/Vietnam)	H30.9	国外
準粒子方程式における自己エネルギーのエネルギー依存性の効果 (ポスター発表)	磯部智遥	日本物理学会 2018年秋季大会 (物性) (同志社大学京田辺キャンパス/京都)	H30.9	国内
ランダマイズドベンチマーキングを用いたホロノミック量子ゲートの忠実度測定 (口頭発表)	松田一泰	2018年 第79回応用物理学会秋季学術講演会 (名古屋国際会議場/名古屋)	H30.9	国内
量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーのハミルトニアンラーニング (口頭発表)	倉見谷航洋	萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題Dワークショップ (柏の葉オープンイノベーションラボ/千葉)	H30.10	国内
機械学習によるダイヤモンドNV中心ハミルトニアン推定 (ポスター発表)	田宮志郎	第14回ナノテク交流シンポジウム (横浜市立大学/横浜)	H31.3	国内

ダイヤモンドNV中心における幾何学的電子スピンと放出光子のもつれ生成（ポスター発表）	安井優貴	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
完全ベル測定のためのダイヤモンドNV中心における核スピンシングルショット測定（ポスター発表）	川崎愛大	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
ダイヤモンドNV中心における光子から炭素核スピンの選択的量子テレポーテーション転写（ポスター発表）	倉下滉平	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
ダイヤモンド集積量子ビットのための光シュタルクシフト量子ゲート（ポスター発表）	松下和生	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
準粒子方程式の線形化の効果（ポスター発表）	磯部智遥	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
全電子混合基底法による超微細構造の理論計算手法の開発（ポスター発表）	寺田裕之	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
全電子混合基底法を用いた原子間力及び分子振動計算（ポスター発表）	鰐部翔太	第14回ナノテク交流シンポジウム（横浜市立大学/横浜）	H31.3	国内
ダイヤモンドNV中心による量子情報デバイスの実現に向けたハミルトニアンラーニング（口頭発表）	田宮志郎	2019年 第66回応用物理学会春季学術講演会（東京工業大学/東京）	H31.3	国内
ランダムイズドベンチマーキングによるダイヤモンドNV中心のホロミック量子ゲート忠実度測定（口頭発表）	松田一泰	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内

ハミルトニアン機械学習によるダイヤモンドNV中心のホロノミック量子ゲートパラメータ全量推定（口頭発表）	古賀悠太	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内
完全ベル測定のためのダイヤモンドNV中心における核スピンシングルショット測定（口頭発表）	川崎愛大	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内
ダイヤモンドNV中心における光子から炭素核スピンへの選択的量子テレポーテーション転写（口頭発表）	倉下滉平	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内
ダイヤモンド集積量子ビットのための光シュタルクシフト量子ゲート（口頭発表）	松下和生	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内
ダイヤモンドNV中心における幾何学的電子スピンと放出光子のもつれ生成（口頭発表）	安井優貴	日本物理学会 第74回年次大会(2019年)（九州大学伊都キャンパス/福岡）	H31.3	国内

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
Two-step frequency conversion for connecting distant quantum memories by transmission through an optical fiber	Shuhei Tamura, Kohei Ikeda, Kotaro Okamura, Kazumichi Yoshii, Feng-Lei Hong, Tomoyuki	Japanese Journal of Applied Physics (JJAP), 57(6), 62801 (2018).	H30.4	国外

	Horikiri* and Hideo Kosaka			
Accurate quasiparticle calculation of X-ray photoelectron spectra of solids	Tsubasa Aoki and Kaoru Ohno	Journal of Physics: Condensed Matter, 30(21), 21LT01 (2018).	H30.5	国外
Universal holonomic single quantum gates over a geometric spin with phase-modulated polarized light	Naoki Ishida, Takaaki Nakamura, Touta Tanaka, Shota Mishima, Hiroki Kano, Ryota Kuroiwa, Yuhei Sekiguchi, and Hideo Kosaka*	Optics Letters, 43(10), 2380-2383 (2018).	H30.5	国外
GW( $\Gamma$ ) methods without the Bethe-Salpeter equation for photoabsorption energies of spin-polarized systems	Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	Physical Review A, 97(6), 060502(R) (2018).	H30.6	国外
Compact frequency-stabilized pump laser for wavelength conversion in long-distance quantum communication	Kohei Ikeda, Yusuke Hisai, Kazumichi Yoshii, Hideo Kosaka, Feng-Lei	Journal of the Optical Society of America B, 35(8), 2023-2028 (2018).	H30.7	国外

	Hong, and Tomoyuki Horikiri			
Universal holonomic quantum gates over geometric spin qubits with polarised microwaves	Kodai Nagata, Kouyou Kuramitani, Yuhei Sekiguchi and Hideo Kosaka*	Nature Communications, 9(-), 3227 (2018).	H30.8	国外

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通した極限の探求）」（サブ課題C 地球惑星深部物質の構造と物性）

機関名 国立研究開発法人物質・材料研究機構

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
Large-scale first-principles simulations for complex nano-structured materials using the CONQUEST code (招待講演)	T. Miyazaki	Workshop PCCP 2018 (Bordeaux/France)	H30.6	国外
オーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTによる大規模定温定圧分子動力学に関する連携研究（口頭発表）	宮崎剛	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム（東北大学金属材料研究所/仙台）	H30.7	国内
Eigenstate-Analysis using Sakurai-Sugiura Method with $O(N)$ -DFT Code CONQUEST（招待講演）	Ayako Nakata, Yasunori Futamura, Tetsuya Sakurai, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	MolSSI Workshop / ELSI Conference: Solving or Circumventing Eigenvalue Problems in Electronic Structure Theory (Richmond/USA)	H30.8	国外
Large-Scale DFT Study of Ge/Si 3D Nanoislands and	T. Miyazaki	AiMES 2018 Meeting (Cancun/Mexico)	H30.10	国外

Core-Shell Nanowires (招待講演)				
Large-scale DFT calculations on metallic systems using multi-site local orbitals in CONQUEST (ポスター発表)	Ayako Nakata, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods (Trieste/Italy)	H31.1	国外
Large-scale DFT study of complex surfaces and interfaces with the CONQUEST code (招待講演)	T. Miyazaki	The 43rd International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites (ICACC 2019) (Daytona Beach/USA)	H31.1	国外
Linear scaling first-principles molecular dynamics in CONQUEST (ポスター発表)	Zamaan Raza, Shereif Y Mujahed, David Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	Towards Reality in Nano Materials (TRNM) X (Levi/Finland)	H31.2	国外
Linear scaling first-principles molecular dynamics in CONQUEST (ポスター発表)	Zamaan Raza, Shereif Y Mujahed, David Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	MANA International Symposium (Tsukuba/Japan)	H31.3	国外
大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの開発とナノ構造物質への応用 (招待講演)	宮崎剛	触媒・電池元素戦略研究拠点 第14回公開シンポジウム (東京大学本郷キャンパス/東京)	H31.3	国内

2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所 （学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内 ・外 の別
Large-Scale DFT Study of Ge/Si 3D Nanoislands and Core-Shell Nanowires	T. Miyazaki	ECS TRANSACTIONS, 86(7), 269-279 (2018).	H30.10	国外
High-accuracy large-scale DFT calculations using localized orbitals in complex electronic systems: the case of graphene-metal interfaces	Carlos Romero-Muñiz, Ayako Nakata, Pablo Pou, David R Bowler, Tsuyoshi Miyazaki and Rubén Pérez	Journal of Physics: Condensed Matter, 30(50), 505901/1-11 (2018).	H30.11	国外

## 様式第 2 1

## 学 会 等 発 表 実 績

委託業務題目「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）」（サブ課題B 相転移と流動）

機関名 国立大学法人九州大学

## 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
CFD Simulation of Thermodynamic Effect Using a Homogeneous Cavitation Model Based on Method of Moments, Proc. 10th International Symposium on Cavitation（口頭発表）	Shin-ichi Tsuda, Satoshi Watanabe	The 10th International Symposium on Cavitation (Baltimore/USA)	H30.5	国外
キャビテーション初生のマルチスケール解析（口頭発表）	田中亮太郎、渡邊聡、津田伸一、國嶋雄一	第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム（東北大学金属材料研究所/仙台）	H30.7	国内
均質媒体モデルによるシートキャビテーションの初生の再現性に関する研究（口頭発表）	國嶋雄一、津田伸一、浅野優太、渡辺宙志、野口博司	日本機械学会九州支部北九州講演会（北九州市立大学/北九州）	H30.9	国内
マルチモーメント法に基づく気泡初生モデルを用いたキャビテーション流れの計算（口頭発表）	國嶋雄一、津田伸一、渡邊聡	第32回数値流体力学シンポジウム（機械振興会館/東京）	H30.12	国内

<p>キャビテーション初生のマルチスケール性を考慮したモデリングおよびCFD解析 (口頭発表)</p>	<p>國嶋雄一、 津田伸一</p>	<p>第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ（ステーションコンファレンス東京/東京）</p>	<p>H31.1</p>	<p>国内</p>
<p>液体ロケット推進剤のキャビテーション現象に対するマルチスケールアプローチ (招待講演)</p>	<p>津田伸一</p>	<p>日本航空宇宙学会関西支部第470回航空宇宙懇談会（大阪大学豊中キャンパス/大阪）</p>	<p>H31.2</p>	<p>国内</p>

「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦（基礎科学の  
挑戦-複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求）」

## 実施計画

平成31年2月18日  
国立大学法人 東北大学  
久保百司

## 更新履歴

版数	発行日	更新内容
初版	平成 28 年 11 月 30 日	新規作成
第 2 版	平成 29 年 1 月 20 日	1 (5) 年次計画 サブ課題 C の平成 30 年度実施内容の追加 1 (6) 実施体制 サブ課題 C の分担機関に物質・材料研究機構の追加
第 3 版	平成 30 年 1 月 9 日	1 (1) 目的・意義 課題全体として達成すべき成果の追加 1 (3) 目標・期待される成果 <定量的目標>の追加 1 (5) 年次計画 課題全体の最終目標 (平成 31 年度) に課題全体の論文数目標を追加 1 (6) 実施体制 サブ課題 B の分担機関に九州大学の追加、海洋研究開発機構を分担機関から協力機関に変更 1 (7) 必要計算資源 H28 年度、H29 年度資源量の修正 2-1~4 (1) 目的・意義 <新規性・萌芽性>の追加 2-1~4 (3) 目標・期待される成果 <サイエンス、エンジニアリング的な目標といつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのか>、<定量的目標>の追加 2-1~4 (4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと <ポスト「京」で初めてできる利活用>の追加 2-1 (2) 実施内容 項目の見直し 2-1 (5) 実施体制 項目の見直しに伴う変更 2-2 (2) 実施内容 [サブ課題間連携の実施内容]の追加 2-3 (5) 実施体制 体制の変更 2-4 (2) 実施内容 <厳密対角化パッケージ HΦ の重点課題 7 サブ課題 B との切り分け>の追加 2-4 (5) 実施体制 体制の変更
第 4 版	平成 30 年 3 月 26 日	1 (7) 必要計算資源 H30 年度資源量の修正
第 5 版	平成 31 年 2 月 18 日	1 (6) 実施体制 サブ課題 A の分担機関に大阪大学大学院理学研究科の追加、東京大学地震研究所を分担機関から協力機関に変更

# 目次

1. 実施概要 .....	1
(1) 目的・意義 .....	1
(2) 研究開発内容 .....	1
(3) 目標・期待される成果 .....	2
(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ .....	5
(5) 年次計画 .....	9
(6) 実施体制 .....	13
(7) 必要計算資源 .....	14
2. 研究開発内容詳細 .....	16
2-1. サブ課題A. 破壊とカタストロフィー .....	16
(1) 目的・意義 .....	16
(2) 実施内容 .....	16
(3) 目標・期待される成果 .....	19
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	22
(5) 実施体制 .....	23
2-2. サブ課題B. 相転移と流動 .....	26
(1) 目的・意義 .....	26
(2) 実施内容 .....	27
(3) 目標・期待される成果 .....	28
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	30
(5) 実施体制 .....	31
2-3. サブ課題C. 地球惑星深部物質の構造と物性 .....	34
(1) 目的・意義 .....	34
(2) 実施内容 .....	34
(3) 目標・期待される成果 .....	35
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	39
(5) 実施体制 .....	39
2-4. サブ課題D. 量子力学の基礎と情報 .....	42
(1) 目的・意義 .....	42
(2) 実施内容 .....	43
(3) 目標・期待される成果 .....	44
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	46
(5) 実施体制 .....	47
3. 採択時の留意事項への対応状況 .....	49

## 1. 実施概要

### (1) 目的・意義

強靱な国土や社会の構築、効率的なインフラ管理のための非破壊診断、大型構造物や実用材料の高耐久性、わが国の産業競争力強化、宇宙と地球深部あるいは大型実験施設の極限条件データなどの人類のフロンティアの開拓に向けた研究は、個別科学応用による追究において、「京」での成果を含め、計算科学においても大きな進展がある。しかし、昨今のわが国および人類が直面する、極端な自然現象への対処や、限界的な自然条件での制御、極限条件のフロンティアへの進出を飛躍的に進めるためには、個別科学の応用だけでは十分な解決を図れないこともまた、「京」を含む計算科学での追究から明らかとなってきた。複雑で階層的な自然現象が引き起す人類的な課題の解決のために、今までの個別分野の成果の上に立ちながらも、個別の研究では解決できない課題に挑戦する分野の垣根を越えた総合的な基礎科学の醸成が必要である。

そこで本課題では、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず、いまだ答えの出していない極限を探求する基礎科学の難問に対して、大規模数値計算を軸とした学際連携で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創により、基礎科学のフロンティアを開拓することを目的とする。これまでに、材料の破壊、地震、大気・海洋の変動、火山噴火、マグマ、観測困難な極限物性など、極限を探求する科学は「京」等を使った大規模計算により各分野で大きく進展してきたのに対し、本課題では、この個別理解を基に、未解決で残された異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題に対して、計算精度・計算可能性の限界突破に挑戦する汎用的手法を開発すると共に、学際連携を通して解決する。これら問題の解決により、基礎科学のフロンティアの開拓と人類的課題の解決を実現する。

特に本課題では、異分野の研究者が相互に連携・協力する学際連携を推し進めることで、課題全体として「インフォメーション・ディスティレーション」という新しい学問分野体系の確立を目指す。具体的には、様々な分野における多様なシステムの理解や解明のためには、莫大な情報から有用な部分のみを引き出すことが本質的であることが、近年ますます明確になってきている。その有用性は、ポスト「京」のみが成しうるような超大規模な計算科学シミュレーションにおいて、最も顕著に表れる。そこで本研究課題では、情報抽出に基づく計算手法を系統的に開発するとともに、異分野間の連携課題にも応用し、マルチスケール現象の理解へと展開する新しい学問分野体系「インフォメーション・ディスティレーション」の確立を目的とする。本課題では、上記手法の確立により、材料の破壊、地震、大気・海洋の変動、火山噴火、マグマ、観測困難な極限物性など多様な極限を探求する科学に対して、従来は解決することができなかった異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題を解決することで、複雑で階層的な自然現象が引き起す人類的な課題の解決を実現する。

### (2) 研究開発内容

ポスト「京」により、これまで不可能であった破壊とカタストロフィ、相転移と流動、地球惑星深部物質の構造と物性などに関する異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題に対して、計算精度・計算可能性の限界突破に挑戦する汎用的手法を開発するとともに、大規模シミュレーション・高精度シミュレーションを実施することにより、学際連携を通して、これら複合・マルチスケール問題の解決を実現する。主要な参加機関である東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピュータなども併用しつつ、以下のA～Dのサブ課題を設けて研究開発を推進する。

サブ課題A～Dでは、研究開発を行う基礎科学の課題と複合・マルチスケール問題を明確に設定し、目標を実現するための課題解決を可能とするシミュレーション手法の開発、および、研究開発を実施する。

#### サブ課題A： 破壊とカタストロフィ

材料の破壊は人工建造物の破壊をもたらし、断層の破壊は地震となり、人間の生命を脅かすカタストロフィとなる。本課題は、電子・原子レベルから数100kmオーダーに至る材料および断層破壊現象の階層性とそのメカニズムの解明を、原子レベルの材料破壊メカニズム研究と地震メカニズム研究の学際連携により進める。

#### サブ課題B： 相転移と流動

ナノバブル形成と微小成分添加効果、雲の形成過程、機械流動中での気泡・液滴生成過程、マグマの流動、高分子・コロイド流動、バイオ流動など自然界に幅広く観測される多相共存構造を持つ混相流を対象として、マルチスケールの流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)を開発し、超並列大規模分子動力学シミュレーションとの比較検討および上記の具体例への適用による方法論の検証を行うことで、未知の複雑流動に対してそのマクロな特性をミクロなモデルを用いて予測する手法の開発を目指す。

#### サブ課題C： 地球惑星深部物質の構造と物性

地球深部を構成する珪酸塩・液体鉄・固体鉄などの物質の極限環境下での振る舞いはまだ良く分かっていない。電子・原子のミクロな視点に基づく超大規模第一原理計算によりこれらの複雑な物質の性質を決定し、高圧実験や地球科学の専門家と連携することにより、地球の誕生から現在・未来までの歴史をマクロに理解するための基礎を築く。

#### サブ課題D： 量子力学の基礎と情報

量子力学の創始以来の夢であった量子力学的多体問題の一般的手法を開発し、従来計算不可能だった問題を解決するため、物質科学、素粒子論、応用数理、量子通信の諸分野の連携によって、テンソルネットワーク法、ウェーブレット法、行列ベクトル積型計算手法などに基づく新しい並列化アルゴリズム/コードを開発し、その諸分野における応用例を示す。

#### [サブ課題間連携の開発内容]

さらに、成功が保証されない挑戦的な課題として、サブ課題間で連携を行う課題の開発内容を下記に提示する。

- ・サブ課題AとBの連携により、サブ課題Bで開発する Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法をサブ課題Aで取り扱う破壊現象まで扱えるシミュレーション手法に発展させる。
- ・サブ課題BとDの連携により、ウェーブレット解析など階層間を連続的につなぐアイデアを並列計算に生かした新しい方法論を確立する。
- ・サブ課題CとDの連携により、サブ課題Dで開発される量子モデル Solver とサブ課題Cで開発される地球惑星深部で登場する物質科学的問題との接点を検討する。

### (3) 目標・期待される成果

本研究の目標は、破壊とカタストロフィ、相転移と流動、地球惑星深部物質の構造と物性などの基礎科学分野において、未解決で残された異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題に対して、計算精度・計算可能性の限界突破に挑戦する汎用的手法を開発すると共に、学際連携を通してこれら問題を解決することによって、基礎科学のフロンティアの開拓と人類的課題の解決を実現することである。期待される

主な成果を下記に示す。詳細は2. 研究開発内容詳細で説明する。

### <アウトプット成果>

#### (平成29年度終了時)

- ・材料破壊・断層破壊を解明可能なシミュレーションプログラムの開発。
- ・材料破壊・断層破壊のシミュレーションの実行とデータの蓄積による階層性の検討。
- ・マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)のマクロ流動パートおよび、そこにマイクロシミュレータを組み込むためのインターフェース部の設計とプロトタイプの実装を開始する。
- ・超並列分子動力学シミュレーションプログラムを開発し、ナノバブル生成に関してMSSPとの比較のためのマイクロシミュレーションのデータを蓄積する。
- ・極限環境下での定温定圧オーダーN第一原理分子動力学法を確立。
- ・極限環境統合シミュレータのプロトタイプが「京」で動作。
- ・広く適用可能な汎用的で強力な古典・量子格子問題の解決スキームを確立し、それに基づく基礎的プログラムを1件開発する。
- ・量子ビット系ダイナミクス計算のためのアプリケーションプログラムを、平成29年度終了時まで1件試作する。

#### (本格実施フェーズ終了時)

- ・材料破壊および断層破壊現象の階層性とそのメカニズムの解明。
- ・材料破壊と地震現象に共通する統計的法則の解明。
- ・MSSPの正式版の開発を行い、雲の形成、機械内部流動などの各種のマイクロシミュレータとの連携のテストを行う。
- ・超並列分子動力学シミュレーションプログラムの実行データをMSSPの結果と比較しMSSPの正当性の定量的検証を行い、かつ微小成分添加による気泡生成の影響の解明に取り掛かる。
- ・極限環境下での数万原子・50ピコ秒のオーダーN第一原理分子動力学法を確立。
- ・極限環境統合シミュレータにおいて複数モジュールにより複合計算ができる。
- ・古典・量子格子問題の解決スキームに基づく応用プログラムを本格実施終了時まで1件開発する。
- ・量子ビット系ダイナミクス計算のためのアプリケーションプログラムを完成させる。

#### (ポスト「京」運用開始5年後)

- ・電子レベルから破壊現象までの材料破壊に関するマルチスケールシミュレーション技術の確立。
- ・各階層でのエネルギー散逸を取り込んだ断層破壊マルチスケールシミュレーション技術の確立。
- ・MSSPの高速化と並行してMSSPと協調して実行する各種マイクロシミュレータ群の整備を行う。
- ・超並列分子動力学シミュレーションにより高分子存在下での気泡発生機構の解析を行うツールを完成する。
- ・極限環境下での数万原子・数100ピコ秒のオーダーN第一原理分子動力学法を確立。
- ・ポスト「京」とオーダーN法の連携によって、珪酸塩融体の多階層構造と物性の関係を統一的定量的に理解できるようになる。
- ・量子格子問題の大規模並列化ソルバの高度化。
- ・量子格子問題特有の線形計算ライブラリ群の高度化。

### <アウトカム成果>

### (ポスト「京」運用開始5年後)

- ・材料破壊の階層性の理解に基づく材料破壊を防ぐ方法の理論的提案。
- ・破壊の統計性の理解に基づくカタストロフィ事象のリスク評価手法提案。
- ・MSSP とマイクロシミュレータの協調によるマルチスケール流動の包括的な理解に向けた知見を獲得する。
- ・超並列分子動力学シミュレーションにより高分子存在下での気泡発生機構のマイクロな知見を獲得する。
- ・含水鉱物の相図が確立され、マントル対流シミュレーションとの連携により地球深部での水循環の様態が明らかにされる。
- ・初期地球から火山噴火まで鉱物とマグマが関わる現象を定量的に理解するための物質科学的基礎が確立される。
- ・量子格子問題の大規模並列化ソルバを利用した物性科学分野のグランドチャレンジ問題の解決に向けた知見獲得。
- ・量子格子問題の大規模並列化ソルバを利用した素粒子・原子核分野の未解決問題の解決に向けた知見獲得。

### (ポスト「京」運用開始10年後)

- ・マルチスケールシミュレーションと実験との連携による材料破壊防止法の実現。
- ・マルチスケールシミュレーションと地震観測・地殻変動観測との連携による巨大地震の切迫度評価。
- ・複雑な混相流動問題のマルチスケール手法を用いた包括的な解析手法の完成。
- ・地球大気物理学、機械工学等のマルチスケール問題への応用によるグランドチャレンジ問題の解決。
- ・極限環境統合シミュレータにより地球科学の問題を解明。
- ・珪酸塩融体の研究成果が高付加価値ガラスや鉄精錬時のスラグなど工業材料へ波及する。
- ・物性科学分野のグランドチャレンジ問題の解決。
- ・素粒子・原子核分野のグランドチャレンジ問題の解決。

### <定量的目標>

また、課題全体として達成すべき成果を明確にするために、その成果実現に向けた定量的な目標を下記のように設定した。

#### (平成30年度末の定量的目標)

- ・化学反応を考慮した大規模分子動力学シミュレータ「LASKYO」を、MPI 並列化によりクーロン力を含む系において1億原子のシミュレーションを可能とする。
- ・マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム「MSSP」と超並列分子動力学シミュレータ「MDACP」を開発する。MSSPでは2次元で5万個の流体粒子系のそれぞれにマイクロシミュレータ(200-1000個程度の分子を含む)を組み込んだ計算(総計1000万-5000万粒子)を可能とするプロトタイプを作成し、MDACPでは1億分子のシミュレーションを可能とする。
- ・オーダーN第一原理分子動力学シミュレータ「極限環境 CONQUEST」を用いて、サブ課題Cに1年間に配分された「京」の計算資源を用いて、地球深部における1万原子10psのSiO<sub>2</sub>メルトの定温定圧分子動力学を年に数回実際に実施することを可能とする。
- ・量子系虚数時間発展(ITE) + 角転送行列(CTM)法のプログラムを開発し、これを用いて実空間2次元、テンソル次元200の計算を実施する。また、量子スピン系(共振器系)の計算においてはスピン数40、フォトン数160の非平衡定常状態のシミュレーションを実行する。

### (最終目標となる H31 年度末の定量的目標)

- ・ 化学反応を考慮した大規模分子動力学シミュレータ「LASKYO」を、MPI 並列化によりクーロン力を含む系において 10 億原子のシミュレーションを可能とする。
- ・ 「MSSP」についてはマイクロシミュレータを埋め込んだ 3 次元 20 万個の流体粒子の系についてそのうちの 5 万個程度に 1 万個程度の粒子からなるマイクロシミュレータを埋め込んだ系のシミュレーション(総計で 5000 万粒子)を実行できるような正式版(リリース版)を作成する。一方 MDACP では 10 億分子のシミュレーションを可能とする。
- ・ オーダー N 第一原理分子動力学シミュレータ「極限環境 CONQUEST」を用いて、サブ課題 C に 1 年間に配分された「京」の計算資源を用いて、地球深部における 1 万原子 50ps の SiO<sub>2</sub> メルトの定温定圧分子動力学を年に数回実際に実施することを可能とする。
- ・ 量子系虚数時間発展 (ITE) + 角転送行列 (CTM) 法のプログラムによる計算では、実空間 2 次元、テンソル次元 300 の計算を実施する。また、量子スピン系の計算においてはスピン数 50、フォトン数カットオフ 250 の非平衡定常状態のシミュレーションを実行する。

### (4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

#### [周辺領域への波及効果]

本課題が対象とする材料の破壊、地震、大気・海洋の変動、火山噴火、マグマ、観測困難な極限物性などは、強靱な国土や社会の構築、効率的なインフラ管理のための非破壊診断、大型構造物や実用材料の高耐久性、わが国の産業競争力強化、宇宙と地球深部あるいは大型実験施設の極限条件データなどの人類のフロンティアの開拓に向けた課題として大きな期待を背負う国家基盤技術であり、「科学技術イノベーション総合戦略 2014」でもその重要性が明記されている。本課題では、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず、いまだ答えの出ていない極限を探求する基礎科学の難問に対して、大規模数値計算を軸とした学際連携とポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創により挑むことで、全く新しい視点に立った学術的な発見が期待され、その中から人類の自然観を一新するような知見や、新しい学問潮流の形成も期待される。また、その中のいくつかのテーマでは、将来的に産業応用や社会的課題の解決につながる可能性が高まると期待される。例えば、耐久性の高い構造物や材料、防災、量子コンピュータ等の開発への展開、極端自然現象の理解の一新などに繋がる。また、複数分野の研究者が参画する本課題の研究テーマは、計算科学を核として、日本が誇る各分野の最先端大規模実験施設や観測施設、分野固有の大型プロジェクト、あるいは他のポスト「京」重点課題や萌芽的課題とスムーズな連携を図ることにより、計算科学にとどまらないシナジー効果が期待される。

#### [課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ]

##### 1) 社会的・国家的見地からの意義【必要性の観点】

① 我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に貢献できること。

「科学技術イノベーション総合戦略 2014」において、自然災害に対する強靱な社会の構築や効果的かつ効率的なインフラ維持管理・更新の実現は次世代インフラ構築のために重点的に取り組むべき課題であることが指摘されている。これらの課題の解決には、既存の分野内での現在の延長線上での究明だけでは不十分であり、地震・地滑りの発生機構と診断法の解明、構造物の破壊プロセスの解明、台風・竜巻・火山噴火などの発生発達機構、診断法の革新などの根本的問題の解決には、異分野に共通項を求め、これ

を共有・発展させる基礎科学の総力を挙げた取り組みがなければ達成できない。また分野を超えた探究を必要とする課題には、極限条件や超短時間現象、さらには複雑な要素の絡み合う非線形現象の解析と理解、新たな概念の創出など、実験では実現できない自然探究が必須である。極限の研究は、最先端大型実験施設等の実験結果解析や現象の機構解明でも重要である。宇宙空間や地球深部を含む極端環境が人類の探究のフロンティアともなり、実験の困難な問題の解析は分野を超えた課題である。さらに、多階層の科学は各分野の個別の連携で対処できるものではなく、多分野の知見を糾合する新たな研究が必要である。本課題では、ポスト「京」の活用によりこれら問題の解決を可能とすることで、基礎科学のフロンティアの開拓と人類的課題の解決を実現する。

2) 世界を先導する成果の創出が期待できる。【有効性の観点】

①科学的なブレイクスルーや我が国の産業・経済への波及効果が期待されること。

地震等に際しての岩石の破壊や結果として生じる構造物の破壊、火山、台風などの複合的自然現象に対して、強靱な国土やインフラなどをめざす研究は、今日の日本において最も切迫した課題であり、強いインセンティブがある。しかしこれらの大変動を伴う自然現象やカストロフィについてはその基礎的なメカニズムも良く理解されていない。一方、ミクロな第一原理的な考察や複雑な複合過程を解明する材料科学、物性科学においてわが国は世界でもトップクラスのアクティビティと研究レベルを持ち、また破壊の基礎過程の解明などで「京」の利用も相まって、個々の分野においては要素過程の理解は大きく進んでいる。例えば構造材料の強度特性は、実験、実材料開発、製品化において、伝統的に我が国が強力なイニシアティブを発揮している。

さらに「京」の登場と HPCI 戦略機関の活動は、従来別々に活動してきた研究者や分野コミュニティが、計算科学的手法という共通項を軸に協力体制を築く契機となり、機関連携や分野の統合・再編成を一部にもたらした。その結果、本課題で掲げているカストロフィや極端現象についても、分野間を跨ぐ研究と、ポスト「京」の利用によって、破壊、極端現象のような従来の自然科学にとって困難であった課題に挑戦できる準備が整っている。ポスト「京」を起爆剤として、分野の枠や他の重点課題の枠に収まらない新たな学問分野を形成することにより、10年後、20年後を見据えた科学の成果創出を図ることができる。

②成果創出に向けて、計算科学者や理論科学者に加え、計算機科学者、応用数学者、社会学者、実験・観測科学者、産業界や自治体等の関係者等が連携・協調した開発体制を構築できる見通しがあること。

本課題の多くの参加者が、実験を主体とするプロジェクトである元素戦略、SIP、ImPACT、CREST などにも参画しており、実験研究者と連携して実験の解析やシミュレーションの検証を行ってきた実績があり、本課題においても、個別もしくはサブ課題単位で多数の実験研究者との共同研究を進めている。特に本課題では、SPring-8、J-PARC、SACLA、KEF-PF などの最先端大型実験施設の実験研究者とも一層の研究協力を進めていく。また、実験やシミュレーションで得られる大量のデータを利用するマテリアルインフォマティクスや機械学習に関しては、Mi2i プロジェクトとの連携を図る。本課題では、新日鐵住金、日本ゼオンなどの産業界や産業に近い応用分野の研究者が研究分担者や研究協力者として参加しており、これにより産業界との連携を図る。

また、例えばサブ課題Dでは、物性理論、素粒子理論の研究者を核にしながらも、筑波大学システム情報系の計算機科学者・応用数学者チームも参画し、成果創出にむけた学際連携の体制を整えている。一方、サブ課題Aで扱う強震動予測および地震発生の確率的評価の高度化は、災害軽減に結びついてはじめて国民の利益となるため、社会学者や自治体との連携・協調が不可欠であり、中央防災会議や予知判定

会など内閣に直結した組織を通じてシミュレーションで得られた知見を防災に活かす。

### 3) ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる。【戦略的活用の観点】

①ポスト「京」により初めて可能となる超大規模計算・データ解析であること。

「京」では、物質の不均一性や欠陥構造を単純化し、単一の析出物による変形過程のシミュレーションなどが可能となってきたが、現実が存在する多数の欠陥、物質の不均一性や幾何的大変形、地震地滑りを含む大規模変動などの扱いについては未知のままである。これに対しポスト「京」では、ミクロスケールの変形がマクロスケールの破壊に繋がる一連のプロセスを基礎理論から明らかにする。これにより、マルチスケールかつ非連続・非線形現象の時間発展メカニズムに関する知見を得ることは、物質設計、構造設計、地震をはじめとする自然災害の回避においても、これまでの常識を一新するポテンシャルを有する。

また「京」では、固体、液体、気体が共存する混相での乱流と相変化を伴う大変化は泡形成などでの要素的で単純化した系について解明され、現実現象に比較すると約二桁小さいレイノルズ数の混相乱流が計算可能になったが、現状では産業機器内の混相、台風、竜巻、火山噴火を含む大変動については階層を跨ぐ理解が必要であり未解明である。これに対してポスト「京」では、気液相流やエマルジョンの分子レベルの全粒子計算、添加剤など微視的不均一性によって引き起こされるメゾ・マクロ構造の形成過程の解析が可能になることで、ミクロ、メゾスケールの構造形成が生み出すマクロスケールの熱輸送、非線形レオロジーの発現機構が明らかになり、マクロスケールの流体計算の基盤を構築することができる。

「京」では、第一原理電子状態計算、分子動力学計算などを用いて、要素的、理想的な条件での新たな物質相の予言が成されているが、宇宙、地球深部、ナノ世界での未踏の極限環境での階層性と基本法則の解明には、現状の計算規模・精度では不十分である。これに対してポスト「京」では、高温、高圧、強電磁場、強レーザー場など極限環境での物質の振る舞いを解明し、それぞれの環境の普遍性と特異性を明らかにする。これにより極限環境での現象に内在する科学を明らかにし、環境を制御パラメータとする極限テクノロジーの基盤の構築が期待される。

「京」では、直接解法で30ビット程度のシステムについて、量子コンピュータをエミュレートすることができているが、100ビットあるいはそれ以上の現実的な規模の量子コンピュータのエミュレーションには、計算量・メモリ量ともに圧倒的に不足している。これに対してポスト「京」では、シュレディンガー方程式の直接解法や量子モンテカルロ法などにより種々の量子ビット開発実験と直接対照可能な計算や量子計算の可能性検証のための計算を実施するとともに、さらに量子情報の原理を応用した従来型計算機による量子系の計算手法を発展させ、量子多体問題の解法の新しい一般論を確立する。

②俯瞰的にみてポスト「京」の十分な活用が期待できること。

「京」を含む計算科学の活用により、わが国は本研究分野において世界を先導してきたが、個別科学の応用だけでは十分な解決を図ることが難しいことも明らかとなっており、個別の研究では解決できない課題に挑戦する分野の垣根を越えた基礎科学の挑戦が必要である。そこで本課題ではポスト「京」の圧倒的な計算機資源を活用することで、「京」で培ってきたシミュレーション技術のさらなる発展と学際連携を通して、異なる階層をつなぐ複合・マルチスケール問題に対して新たなアプローチを行うことで、計算精度・計算可能性の限界突破に挑戦する汎用的手法を開発し、基礎科学のフロンティアの課題と人類的課題の解決を目的としている。特に本課題では、固体および流体に生まれる大変動とカタストロフィを、基礎科学分野を超えて総合的に追求することにより、破壊、混相の大変動について根本理解を得て、

人類課題の解決に貢献する。また極限における人類のフロンティア課題に取り組み、極限環境を開拓する人類の共通の知識となる基礎理論を得ることで、人類的課題に対する挑戦を効率化する。さらに、基礎科学の連携により創出される新しい学問分野は、人類および我が国が特に直面する課題解決への有力な手段となり、ポスト「京」により初めて可能となる計算科学的な共通手法が生まれることも期待される。本課題では、技術革新を通じて社会的な直接的な効用を生み出しうる基礎科学課題とともに、これと方法論上の共通性を持ち、広く人類の科学的知見の深化に寄与する課題も重要なテーマとして取り上げる。たとえば、量子色力学計算（QCD）による物質の究極的な相図確定や本年度ノーベル物理学賞の対象となったトポロジカル量子状態の解明に直結する数値的手法の確立などがある。

③ポスト「京」の利用による投資効果が明確であること。

強靱な国土とインフラなど、わが国が直面する課題解決に向けて、地滑りから地震発生機構を含む構造物破壊、台風や竜巻の発生発達などの解明をめざし、破壊の支配因子の特定など基礎過程を解明し、個別科学では対処できないブレイクスルーと理解に到達できる。分野を超えて横断的な研究を推進する大変動のための基礎科学は、原子炉等の大規模構造物、発電用タービン、液晶、界面活性剤などの設計、危機管理、素材の強靱化、および産業競争力強化、効率的インフラ管理につながる。相界面におけるエントロピー生成や熱輸送の様相が解明されると同時に、メゾ構造形成に起因する非線形粘弾性特性が非現象論的に説明できるようになり、メゾからマクロスケールを記述する新たな基礎方程式が確立する。極限環境での現象に内在する科学により、極限条件を用いた環境パラメータ制御がもたらす新物性、新材料の探索が可能になる。また、レーザーアブレーションなど、超短パルス（フェムト秒～アト秒）レーザー励起による非平衡現象の解明、超短パルスレーザーを用いた非熱加工、異種物質接合の実現に向けた指針提供、ナノ構造デバイスの熱安定性、絶縁破壊機構の解明なども可能になる。さらに、高圧下超伝導など、極限環境での新しい物質の存在形態の予測が可能となるとともに、マルチスケールかつ非連続・非線形現象の時間発展メカニズムの理解が飛躍的に進む。また、量子力学・素粒子論・量子情報学・物質科学の革新と量子コンピュータ・量子シミュレータの設計指針獲得が可能となる。

(5) 年次計画

課題全体	中間目標 (平成29年度)	本課題で中核として利用するアプリを4本整備し、ポスト「京」をフルに動作させた場合に計算可能な見込みを得る。
	最終目標 (平成31年度)	本課題で中核として利用するアプリを8本整備して、ポスト「京」のフル活用計算が可能な状態に整備し、科学的・社会的成果の得られる準備を完了させる。 平成30～31年度に55報以上の論文を発表する(平成30年度-25報以上、平成31年度-30報以上)。

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ	
	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題A 破壊とカタストロフィ (東北大学金属材料研究所・久保百司)	<p>(目標)</p> <p>材料破壊・断層破壊に対応可能なシミュレータのアルゴリズム設計</p> <p>(実施内容)</p> <p>材料破壊、断層破壊研究に関する連携方法の調査、考察、問題設定</p>	<p>(目標)</p> <p>材料破壊・断層破壊に対応可能なシミュレータの開発</p> <p>(実施内容)</p> <p>連携調査研究を踏まえた材料破壊シミュレーション・断層破壊シミュレーションの実行</p>	<p>(目標)</p> <p>材料破壊・断層破壊に対応可能なシミュレータの並列化による1億原子規模の分子動力学計算とメッシュサイズ数キロメートルの断層破壊計算の実現</p> <p>(実施内容)</p> <p>並列化による大規模な材料破壊・断層破壊シミュレーションの実行による材料破壊および断層破壊現象の階層性とそのメカニズムの解明</p>	<p>(目標)</p> <p>ポスト「京」への移植準備のためのシミュレータの大規模並列化・高速化による10億原子規模の分子動力学計算とメッシュサイズ数100メートルの断層破壊計算の実現</p> <p>(実施内容)</p> <p>材料破壊・断層破壊シミュレーションの連携による材料破壊と地震現象に共通する統計的法則の解明</p>

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ	
	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題B  相転移と流動 (東北大学大学院 理学研究科・川勝年 洋)	<p>(目標) フィージビリティ調査</p> <p>(実施内容) ・超大規模分子動力学シミュレータの並列化 ・マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)とマイクロシミュレータの入出力インターフェースの設計 ・MSSPへの弾性およびウェーブレットの導入方法の考察</p>	<p>(目標) 超並列分子動力学シミュレーションの実施とMSSPおよびマイクロシミュレータのプロトタイプ作成</p> <p>(実施内容) ・超並列分子動力学シミュレーションによる気泡形成過程の解析 ・MSSPプログラムのプロトタイプの作成およびマイクロシミュレータとの連携方法の開発 ・雲の生成過程、機械内部流動のシミュレーション手法の考察</p>	<p>(目標) 超並列分子動力学シミュレーションによる気泡生成における添加成分効果の導入、MSSPフルバージョンの開発、MSSPプロトタイプを使用した雲形成、機械内部流動、その他の応用課題のテスト</p> <p>(実施内容) ・超大規模分子動力学シミュレータへの添加成分効果の導入 ・超並列分子動力学計算とMSSPプロトタイプの結果の比較による検証 ・MSSPフルバージョンの作成に着手 ・雲の形成過程および機械内部流動問題についてMSSPプロトタイプを用いた準備</p>	<p>(目標) 超並列分子動力学シミュレーションによる気泡生成における添加物効果の解析およびMSSPを用いた各応用問題の解析のための基礎的な方法論の検証、MSSPのポスト「京」への移植の準備</p> <p>(実施内容) ・超大規模分子動力学シミュレーションを用いた気泡生成における添加物効果の解析 ・MSSPを用いた以下の応用問題の解析に向けた方法論の検証 1) 大気中の微粒子の運動と雲の形成過程 2) 機械内部流動での気泡生成 3) マグマ中の気泡形成と成長 4) 不規則凝縮相の流動 5) 高分子発泡 6) バイオ流動 ・MSSPをポスト「京」に移植する準備の実施</p>

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ	
	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題C 地球惑星深部物質の 構造と物性 (理化学研究所・ 飯高敏晃)	<p>(目標) 極限環境統合シミュレータの設計</p> <p>(実施内容) ・温度体積一定オーダーN第一原理分子動力学プログラムを開発する。圧力計算機能を付加する。 ・多階層ネットワーク構造解析プログラムの設計を行う。 ・標準的第一原理分子動力学計算法による、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性およびその不純物効果を研究する。</p>	<p>(目標) 極限環境統合シミュレータのプロトタイプ作成</p> <p>(実施内容) ・圧力制御機能を付加し、温度圧力一定オーダーN第一原理分子動力学プログラムを開発する。 ・多階層ネットワーク構造解析プログラムの作成を行う。 ・温度体積一定オーダーN第一原理分子動力学計算法による、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性およびその不純物効果を研究する。</p>	<p>(目標) 極限環境統合シミュレータ「京」用本格版の作成</p> <p>(実施内容) ・拡張ラグランジアン断熱近似分子動力学手法を用い、局在軌道の最適化を同時に行うオーダーN第一原理分子動力学プログラムを開発する。 ・温度圧力一定オーダーN第一原理分子動力学法による、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性およびその不純物効果を研究する。 ・多階層ネットワーク構造解析プログラムの高度化を行う。</p>	<p>(目標) 極限環境統合シミュレータのポスト「京」移植への準備</p> <p>(実施内容) ・前年度までに開発したプログラムを最適化して「京」全体を使った計算を可能にする。 ・上記プログラムと「京」全体を使った計算により前年度までに実行したシミュレーションをさらに大規模化長時間化して初めて解ける問題に挑戦する。</p>

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ	
	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題D 量子力学の基礎 と情報 (東京大学物性研究 所・川島直輝)	<p>(目標) 基本アルゴリズム の設定</p> <p>(実施内容) ・物性科学および 素粒子物理学研究 のためのTN法、シ ュレディンガー方 程式の直接解法、 量子マスター方程 式、熱的純粋状態 法などに基づく新し い並列化アルゴリ ズム開発。および マルチスケールダ イナミクス計算の 枠組み構築 ・ランダム古典系 に対する階層を持 ったTNの構築方法 の検討 ・TN計算における 数理構造の解析と 低ランク近似法の 開発 ・窒素空孔(NV)中 心と核スピン集団 系のクラウドメモ リーを記述するハ ミルトニアンをモ デル化する。</p>	<p>(目標) アルゴリズムの 妥当性の検証</p> <p>(実施内容) ・物性科学および 素粒子物理学研究 のためのTN法、シ ュレディンガー方 程式の直接解法、 量子マスター方程 式、熱的純粋状態 法などに基づく新並 列化アルゴリズム によるアプリ開発 と実証研究。およ びマルチスケール ダイナミクス計算 のアルゴリズム検 証 ・ランダム古典系 に対する階層を持 ったTNの動的最適 化手法の検討 ・TN計算のための 高性能固有値計算 法の開発とアプリ での性能評価 ・NV中心系スピン ハミルトニアン の特徴を抽出し、核 スピン集団のクラ ウドメモリーとし ての利用法を探索</p>	<p>(目標) 計算プログラムの 施策と実証</p> <p>(実施内容) ・物性科学および素 粒子物理学研究のた めのTN法、シュレ ディンガー方程式の直 接解法、量子マスター 方程式、熱的純粋状態 法などに基づく新並列 化アルゴリズムによ るアプリ高度化と実 証研究、およびマル チスケールダイナミ クス計算プログラ ムの試作 ・ランダム古典系に 対する階層を持った TNの動的最適化手法 の実証研究 ・TN計算のための高 性能固有値計算法の 高度化ランダムマイ ズド手法による省メモ リー ・NV中心系ハミルト ニアンを基にスピン クラウドを量子制 御・情報抽出する方 法を開発</p>	<p>(目標) 計算プログラムの 応用と成果創出</p> <p>(実施内容) ・物性科学および素 粒子物理学研究のた めのTN法、シュレ ディンガー方程式の直 接解法、量子マスター 方程式、熱的純粋状態 法などに基づく新並列 化アルゴリズムによ るアプリ高度化 ・完成と実証研究、 およびマルチスケ ールダイナミクス計算 プログラムの開発と 他サブ課題への応用 ・古典系に対する階 層を持ったTNの並列 計算による高速化の 実証 ・TN計算のための高 性能固有値計算法の 汎用化とアプリでの 超大規模計算の実現 ・量子もつれネット ワークのクラウドメ モリーとしての利用 方法を明らかにす る。</p>

(6) 実施体制

本課題は、東北大学金属材料研究所を代表機関とし、その下で実施するA～Dの4つのサブ課題から成り立つ。サブ課題は、相互の連携や他の重点課題、萌芽的課題と連携して課題を推進する。各サブ課題には課題を実施するために必要なメンバーとして、計算科学者に加え、応用数学者、実験研究者、産業界の関係者が課題実施者、協力者として参画する。またそれぞれのサブ課題は、SPring-8やJ-PARC等の実験施設との連携、元素戦略プロジェクト、超々プロジェクト、ImPACT、SIP等との国家戦略プロジェクトと連携して実施する。さらに、計算環境支援としてスパコンを保有する東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所の協力を得る。図1に本課題の実施体制を示す。平成31年4月時点で、分担機関数は11機関で実施者は52名、協力機関数は56機関で協力者は116名で本課題を推進している。また、平成30年度からはサブ課題Bの協力機関である九州大学が分担機関となり、代わりに海洋機構が分担機関から協力機関となる。平成31年度からは、東京大学地震研究所の代わりに大阪大学大学院理学研究科がサブ課題Aの分担機関となる。

なお、平成30年1月時点で、本課題で雇用している研究員は、サブ課題ごとの実施体制の規模や開発するアプリケーションソフトウェアの汎用性等を考慮して、サブ課題Aは3名、サブ課題Bは3名、サブ課題Cは3名、サブ課題Dは4名の合計13名となっている。平成30年以降も研究員の人数と配置には変更は無い予定である。また採用の際に、アカデミック志向のキャリアパスを望む研究者だけでなく、産業界やソフトウェア利用支援機関などへのキャリアパスを志向する研究者も採用した。

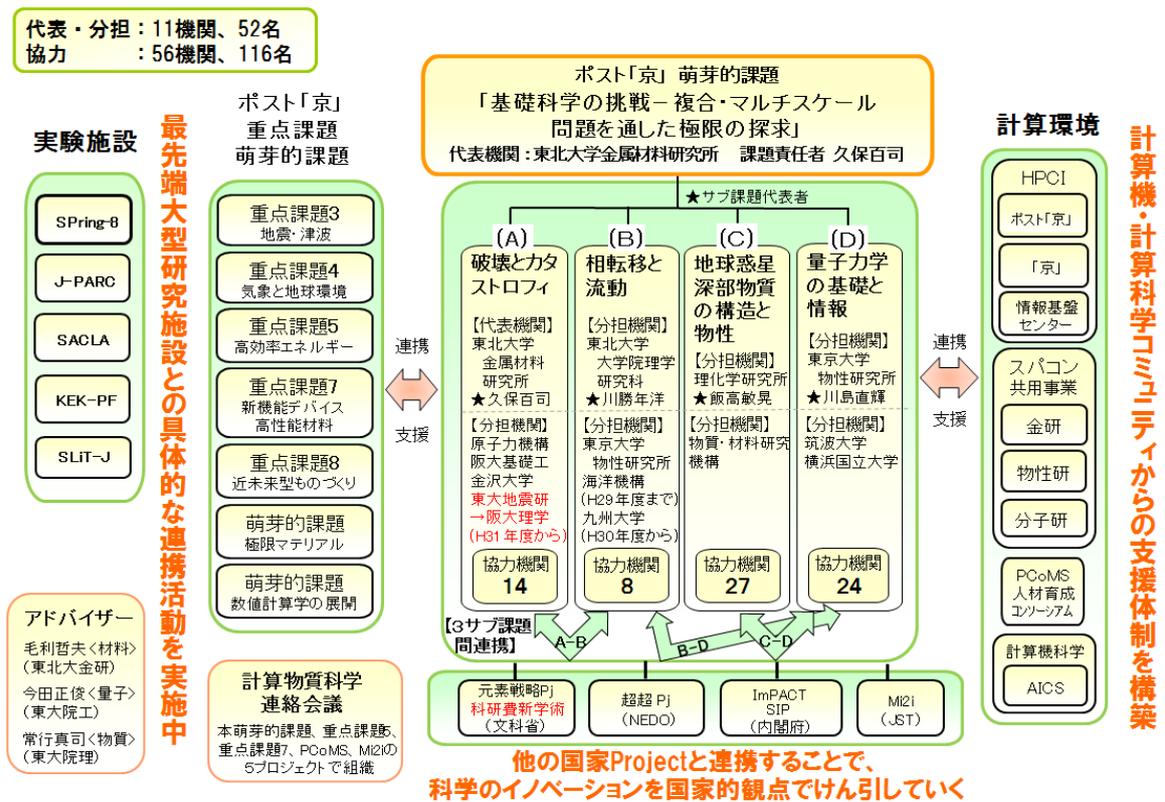


図1. 本課題の実施体制 (H31.4時点)

(7) 必要計算資源

「京」の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 A	2,380,797	2,520,000	2,520,000	12,000,000
サブ課題 B	1,399,758	2,200,000	2,200,000	10,000,000
サブ課題 C	1,857,758	2,360,000	2,360,000	15,000,000
サブ課題 D	3,003,190	2,520,000	2,520,000	12,000,000
合計	8,641,506	9,600,000	9,600,000	49,000,000

「京」以外の計算資源量

東北大学金属材料研究所計算材料学センタースーパーコンピューティングシステム

(HITACHI SR16000/M1)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 A	60,069	240,000	110,000	110,000
サブ課題 B	0	50,000	300,000	50,000
合計	60,069	290,000	410,000	160,000

東京大学地震研究所地震火山情報センターEIC 計算機システム

(SGI UV2000)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 A	7,000	20,000	20,000	20,000
合計	7,000	20,000	20,000	20,000

日本原子力研究開発機構スーパーコンピュータ (SGI ICE-X) (単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 A	18,000	40,000	40,000	40,000
合計	18,000	40,000	40,000	40,000

東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算システム

(Lx 406 Re2)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 B	0	0	50,000	50,000
合計	0	0	50,000	50,000

## 九州大学情報基盤研究開発センター研究用計算機システム

(PRIMEHPC FX10)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 B	0	0	50,000	50,000
合計	0	0	50,000	50,000

## 理化学研究所情報基盤センタースーパーコンピュータシステム

(GREATWAVE system)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 C	756,864	423,741	4,000,000	4,000,000
合計	756,864	423,741	4,000,000	4,000,000

## 東京工業大学学術国際情報センター大規模クラスタ型スーパーコンピュータ

(TSUBAME2 system)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 C	250,000	600,000	4,000,000	4,000,000
合計	250,000	600,000	4,000,000	4,000,000

## 東京大学物性研究所スーパーコンピュータシステム

(SGI 製 ICE XA / UV ハイブリッドシステム)

(単位：ノード時間/年)

サブ課題	H28 年度実績	H29 年度	H30 年度	H31 年度
サブ課題 A	0	80,000	40,000	40,000
サブ課題 B	100,000	850,000	1,014,000	850,000
サブ課題 D	500,000	1,750,000	4,000,000	4,000,000
合計	600,000	2,680,000	5,054,000	4,890,000

## 2. 研究開発内容詳細

### 2-1. サブ課題A. 破壊とカタストロフィ

#### (1) 目的・意義

破壊現象は、材料の場合は原子レベル (Ångström,  $10^{-10}\text{m}$ ) から人工構造物 (数 100m) の大きさまで、断層破壊 (地震) の場合は原子レベルから地殻の大きさ (数 100km) までに及ぶマルチスケールな現象である。材料や地殻のマクロな破壊現象が、それぞれどのような階層メカニズムをもって生起しているのかについて、現代科学はまだその答えを持ち合わせていない。本課題は、主に原子レベルの材料研究者と地震メカニズム研究者とのユニークな学際連携により、材料及び地震における破壊メカニズムの共通点を探り、それぞれの破壊現象の理解に供するとともに、その極限として、材料から地球規模までのマルチスケール破壊現象の計算モデルの提唱を行うものである。その成果は、よりよい材料の開発と地震現象の理解と防災に寄与する。

#### <新規性・萌芽性>

材料の変形に関しては、「京」の戦略分野やポスト「京」の重点課題でも第一原理からのアプローチが取り上げられてきたが、その先にある破壊に関する原子論・電子論は、はるかに遅れている。特に、材料破壊の初期過程で起こる原子スケールでの亀裂生成、化学反応などの現象が、マクロな力学不安定や破壊にいかに関係するのかが、さらにはそれに歪速度や温度などの外部因子がどのように影響を与えるのかに関する知見は極めて立ち遅れている。これらは原子スケールがマクロスケールに大きな影響を与えるマルチスケール現象であり、従来の材料変形論の守備範囲を超えるものである。一方、超巨大スケールの破壊である地震においても、摩擦に伴う応力変化、変形、脱水などのミクロな現象がマクロな地震動に影響を与えることも指摘されているが、地震学・地質学レベルで閉じている従来型研究では、これらの応力変化、変形などのミクロスケールと地震サイクルの各過程 (準備・先駆現象・破壊進展) の物理をつなげられていない。本サブ課題では、材料科学と地震学の学際連携を通して、原子レベルの材料破壊からマクロな断層破壊に渡るマルチスケールな破壊現象の統一的理解を可能とする「新しい破壊力学」の創生に挑戦する。

#### (2) 実施内容

上記目的を達成する為、材料破壊の初期過程である材料変形に対して、①「亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算」(東北大金研、原子力機構)、材料破壊の時間依存過程に対して、②「亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション」(阪大基礎工)、地震現象への応用として、③「断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション」(東大地震研(平成 31 年度からは阪大理学))、破壊現象の統計的法則に対して、④「材料と地震で共通する破壊の統計法則に関する研究」(金沢大理工) の 4 項目を設定する。

① 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算 (東北大金研、原子力機構)

東北大金研では、開発済みの Reax 力場に基づく古典分子動力学法シミュレーションコード LASKYO を拡充させることで、亀裂先端における化学反応を考慮しながら、亀裂生成、腐食、変形のシミュレーションを扱えるように発展させる。さらに、上記の LASKYO を「京」上で実行可能とし、MPI 並列化により、クーロン力を含む系において 10 億原子の大規模シミュレーションを可能とする。開発したシミュレータ

を活用することで、原子論的に亀裂先端の化学反応、亀裂生成、腐食、変形のシミュレーションを実施する。最終的には、材料の破壊現象に対して、化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形などがどのような影響を与えるのかのメカニズムを解明する。その一方で、東大地震研(平成31年度からは阪大理学)で実施する境界積分法を用いた断層破壊のシミュレーションとの連携を実施する。具体的には、上記 LASKYO を活用し、原子論的にアモルファスシリカの摩擦シミュレーションを行うことで、断層破壊の物理過程を解明する。これにより得られた知見を、東大地震研(平成31年度からは阪大理学)で開発する物理過程を考慮した断層破壊シミュレータに導入する。

ここで LASKYO とは、Reax 力場に基づくことで、古典分子動力学法の範疇でありながら化学反応を扱うことが可能なアプリケーションであり、現在、東北大学金属材料研究所にて開発中である。特に、Reax 力場以外の多様な力場を混在させて使用可能であるため、金属、セラミックス、ポリマーなどの複合材料を扱える特徴がある。さらに、長距離クーロン力を厳密に計算する高速多重極展開法の MPI 並列化による高速計算も実現できている。本アプリケーション手法を活用することで、世界的にもほとんど行われていない化学反応を考慮した亀裂生成、腐食、変形などのシミュレーションを行い、それらがいかに破壊現象に影響を与えるのかのメカニズムを解明することを目的とする。

原子力機構では、金属材料の破壊現象に対する原子・電子レベルからのミクロな解明を目指し、第一原理計算及び分子動力学法などの原子論的シミュレーション手法を用いて、破壊の原因となる不純物元素や水素が粒界や転位に及ぼす化学反応論的影響を明らかにする。粒界破壊に関しては、破壊の前駆現象である粒界偏析現象の理解を進めるとともに粒界結合力の指標である粒界凝集エネルギーに対する様々な元素の影響を明らかにし、エネルギー論的な理解を深めるとともに、亀裂進展中におけるそれらの元素の動力学を含めた化学反応論的影響を検討する。そのようなミクロな材料破壊現象の理解を踏まえつつ、マクロな材料破壊現象に至る階層的メカニズムの解明を目指し、材料破壊のエネルギーの大部分を担う亀裂先端における転位活動の挙動に対する様々な影響を明らかにする。その実施の過程においては、地震現象の階層的メカニズム解明との比較を行う。

## ② 亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション (阪大基礎工)

材料破壊の時間依存過程の解析で不可欠となる加速分子動力学法のコードを開発し、「京」上でこれを実行可能とする。またこれを用いて、金属材料の亀裂進展過程の重要素過程である亀裂先端からの転位生成過程の加速分子動力学計算を実施する。次に、金属結晶材料および金属アモルファス材料を対象として、大規模分子動力学計算および開発した大規模加速分子動力学計算を用いて、様々な温度、圧力下における金属材料の引張りおよびせん断破壊シミュレーションを実施する。これによって明らかとなった破壊の原因となっている原子レベルの素過程を時間・空間的に粗視化して、マイクロメカニクスに基づく kinetic Monte Carlo (kMC) を用いたメゾスケールシミュレータに組み込むことにより、分子動力学計算だけでは到達できない広範な空間スケール、時間スケールでの破壊解析をも可能とすることで、金属材料の破壊現象の多階層性を明らかにする。

ここで、加速分子動力学コードとは (アプリ名: アダプティブブースト加速分子動力学計算コード)、亀裂の進展にとまって生じる原子レベルの各種熱活性化イベントを加速的に生じさせることにより、長時間の亀裂進展過程の解析を可能とするアプリケーションであり、大阪大学基礎工学研究科で開発中である。熱活性化プロセスの加速は、プロセスの自由エネルギー曲面を自動的サンプリングにより取得し、それに応じたブーストポテンシャルをもとの自由エネルギー曲面に付与することにより行う。亀裂進

展過程のような応力、変形、熱活性化の三位一体のプロセスを効率的に加速させる世界初の手法であり、 $10^{10}$ 以上の加速率を実現している。本アプリケーション手法を活用することで、分子動力学計算では到達し得ない長時間の材料内部の破壊現象をとらえることが可能となるだけでなく、実験でも到達困難な長時間の破壊事象の予測をも可能とする。

### ③ 断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション（東大地震研(平成31年度からは阪大理学)）

境界積分方程式法に基づく断層破壊シミュレーションコードについて、開発中の高速計算ルーチンを実装する。これに成功すると、従来の手法では断層面上メッシュ数  $N$  に対して  $N$  の三乗の計算コストが必要であったところを  $N$  の二乗で済ませられることになる。いくつかの簡単なケースについてテストランを行いその妥当性を確認した後、簡単な摩擦構成法則に基づいた断層破壊ダイナミクスのシミュレーションを行う。本課題においては、断層形状の複雑性が断層破壊ダイナミクスに与える影響を中心に解明する。「京」の利用により、断層の非平面形状については10万要素数程度までの計算を目指す。これはM7クラスの断層に換算すると数100メートル程度のメッシュに対応し、断層の複雑構造をある程度まで再現する。その次には、より複雑な摩擦構成法則を境界積分方程式法に実装する。まず、滑り速度と状態変数に依存する摩擦法則を物質科学的に考察し、そのスケール依存性を解明することによって、シミュレーションへ実装する際のスケール変換特性について明らかにする。並行して、地震と材料変形・破壊に共通して出現する統計法則の整理と現象論の抽出を行い、背後にあるシンプルな物理メカニズムのモデル化を行う。

ここで、境界積分方程式法とは、線形弾性体のグリーン関数に基づいた計算手法で、断層面に働く摩擦構成法則を境界条件として与えることにより、断層面上の食い違い運動まで含めた弾性体中の変位場を計算する。グリーン関数は解析的に与えるためバルク部分のメッシュは必要なく、境界（断層面と自由表面）にのみメッシュが必要になる。断層運動によって放射される地震波まで定量的に記述するが、弾性力の長距離相互作用のせいで計算コストは極めて重く、断層面メッシュサイズ  $N$  について  $N^3$  でスケールされる。したがって何らかの高速化が常に求められるが、ここではグリーン関数に関する近似によって  $N^2$  のスケールリングを実現できる。他方、断層運動を決定する重要な物理法則である摩擦構成法則に関しては極めてシンプルなものしか実装されておらず、その点で不満が残る。本課題では材料科学分野で明らかになる新奇な摩擦法則を実装した境界積分方程式法のアプリケーション開発までを目指す。

### ④ 材料と地震で共通する破壊の統計法則に関する研究（金沢大理工）

大規模分子動力学シミュレーションを用いて、様々な構造や組織（単結晶、合金、非晶質）の固体材料の変形・破壊に内在する統計的性質の調査を行い、地震統計則との比較を通じて、材料と断層破壊の類似性および相違性を探究する。原子半径の異なる数種類の原子をある割合で混ぜ合わせることで、結晶構造から非晶質構造まで多様な原子構造を表現する。各固体材料において、外部負荷下で生じる塑性・破壊イベントに対する観測量の規模とその発生頻度の関係に着目する。

従来の材料科学の分野では、上記の観測量として応力降下量やひずみバースト量が用いられてきたが、これに加えて、地震の規模を表すマグニチュードと同等の観測量（すべり面積とすべり量の積）を対象とし、地震統計則の一つである Gutenberg-Richter (GR) 則が、ナノからサブマイクロスケールの固体塑性・破壊現象で成立するかを調査する。また、GR 則を表現するパラメータは、大規模地震の前後で変化することが知られているので、様々な構造・組織の固体塑性・破壊の統計的性質の外部環境（負荷、変形速度、温度）依存性を検討し、起動する変形・破壊モードと統計的性質の関係を解析することで、材料科学の視

点から断層破壊メカニズムの知見を与える。

#### [サブ課題間連携の実施内容]

サブ課題Aで開発する分子動力学法や境界積分法を用いてポスト「京」上で大規模計算や高精度計算を実現することで、本課題の目的である破壊現象のシミュレーションが可能となるが、その妥当性を異なるモデリング手法を用いて確かめることは非常に重要である。そこで、サブ課題Bと連携して、サブ課題Bで開発する SPH 法を、サブ課題Aで取り扱う破壊現象まで扱えるシミュレーション手法に発展させることで、分子動力学法と境界要素法に加えて新たに第3の破壊現象解析手法を獲得すると共に、それらを相互比較することによって得られた破壊現象や手法の妥当性の検証を行う。

#### (3) 目標・期待される成果

材料の変形に関しては、「京」やポスト「京」でも第一原理からのアプローチが取り上げられてきたが、その先にある破壊に関する原子論・電子論ははるかに遅れている。とくに、材料破壊の初期過程で起こる原子スケールでの亀裂生成、化学反応などの現象が、マクロな力学不安定や破壊にいかに関係するかの、さらにはそれに歪速度や温度などの外部因子がどのように影響を与えるのかに関する知見は極めて立ち遅れている。これらは原子スケールがマクロスケールに大きな影響を与えるマルチスケール現象であり、従来の材料変形論の守備範囲を超えるものである。一方、超巨大スケールの破壊である地震においても、摩擦に伴う応力変化、変形、脱水などのミクロな現象がマクロな地震動に影響を与えることも指摘されているが、地震学・地質学レベルで閉じている従来型研究では、これらの応力変化、変形などのミクロスケールと地震サイクルの各過程（準備・先駆現象・破壊進展）の物理をつなげられていない。

そこで、項目①として、材料破壊の初期過程である材料変形に対して、亀裂先端の化学反応が扱える大規模分子動力学シミュレータを開発し、化学反応、亀裂生成、腐食、変形のシミュレーションを行う。さらに、第一原理計算を用いて、破壊の原因となる不純物元素や水素が、粒界や転位に及ぼす化学反応論的影響を明らかにする。次に、項目②として、破壊の時間依存過程における、単一負荷荷重、繰り返し負荷荷重下で亀裂の発生と進展による材料破壊現象の根本メカニズムとそれを統一的に記述できる破壊の物理法則を解明する。そのために、分子動力学法の加速化手法の開発、さらにはマイクロメカニクス解析、有限要素法などのメソスケールシミュレーションを行う。項目③では断層破壊シミュレータの高速化を通じて、断層内部構造などの地質学的不均一性の影響をより広いスケールにわたって調べる。並行して、微視的物理過程と多階層ダイナミクスの理解に基づいて摩擦法則のスケール変換性を解明する。材料科学分野とも連携して、新奇な摩擦法則の探求とその断層破壊シミュレータへの実装まで行う。さらに、原子レベルの破壊現象とマクロな破壊現象（材料、地震）をつなぐマルチスケールの観点から、項目④において、材料の破壊（変形）現象における統計法則を導き出し、地震現象における統計法則との比較を通じてそれぞれの理解を深める。これら成果により「破壊力学の再構築」という基礎科学に貢献する。

ここで、重点課題7の中では、特に7Eグループが、火力発電プラント、橋などの大型構造物、輸送車両機器の高強度化・高信頼性を主眼に置き、鉄系材料を中心に具体的なターゲットを絞った実用材料に対して、第一原理計算を活用することで、異相界面・粒界・転位・欠陥・不純物の安定構造、転位挙動、変形過程を明らかにし、さらに Phase Field 法との連結により組織形成や組織変化を解明し、具体的な高信頼性材料を設計することを目的としている。これに対して、本萌芽的課題では、基礎科学の発展を主眼に置き重点課題7Eでは扱っていない転位や変形の先にある材料の破壊現象のメカニズム解明、さら

には破壊現象の統計法則を明らかにすることを目的としており、具体的な材料設計を目的としている重点課題7Eとは目的・意義ともに大きく異なっている。特に、本萌芽的課題では分子動力学法を中心に活用し、ポスト「京」では100億原子の大規模計算が可能なコード開発を行うことで、重点課題7Eでは対象としない材料の破壊現象のメカニズムと統計法則を解明可能な方法論の確立を行い、さらに材料科学と地震学の学際連携を通して、原子レベルの材料破壊からマクロな断層破壊に渡るマルチスケールな破壊現象の統一的理解を可能とする新しい破壊力学の創成に挑戦する。

一方、重点課題3の中では、防災・減災を主眼に置き、地震・津波が起こったときにどのような複合的災害が起こるのかを予測するためのシステムを構築することを目的としている。これに対して、本萌芽的課題では、基礎科学の発展を主眼に置き、断層破壊がどのように起こるのかのメカニズム解明と材料破壊との共通法則の解明を目的としていることから目的・意義ともに大きく異なっている。

#### <サイエンス、エンジニアリング的な目標といつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのか>

サブ課題Aでは、材料科学と地震学の学際連携を通して、原子レベルの材料破壊からマクロな断層破壊に渡るマルチスケールな破壊現象の統一的理解を可能とする「新しい破壊力学」の創成に挑戦することを目標とする。具体的には、材料破壊の初期過程で起こる原子スケールでの亀裂生成、化学反応などの現象が、マクロな力学不安定や破壊にいかに関係するのか、さらにはそれに歪速度や温度などの外部因子がどのように影響を与えるのかを解明する。これらは原子スケールがマクロスケールに大きな影響を与えるマルチスケール現象であり、従来の材料変形論の守備範囲を超えるものである。一方、超巨大スケールの破壊である地震においても、摩擦に伴う応力変化、変形、脱水などのミクロな現象がマクロな地震動に影響を与えることも指摘されているが、地震学・地質学レベルで閉じている従来型研究では、これらの応力変化、変形などのミクロスケールと地震サイクルの各過程（準備・先駆現象・破壊進展）の物理をつなげられておらず、本課題では上記の解明を目標とする。

上記目標に対して、サブ課題Aでは最終年度までに下記を実現する。東北大学で開発する化学反応を考慮可能な分子動力学シミュレータに関しては、アルゴリズムの改良と高速計算手法の導入により、10億原子の超大規模シミュレーションを可能とする。また、大阪大学では分子動力学法の加速化手法を開発することで、東北大学、金沢大学とも連携し亀裂の発展と進展による材料破壊現象の根本メカニズムとそれを統一的に記述できる破壊の物理法則を解明する。また、東京大学では東北大学と連携することで新奇な摩擦法則を導き出し、これを東京大学で開発している境界積分法に導入することで、摩擦法則を考慮した断層破壊シミュレータを開発する。さらに金沢大学では自身のシミュレーション結果とサブ課題A内の他機関のシミュレータで得られた計算結果との比較・検討を行うことで、材料の破壊現象における統計法則を導き出し、地震現象における統計法則との比較を通じて、破壊現象のマルチスケール性を解明する。エンジニアリングの観点からは、マルチスケールな破壊現象の統一的理解を通して、材料破壊を防ぐ方法の提案と防災への貢献を目標とする。

但し、本課題では「新しい破壊力学」構築への端緒を築くというブレイクスルーを実現するが、「新しい破壊力学」の完成には、ポスト「京」よりもさらに大規模計算と特に長時間計算の実現が必要であり、ポスト「京」に続くポストポスト「京」の開発と利用が将来的に必須である。

#### <アウトプット成果>

(平成29年度終了時)

- ・クーロン力を含む系において化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形を計算可能な分子動力学シミュレー

タの開発。

- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形の分子動力学シミュレーションの実施。
- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形が破壊現象に与える影響の検討を可能にする。
- ・ 材料破壊におけるミクロな原子・電子レベルのメカニズム理解を目指した、例えば元素の粒界偏析による破壊への影響の理解。
- ・ 金属アモルファス材料のモデル作成と亀裂進展過程の分子動力学計算の実施。
- ・ 滑り速度に依存する摩擦法則の空間スケール変換特性を物質科学的観点から明らかにし、断層破壊シミュレータに実装する。あわせてシミュレータの高速化も行う。
- ・ 結晶構造から非晶質構造まで多様な原子構造を連続的に表現する原子モデリングの開発を行い、材料の塑性・破壊現象に対して、地震と比較できる物理量・統計量の計算スキームの確立を行う。

#### (本格実施フェーズ終了時)

- ・ クーロン力を含む系において 10 億原子の大規模分子動力学シミュレータの開発。
- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形の大規模分子動力学シミュレーション技術の確立。
- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形が破壊現象に与える影響の解明。
- ・ 材料破壊におけるミクロな原子・電子レベルのメカニズム理解を目指した、亀裂進展挙動の理解。
- ・ 金属材料の破壊の大規模分子動力学法および大規模加速分子動力学計算法の確立。
- ・ 金属材料における破壊現象の階層性とそのメカニズムの解明。
- ・ 断層破壊シミュレータに新奇な摩擦法則と非平面断層を実装し、摩擦と非平面性というそれぞれの要因が破壊伝播過程に及ぼす影響を解明する。
- ・ 固体塑性・破壊に内在する統計的性質の内部組織・構造依存性および外部環境（温度、ひずみ速度、応力負荷レベル）依存性の解明を行い、地震統計性との関係性を明らかにする。
- ・ 材料破壊と地震現象に共通する統計的法則の解明。

#### (ポスト「京」運用開始5年後)

- ・ クーロン力を含む系において 100 億原子以上の大規模分子動力学シミュレータの開発。
- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形から大規模破壊現象までのマルチスケールシミュレーション技術の確立。
- ・ 材料破壊におけるミクロな原子・電子レベルのメカニズム理解、例えば元素の粒界偏析による粒界破壊や粒界水素脆性、擬劈開と呼ばれる水素脆性に特有の粒内破壊における微視的メカニズムの理解。
- ・ 原子レベルから破壊現象までの金属材料破壊に関するマルチスケールシミュレーション技術の確立。
- ・ 金属材料破壊と地震の断層破壊との多階層性に関する共通法則の解明。
- ・ 断層面外損傷過程を断層破壊シミュレータに実装し、摩擦・非平面性・面外損傷など多階層に及ぶ各要因が破壊伝播過程に及ぼす影響を解明する。
- ・ 各階層でのエネルギー散逸を取り込んだ断層破壊マルチスケールシミュレーション技術の確立。
- ・ 地震と材料破壊に共通する統計法則に基づいた断層破壊と材料破壊のアナロジーの解明を行い、固体塑性・破壊に内在する統計的性質の変形・破壊モード依存性の統一的理解を行う。

#### <アウトカム成果>

##### (ポスト「京」運用開始5年後)

- ・ 化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形から大規模破壊現象までの階層性の理解に基づく材料破壊を防ぐ

方法の理論的提案。

- ・材料破壊におけるミクロな原子・電子レベルのメカニズム理解、粒界破壊や粒界水素脆性、擬劈開と呼ばれる水素脆性に特有の粒内破壊における微視的メカニズムの理解に基づいた、材料破壊防止法に関する提案。

- ・金属材料破壊の階層性の理解に基づく材料寿命予測。

- ・断層破壊の開始・停止過程をシミュレーションで明らかにすることで、断層破壊の物理過程と地震の統計法則とのつながりを解明する。

- ・粒界等の高次元欠陥組織を考慮した現実的材料の変形・破壊現象の統計的性質の解明を行い、地震と材料破壊に共通する統計法則に基づいたスケールを超えた破壊現象の統一的理解を行う。

- ・破壊の統計性の理解に基づくカタストロフィ事象のリスク評価手法提案。

#### (ポスト「京」運用開始10年後)

- ・化学反応を含む亀裂生成、腐食、変形から大規模破壊現象までの階層性の理解に基づく材料破壊防止法の実現。

- ・金属における亀裂の生成、進展の原子・電子論的素過程に関するシミュレーションからの理解に基づいた、材料破壊を防止する方法の実現。

- ・金属材料破壊の階層性の理解に基づく材料疲労寿命制御手法の実現。

- ・マルチスケールシミュレーションと実験との連携による材料破壊防止法の実現。

- ・地震の統計法則に含まれるパラメータの時空変化から、断層で起こっている物理過程、特に地殻に働く絶対応力のような観測不可能量を推定するインバージョン手法へ道を開く。

- ・マルチスケールシミュレーションと地震観測・地殻変動観測との連携による巨大地震の切迫度評価。

- ・固体塑性・破壊に内在する統計的性質を設計パラメータに取り入れた次世代材料開発が実現化し、さらにこの統計的性質を用いた構造用材料のリスク管理により、更なる安心・安全社会の構築化が実現される。

#### <定量的目標>

また、課題全体として達成すべき成果を明確にするために、その成果実現に向けたサブ課題Aにおける定量的な目標を下記のように設定した。

#### (平成30年度末の定量的目標)

- ・サブ課題Aにおいて中心的なアプリとなる化学反応を考慮した大規模分子動力学シミュレータ「LASKYO」を、MPI並列化によりクーロン力を含む系において1億原子のシミュレーションを可能とする。

#### (最終目標となるH31年度末の定量的目標)

- ・サブ課題Aにおいて中心的なアプリとなる化学反応を考慮した大規模分子動力学シミュレータ「LASKYO」を、MPI並列化によりクーロン力を含む系において10億原子のシミュレーションを可能とする。

#### [サブ課題間連携の目標]

サブ課題Bと連携することで、サブ課題Bで開発するSPH法を、サブ課題Aで取り扱う破壊現象まで扱えるシミュレーション手法に発展させることで、破壊現象のシミュレーションを可能とし、破壊現象の統計法則をも解明可能な方法論を構築する。

#### (4)「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

・本課題終了時には、「京」では、開発したクーロン力を考慮した大規模分子動力学シミュレータによって、10億原子系を計算することが可能であり、サブ $\mu\text{m}$ スケールで化学反応を考慮した亀裂生成、腐食、破壊のシミュレーションが実現できる。一方、原子スケールのシミュレーションで得た知見をメゾスケールシミュレータにつなぐことでマルチスケールシミュレーション技術を確立するには、粒界や硬質相などの内部組織を考慮した $\mu\text{m}$ 以上の長さまでの亀裂生成、腐食、破壊のシミュレーションの実現が必須である。そのためには100億原子以上の大規模モデルが必要であり、100億原子以上のシミュレーションには、ポスト「京」の活用が必須である。

・理想的で小規模な系としての粒界や転位に対する様々な元素がもたらす基本的な影響は、現在の「京」レベルの計算機においても可能であるが、実用材料における大規模な粒界構造や転位構造、また、動力学的な影響は、ポスト「京」レベルの計算機が必要である。

・「京」では10億原子程度の分子動力学および加速分子動力学解析が可能であり、10~100nmの長さまでの亀裂進展挙動を解析できる。一方、破壊現象の多階層性を原子モデルで直接獲得し、メゾスケールシミュレータの有効性を確認するためには $\mu\text{m}$ もしくはそれ以上の長さまでの亀裂進展挙動の獲得が必要である。そのためには100億原子もしくはそれ以上の大規模モデルが必要であり、これにはポスト「京」上での解析が不可欠である。

・「地震はいつどのように停止するか」という問題は学術的にも防災的にも極めて重要である。この問題には断層面の短波長不均一構造が本質的と考えられており、そのモデル化が急務である。「京」では波長数100メートル程度の断層内部構造まで扱える見込みであるが、ポスト「京」では波長数10メートルまで解像度を上げることで、より短波長の内部構造がモデル化可能になり、ブレイクスルーが期待される。

・「京」では、単結晶から非晶質構造の固体材料の変形・破壊に内在する統計的性質の調査を行うことができるが、ポスト「京」ではさらに粒界という面欠陥組織を考慮した多結晶構造へ拡張することが可能となり、より現実的な構造を有する材料の変形・破壊現象の統計的性質が調査可能となることで、材料破壊から地震に渡るスケールを超えた破壊現象の統一的理解が実現できる。

#### <ポスト「京」で初めてできる利活用>

サブ課題Aにおいて中心的なアプリとなる「LASKYO」に関しては、本課題実施中に企業研究者に試用をして頂き、最終年度までには企業で実際に使ってもらえるシミュレーションコードにまで発展させる。また、断層破壊シミュレータに関しては一般公開を行う。

さらに、本課題による成果の画期的な利活用としては、人類の生命を脅かす(1)発電所、船舶、航空機、高層ビル、橋などの大型構造物のマルチスケールでの破壊現象の理解と、(2)マルチスケールでの地震のメカニズムの理解を国民に提供する。

#### (5) 実施体制

サブ課題Aの組織体制、連携関係等の運営体制は、図2に示されているとおりである。本サブ課題では、「研究項目①亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の大規模分子動力学シミュレーションと第一原理計算」については大規模分子動力学シミュレーションを東北大金研が、第一原理計算については原子力機構が担当し、材料破壊の初期過程である亀裂先端の化学反応・亀裂生成に対して、異なる計算科学手法を活用することで、連携しながら共通の目標課題に対してアプローチする。研究項目①で検討を行う破壊

の初期過程の後に起こる亀裂の進展による材料破壊現象のメカニズム解明については、「研究項目②亀裂成長過程の大規模原子シミュレーション」として阪大基礎工が担当する。研究項目①で得られた結果と、研究項目②で得られた結果を比較・検討することで、破壊現象の階層性に関する知見を蓄える。そのために、東北大金研、原子力機構、阪大基礎工は、常に綿密な議論と研究成果の比較・検討を行い、連携体制を調える。一方、地震をターゲットとして、東大地震研(平成31年度からは阪大理学)が「研究項目③断層破壊ダイナミクスの物理シミュレーション」を担当する。研究項目①を担当する東北大金研では、原子論的にアモルファスシリカの摩擦シミュレーションをも行うことで、断層破壊の物理過程を解明し、研究項目③を担当する東大地震研(平成31年度からは阪大理学)と綿密な連携を実施する。これにより、東北大金研は東大地震研(平成31年度からは阪大理学)で開発する物理過程を考慮した断層破壊シミュレータの開発にも貢献する。さらに、研究項目②を担当する阪大基礎工と研究項目③を担当する東大地震研(平成31年度からは阪大理学)も綿密に連携し、材料破壊と断層破壊に共通する破壊現象の階層性を解明する。これら研究項目①～③で得られた材料破壊・断層破壊に関する研究成果について、東北大金研、原子力機構、阪大基礎工、東大地震研(平成31年度からは阪大理学)と綿密に連携・連絡をとりながら、金沢大理工は、「研究項目④材料と地震で共通する破壊の統計法則に関する研究」を担当する。これらの連携研究を通して、原子レベルの材料研究者と地震メカニズム研究者とのユニークな学際連携により、材料及び地震における破壊メカニズムの共通点を探り、それぞれの破壊現象の理解に供するとともに、その極限として、材料から地球規模までのマルチスケール破壊現象の計算モデルの提唱を行う。

さらに、運営体制組織図に示すように数多くの協力機関にも参画して頂く。計算科学者に加えて、実験研究者(東北大工、新日鐵住金、九大工)にも協力機関として参画してもらうことで、実験結果との比較・検証を頻繁に行いながら、研究を進める。サブ課題Bとは具体的にSPH法に関するサブ課題連携を行うとともに、サブ課題C、Dとも研究成果に関する情報交換、連携を密にすることで、本萌芽的課題全体で提案する新しい学問分野体系「インフォメーション・ディスティレーション」を確立することも目指す。また、研究課題が密接に関連するポスト「京」重点課題3、5、7とも合同の研究会や情報交換を通して連携することで、サブ課題Aの研究の進展、加速化を図る。さらに、東北大金研で実施している計算物質科学人材育成コンソーシアムPCoMSや運営体制組織図に記載の他プロジェクトとも連携を進め、研究の深化を図る。また、強震動予測および地震発生の確率的評価の高度化は、災害軽減に結びついてはじめて国民の利益となるため、社会学者や自治体との連携・協調が不可欠であり、中央防災会議や予知判定会など内閣に直結した組織を通じてシミュレーションで得られた知見を防災に活かす。

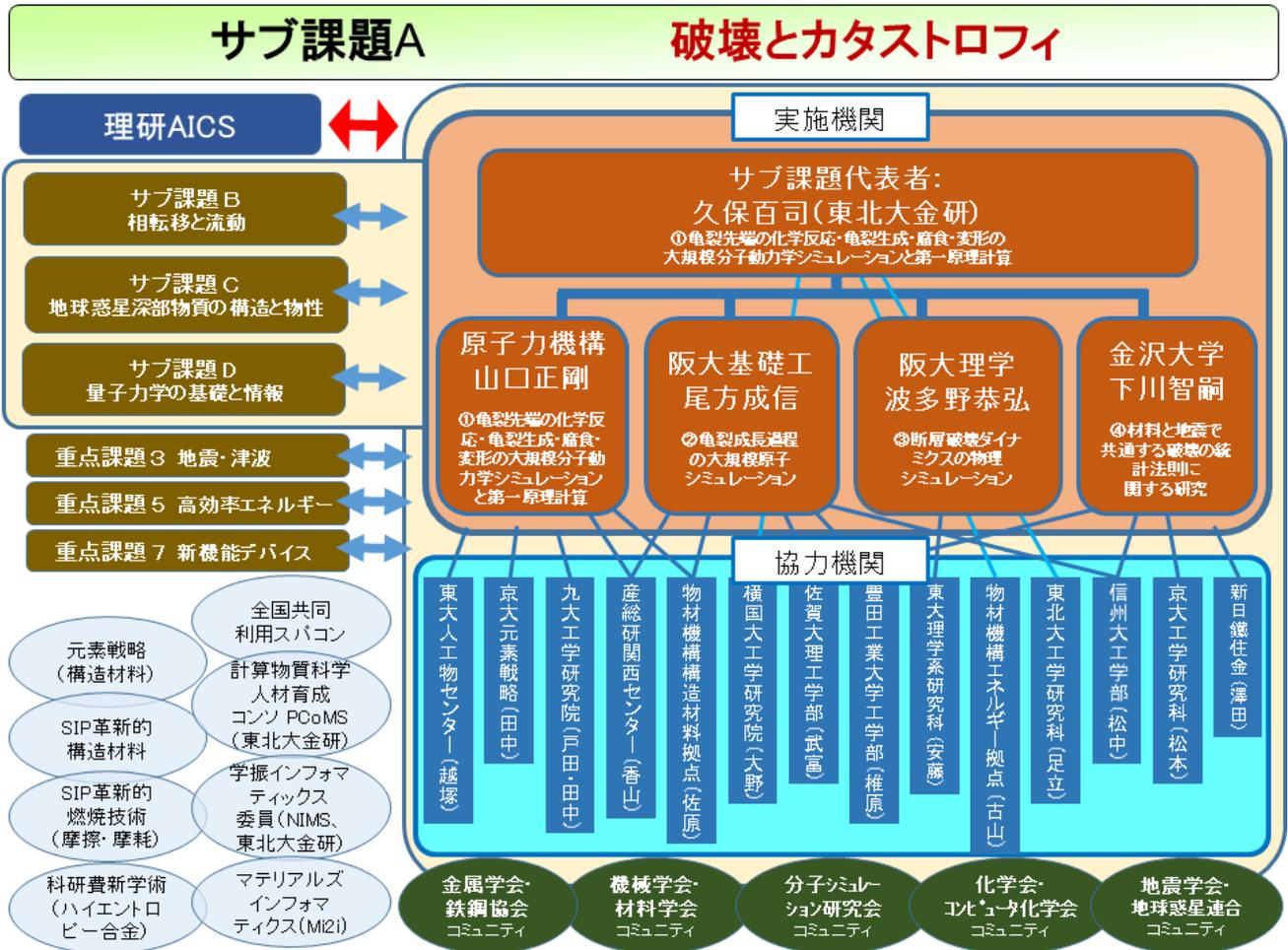


図 2. サブ課題Aの実施体制 (H31. 4 時点)

## 2-2. サブ課題B. 相転移と流動

### (1) 目的・意義

相転移を伴う流動現象は、幅広いスケールのドメインが共存する複雑な構造と流動特性を示す特異な現象である。具体例としては、ナノバブル(気泡)形成( $\text{nm}-\mu\text{m}$ )、機械内部流動における圧力低下に伴って生じる気泡(キャビテーション)( $\mu\text{m}-\text{cm}$ )、高分子溶液の減圧による発泡現象( $\mu\text{m}-\text{mm}$ )、微量の添加物により摩擦が著しく低減するトムズ効果( $\text{nm}-\text{cm}$ )、海洋表面での微小液滴形成と雲の形成過程( $\mu\text{m}-\text{m}$ )、マグマの上昇過程における気泡生成と負性抵抗( $\text{mm}-\text{m}$ )など、マイクロからマクロにわたる幅広いスケールでの現象があげられる。これら一見関連のない現象も、「相転移においてマイクロな状態とマクロな流動とが相互に関係しあっている」という観点からの普遍的な方法論の構築が可能である。本課題では、このような共通概念の下で、マクロな流動を決定する応力がマイクロな微細構造(構成分子の運動や気泡の分布等)と直接関係しあうような複雑流動をシミュレーションするプラットフォームとして、マイクロ状態とマクロ状態を同時に解き合うマルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(以下MSSPと略記)を開発する。さらに、超並列分子動力学シミュレーションを並行して開発・実施することで、本課題で開発するMSSPの正当性を確認した上で、上記の個別の例に適用する。さらに、本課題で開発するMSSPは、本萌芽的課題「基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」の他の3つのサブ課題「破壊とカタストロフィ」、「地球惑星深部物質の構造と物性」、「量子力学の基礎と情報」でも利用できるような汎用性を備えたものを目指す。

本サブ課題では、Smoothed Particle Hydrodynamics(SPH)を用いたマクロ流動のシミュレータとマイクロなシミュレータとの協調を実行できるプラットフォームとしてMSSPを開発し、それと並行して分子モデルを用いた超大規模分子動力学シミュレータを開発する。これらの2種のシミュレータを微小添加成分の存在下での流動現象や気泡形成過程に対して適用することでMSSPの有効性を確認するとともに、トムズ効果等の微小添加成分効果を明らかにする。さらに、雲の生成における液滴微粒子合体過程のマイクロモデル、および機械内部流動における固体壁面近傍での気泡分布のマイクロモデルをMSSPに組み込むことで、これらの現象のマルチスケールシミュレーションを実施する。また、マグマ中の気泡形成と成長、不規則凝縮相の流動、高分子発泡、バイオ流動等の複雑混相流に対して本手法を適用するためのツール群を開発する。

### <新規性・萌芽性>

本課題で新規に開発するプラットフォームであるMSSPを用いれば、大規模流動とマイクロ流動を同時に解くことで複雑な混相流動を第一原理的に解くことができる。このMSSPを用いれば、マクロな流動特性が未だに知られていないマイクロ動力学モデルに対しても、そのマクロ流動を簡便かつ高効率にシミュレートできる環境を提供できるということを意味している。このことは、非常に幅広い範囲にわたる複雑流動を包括する方法論が構築されるということの意味しており、その応用範囲は非常に広く、かつ社会的なインパクトも非常に大きいと期待される。

一方、MDACPを用いた超大規模分子動力学シミュレーションは、古典粒子系の分子動力学シミュレーションの分野では世界最大規模のシミュレーションを実施することが見込まれ、分子シミュレーションの分野でのインパクトは大変大きいものと思われる。

## (2) 実施内容

本サブ課題では、①マイクロシミュレータを埋め込むタイプの MSSP の構築、②超大規模超並列分子動力学シミュレーションによるナノバブル形成過程の解析と MSSP の検証、③雲の形成過程のマルチスケールシミュレーション、④機械内部流動における気泡形成のマルチスケールシミュレーション、⑤その他 MSSP と連結される各種マイクロシミュレータの開発と実際の問題への適用の 5 項目を実施する。

①MSSP の開発を H28-H31 の 4 年間を通じて東北大学理学研究科、金属材料研究所および京都大学工学研究科で実施する。ここでは、ミクロな流動の SPH 法によるシミュレータを開発するだけでなく、SPH 法の各流体粒子にマイクロシミュレータを容易に接続でき、かつ MSSP とマイクロシミュレータの間で流動による変形とそれにともない発生する応力その他の統計量をスムーズに受け渡すためのインターフェースの仕様を策定し、その実装を行う。このような SPH シミュレータとインターフェース部の合体したものが MSSP となる。

②超大規模超並列分子動力学シミュレーションの開発は H28~H31 の 4 年間東京大学物性研究所、工学研究科で実施される。短距離相互作用を持つ粒子からなる流体に高分子成分の添加や、気泡核生成を大規模な分子動力学法により再現することで、トムズ効果のような微小成分の添加効果を解析するとともに、MSSP で同様の系をシミュレートし、両者を比較することで MSSP を用いて実施されるマルチスケールシミュレーション法の正当性の検証を行う。

③雲の形成過程のシミュレーション手法は、プロジェクト前半の H28-H29 の 2 年間に海洋開発研究機構で重点的に開発される。このテーマでは、乱流中で微小核から液滴が生成し、それらが成長する過程をマルチスケールにシミュレーションを行う。この現象のマイクロモデルとしては、流体力学方程式で記述される乱流中で粒子描像、あるいは液滴サイズの確率分布関数を用いて記述される液滴径分布の時間発展を追跡する。さらに、このマイクロシミュレータを MSSP による大規模な流動のシミュレーションと組み合わせることで、雲の形成過程における丸ごとシミュレーションを可能にするような方法論の整備を行う。

④機械内部流動中での気泡の生成過程はプロジェクト後半の H30-H31 の 2 年間に九州大学工学研究院で実施される。固体壁面近傍でのずり流動により微小気泡核が成長する過程を流体力学方程式から導出された確率分布の発展方程式を解くことで再現する。このマクロな流動から求められた結果を②のマイクロ分子動力学シミュレーションの結果と比較することで理論の正当性を検証し、かつ MSSP と連携することでより大規模な流動のシミュレーションを行う。

⑤上記以外のマイクロシミュレーション技術の開発は、本課題の実施期間の 4 年間を通じて分担機関および協力機関で実施され、最終的には MSSP と連携する方向での検討を行う。具体的なテーマと担当機関は以下の通り。膜系、アモルファス系、電解質溶液系、コロイド分散系および金属材料系の流動と破壊(東北大学金属材料研究所、京都大学工学研究科)、高分子・コロイド、生体系の粘弾性流動(東北大学理学研究科、日本ゼオン株式会社、東京大学物性研究所、京都大学工学研究科)、ナノバブル生成過程と乱流(東京大学工学研究科)、マグマの流動と火山噴火におけるバブル形成過程(東京大学地震研究所)。

### [サブ課題間連携の実施内容]

・本サブ課題 B で開発する MSSP は、流体粒子を用いたラグランジュ描像に基づいたマクロな流動とミクロなシミュレーション(分子動力学シミュレーションなど)を結び付けたモデルに立脚しているが、SPH で記述されるマクロ流動のパートは弾塑性体や粘弾性体に拡張することが可能であり、サブ課題 A と共同で破壊現象をマルチスケール手法を用いて解析する方法論を提供する。

・ウェーブレット解析は、方法論自体が多階層の構造を有しているため、階層間を連続的につなぐ解析あるいはシミュレーションの手法として注目されている。サブ課題Bで開発するMSSPにおいて、粒子サイズ以下の微小な構造をモデルに有効的に取り入れる手法としてウェーブレット解析の手法があり、サブ課題Dの開発するテンソルネットワーク法との関連性がある。この特性を生かし、サブ課題Dと連携してウェーブレットに代表される多階層解析のアイデアを並列計算に生かした新しい流体計算の方法論を提案することを目指す。さらに、テンソルネットワークの方法を用いれば、マイクロシミュレータから求めたマイクロモデルの流動特性を予測するフィルターを構成することも可能となるため、これをMSSPと組み合わせることによって、マイクロモデルから第一原理的に求められた構成方程式(流動特性)を使ったマクロ流動のマルチスケール・シミュレーションの手法も開発する。

### (3) 目標・期待される成果

本課題で新規に開発するプラットフォームであるMSSPを用いて、流体のラグランジュ描像に立脚するSPH法を用いたマクロ流動シミュレーションにマイクロなシミュレータを組み入れることのできる環境が整備される。このMSSPを用いて大規模流動とマイクロ流動を同時に解くことで、複雑な混相流動を第一原理的に解くことができる方法論が提供される。一方、比較的単純な分子モデルを用いてナノバブルの形成過程を超大規模分子動力学シミュレーションによりマイクロスケールから正確に再現することで、気泡形成の機構を分子スケールから解明するとともに、その結果をMSSPの結果と比較することでMSSPの検証を行う。これらの2つの方法論を用いて、具体的な問題として気泡生成における高分子添加効果、雲の形成過程および機械内部流動における気泡核の成長過程のシミュレーションをマルチスケールで行う方法論の開発に向けた検討を行う。さらに、マグマの流動(弾塑性流動)、生体膜・細胞の集団(バイオ流動)、高分子溶液(高分子流動)、アモルファス(弾塑性流動)、ナノバブル(気液流動)などの種々のマイクロシミュレータを用意し、それらを組み合わせて多様で複雑な多相混相流に対する第一原理的なシミュレーション手法の概念を構築する。

#### <サイエンス、エンジニアリング的な目標といつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのか>

サブ課題Bでは、流体のラグランジュ描像に立脚するSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)法をベースにした流動シミュレーションにマイクロなシミュレータを組み入れることのできるソフトウェア・プラットフォーム(MSSP)を構築する。このMSSPに、各ユーザーが開発するマイクロシミュレータを繋ぐことで、複雑な混相流の大規模流動をマイクロなスケールから第一原理的に解くことができる方法論と具体的なツールが、本萌芽的課題の最終年度までに提供される。このようなMSSPの開発は、サイエンスの観点からは、異なるスケールの物理モデルを結合することで大規模複雑流動のマルチスケールの記述法を確立するという意味で方法論的な重要性を持つとともに、マクロなスケールでは互いに相関を持った物理現象も、マイクロなスケールでは相互に無相関な要素に分割することができ、超並列計算が可能であるという自然界の法則を具現化している。エンジニアリングの観点からは、MSSPを用いることで、ユーザーが開発した比較的シンプルなマイクロシミュレータを用いて容易に大規模超並列計算を実現することができるようになり、未知の物質を用いた複雑流動のプロセスシミュレーションが可能となることを意味する。

サブ課題Bが開発するもう一つのアプリケーションである超並列分子動力学シミュレータ(MDACP)では、従来の分子動力学シミュレーションでは到達できなかった超大規模系(～10-100億粒子)のシミュレーションを実施することを目指し、ナノバブル発生過程や流動における微量添加物効果などの問題を、粗

視化の手法を用いることなく直接計算できるようになる。これは、複雑流動のミクロからの理解を促進するだけでなく、MSSP との比較を行うことで、MSSP の検証にも供することができる。

このようにして開発された MSSP を用いて、最終年度までに気泡生成における高分子添加効果、雲の形成過程および機械内部流動における気泡核の成長過程のシミュレーションの 3 課題についてマルチスケール・シミュレーションを実行し、従来のミクロシミュレータ単独でのシミュレーションの約 100 倍～1000 倍(体積比)のスケールのマクロ系のシミュレーションを実現する。このような応用研究の最終目標(複雑流体の興味ある部分全体の丸ごとシミュレーション)に関しては、ポスト「京」の能力を使っても未だ十分な系の大きさを確保することはできず、さらなる大規模計算資源の開発が望まれる。

さらに、研究対象をマグマの流動(弾塑性流動)、生体膜・細胞の集団(バイオ流動)、高分子溶液(高分子流動)、アモルファス(弾塑性流動)、ナノバブル(気液流動)などの種々の現象に拡大し、それらのミクロシミュレータを用意することで、多様かつ複雑な多相混相流に対する第一原理的なシミュレーション手法の概念を構築し、最終年度をめどとして公表する。

### <アウトプット成果>

#### (平成 29 年度終了時)

・SPH 法を用いて MSSP のマクロ流動パートのプロトタイプを実装し、さらにこのマクロ流動パートとは並列して開発されるミクロシミュレータを MSSP のマクロ流動パートに接続するためのツール群である MSSP のインターフェース部の設計とプロトタイプの実装を開始する。

・超並列分子動力学シミュレーションプログラムの並列化を行い、微小添加成分あり/なしのそれぞれについてナノバブル生成過程のミクロシミュレーションのデータを蓄積することで、MSSP との比較の準備を行う。

#### (本格実施フェーズ終了時)

・MSSP の正式版の実装を行い、雲の形成過程のミクロシミュレータ、機械内部流動における気泡成長、およびその他のミクロシミュレータとの連携テストを行い、これらの現象でのマルチスケールシミュレーション手法の有効性を示す。

・超並列分子動力学シミュレーションプログラムの実行データを、同一の系(ナノバブル生成過程)に対して MSSP を用いたマルチスケールシミュレーションの結果と比較することで MSSP の正当性の定量的検証を行い、かつ両手法の協調により微小成分添加による流動及び気泡生成の影響の解明に取り掛かる。

#### (ポスト「京」運用開始 5 年後)

・ポスト「京」のアーキテクチャを考慮して MSSP のポスト「京」への移植・並列化を行い、それと並行してこの MSSP と協調して実行するための各種ミクロシミュレータ群の整備を行う。

・ポスト「京」を用いて超並列分子動力学シミュレーションを大規模に実行し、微小成分添加による流動及び気泡生成など相転移ダイナミクスへの影響の解析を行うとともに、大規模データの解析用のツール群を整備する。

### <アウトカム成果>

#### (ポスト「京」運用開始 5 年後)

・ポスト京を用いて MSSP およびミクロシミュレータを大規模に実行することで、従来の「京」レベルでは実行不可能であったサイズの現象(ナノバブル集団の成長合体の分子シミュレーション、雲の形成過程における不均一構造の時間発展、機械内部流動における機械の形状の効果等)のシミュレーションが可能

となる。これらの実例を通して、ミクロシミュレータと MSSP によるマクロ流動のシミュレーションの協調によるマルチスケール流動の理論的な取り扱いの包括的な理解に向けた知見を獲得する。

・超並列分子動力学シミュレーションにより希少成分（高分子や界面活性剤など）がマクロ流動現象にどのような経路で多大な影響を与えることになるかの機構を解明する。これにより、より効率のよい消泡剤などの開発などにつながることを期待される。

#### （ポスト「京」運用開始10年後）

・複雑な混相流動問題は多岐にわたり、それらを単一の理論や方法論で議論することができないことは自明である。我々が開発する MSSP を用いたマルチスケールシミュレーション手法は、このような大規模かつ複雑な流動問題に対する解析手法を提供することになり、従来不可能であった問題の解決に向けた方法論における概念的なグランドチャレンジとなる。そのような問題の具体例として、本課題では地球大気現象（雲の生成、マグマ流動）、機械工学（機械内部流動での気泡成長）、材料工学（コロイド・高分子流動）、生体系（バイオ流動）等を取り上げ、これらの系にマルチスケールシミュレーション手法を適用することで、実際の応用における方法論の展開という応用面でのグランドチャレンジを行う。

#### <定量的目標>

また、課題全体として達成すべき成果を明確にするために、その成果実現に向けたサブ課題 B における定量的な目標を下記のように設定した。

#### （平成 30 年度末の定量的目標）

・サブ課題 B において中心的なアプリとなるマルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム「MSSP」と超並列分子動力学シミュレータ「MDACP」を開発する。MSSP では 2 次元で 5 万個の流体粒子系のそれぞれにミクロシミュレータ（200-1000 個程度の分子を含む）を組み込んだ計算（総計 1000 万-5000 万粒子）を可能とするプロトタイプを作成し、MDACP では 1 億分子のシミュレーションを可能とする。

#### （最終目標となる H31 年度末の定量的目標）

・「MSSP」についてはミクロシミュレータを埋め込んだ 3 次元 20 万個の流体粒子の系についてそのうちの 5 万個程度に 1 万個程度の粒子からなるミクロシミュレータを埋め込んだ系のシミュレーション（総計で 5000 万粒子）を実行できるような正式版（リリース版）を作成する。一方 MDACP では 10 億分子のシミュレーションを可能とする。

#### [サブ課題間連携の目標]

・サブ課題 A で実施される破壊現象のシミュレーションでは変形・流動とともに弾塑性効果が重要となるため、サブ課題 B で開発する MSSP のマクロ流動パートである SPH 法に（粘）弾性効果を導入する。これにより、ミクロな領域での破壊現象とマクロな変形・流動を同時に取り扱うことのできる方法論を開発する。

・不均一系や乱流を含む系では、大規模なスケールの構造からミクロレベルの構造まで、幅広い構造が階層的に共存する。そのような多階層共存状態をシミュレートするためには、単一のサイズの SPH 粒子を用いたシミュレーションでは不十分である。この問題の解決のために、サブ課題 B と D の連携によりウェーブレット解析の方法やテンソルネットワークの手法を用いて階層間を連続的につなぐアイデアを提案し、その結果として並列計算に生かすことのできる新しい方法論の構築を目指す。

#### (4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

2-2.(2)に記載した項目①のMSSPについては、そのプロトタイプとなるコード(名称MSS-PL)は、現状では「京」以外の並列計算機(物性研スパコン等)での使用実績がメインである。一方、本萌芽的課題の終了時にリリース予定のMSSPの正式版は、応用対象として大規模かつ複雑な多階層混相流動を想定しており、そのような流動を定量的に再現するためにはMSSPは10万-100万個のSPH粒子を含む必要があり、さらにそれぞれのSPH粒子の内部には10万-100万原子程度を含むマイクロ分子動力学シミュレータが埋め込まれることになる。このようなマルチスケールシミュレーションの全体は「京」の規模を超えてポスト「京」でなければ実行は不可能である。また、項目②の超並列分子動力学シミュレーション・コード(名称MDACP)は、すでに「京」を用いたフルノードのベンチマークで最大3000億粒子、1.77PFlops(ピーク性能比16.6%)程度の性能を達成しており、さらに10億粒子程度での気泡生成の解析に成功している。項目③の雲の形成過程のマイクロシミュレータは、粒子の成長過程を模擬する超並列Eulerian-Lagrangianシミュレーション・コード(名称LCS)として実装されており、「京」の約4分の1(27,000ノード)を使って、 $6,000^3$ 流体格子と54億粒子の計算を達成している(ピーク性能比7%)。これにより標準大気状態で言えば、数m~10mの立方体領域に対して、乱流作用を受ける個々の粒子の運動だけでなく、粒子同士の相互作用、また、相変化による成長、衝突合体成長までを精緻に計算できるようになった。一方で、数100mスケール以上の雲の全体を対象とした丸ごとシミュレーションを可能とするためには、開発されるMSSPとポスト「京」の両方が必要となる。項目④の機械内部流動および項目⑤のその他のマイクロシミュレータに関しては、現状では超並列計算の実績はないが、MSSPと組み合わせることでポスト「京」を用いて従来の1000倍以上の規模のシミュレーションをMSSPへの簡便な組み込み操作で実現できるようになると考えている。これは問題の解析の質的变化を起こすには十分な規模のシミュレーションである。

#### <ポスト「京」で初めてできる利活用>

サブ課題Bの開発するMSSPは、一般性のあるプラットフォームとして幅広いマイクロなシミュレータを組み込むことができるように設計し、本ポスト「京」プロジェクト終了後には一般への公開を目指す。このプラットフォームを用いることで、超並列計算に慣れていないユーザーであっても、自身で開発したマイクロシミュレータを簡便な方法で高効率の超並列計算に拡張することができるようになり、研究・開発の格段の効率向上が見込める。

超並列分子動力学コードMDACPについては、すでに一般に公開されているが、今後、その機能拡張を進めるとともに普及にも努める。

本課題による成果の画期的な利活用としては、(1)雲の形成過程を丸ごとシミュレーションできる手法の提供による気象予測の基本原理の解明、(2)機械内部の流動現象とバブル形成をマイクロなスケールからマクロスケールにわたって解析する方法を提供することによる機械の設計の改善、(3)火山におけるマグマの噴出過程の不安定性の解明による火山活動の予測などの分野での応用が考えられる。

#### (5) 実施体制

サブ課題Bの組織体制、連携関係等の運営体制は、図3に示されているとおりである。まず、サブ課題Bの全体の取りまとめと全体の研究連絡はサブ課題代表機関の東北大学理学研究科が担当する。次に、2-2.(2)に掲げた本サブ課題の各主要項目については、以下のような体制で研究を推進する。

①マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム(MSSP)の設計と開発は、本サブ課題の分担機関、協力機関および連携を行う他のサブ課題の研究者との議論にもとづき、本サブ課題協力機関の東北大学金属材料研究所および京都大学工学研究科の協力のもとで、サブ課題代表機関の東北大学理学研究科が実施する。MSSP とマイクロシミュレータを接続するインターフェース部の設計には、個々のマイクロシミュレータの特性を考慮しつつ、できるだけ一般性を持たせた設計が必要となり、各連携先との緊密な討議を行いながら作業を進める。

②短距離相互作用粒子系の超大規模超並列分子動力学シミュレーションによる気泡核生成過程と微小添加物効果の研究開発は、サブ課題分担機関の東京大学物性研究所および協力機関の東京大学工学研究科が担当する。気泡核生成を例とした超並列分子動力学シミュレーションと MSSP を用いたマルチスケールシミュレーションの結果の比較と MSSP の有効性の検証は東北大学理学研究科と東京大学物性研究所の共同で実施する。また、気泡生成の超並列分子動力学シミュレーションの結果は、MSSP との比較検討に利用するだけでなく、本サブ課題の他の分担機関の開発するマイクロシミュレータ(例えば後述の九州大学工学研究院の開発する機械内部流動における気泡生成過程のシミュレータ)との比較・相互補完にも用いられる。

③雲の形成過程のシミュレーション手法は、サブ課題分担機関である海洋開発研究機構が担当する。海洋開発研究機構が開発する乱流中での微小核からの液滴生成・成長過程のマイクロシミュレーションは、最終的には MSSP と組み合わせることで、雲の成長過程の大規模シミュレーションに発展させる。

④機械内部流動中での気泡の生成過程は、九州大学工学研究院で実施される。固体壁面近傍での流動と気泡成長現象を解くための直接数値計算や確率分布の発展方程式を用いた統計的なシミュレーションを行い、東京大学物性研究所が実施するよりマイクロな分子動力学シミュレーションとの比較検討を行う一方、統計情報を MSSP に受け渡すことでより大規模な系のシミュレーションが実行できるような方法論の確立を目指す。

⑤上記以外のマイクロシミュレーション技術の開発は、本サブ課題のすべての分担機関および協力機関で実施される。上記の①～④に掲げたテーマ以外の具体的なテーマとしては、膜系、アモルファス系、電解質溶液系、コロイド分散系および金属材料系の流動と破壊のシミュレーションは東北大学金属材料研究所と京都大学工学研究科が担当する。高分子・コロイド、生体系の粘弾性流動については、東北大学理学研究科、日本ゼオン株式会社、東京大学物性研究所、京都大学工学研究科の各機関が担当する。ナノバブル生成過程と乱流については、東京大学工学研究科が担当する。さらに、マグマの流動と火山噴火におけるバブル形成過程については、東京大学地震研究所が担当して研究を進める。これらのマイクロシミュレーション技術は、東北大学理学研究科が MSSP の仕様の設計と開発を行う際にフィードバックされ、最終的には MSSP との連携したシミュレーションが実施できるよう検討を行う。「京」コンピュータおよびポスト「京」コンピュータへの組み込みに関しては、理研 AICS と連絡を取り合って進める。

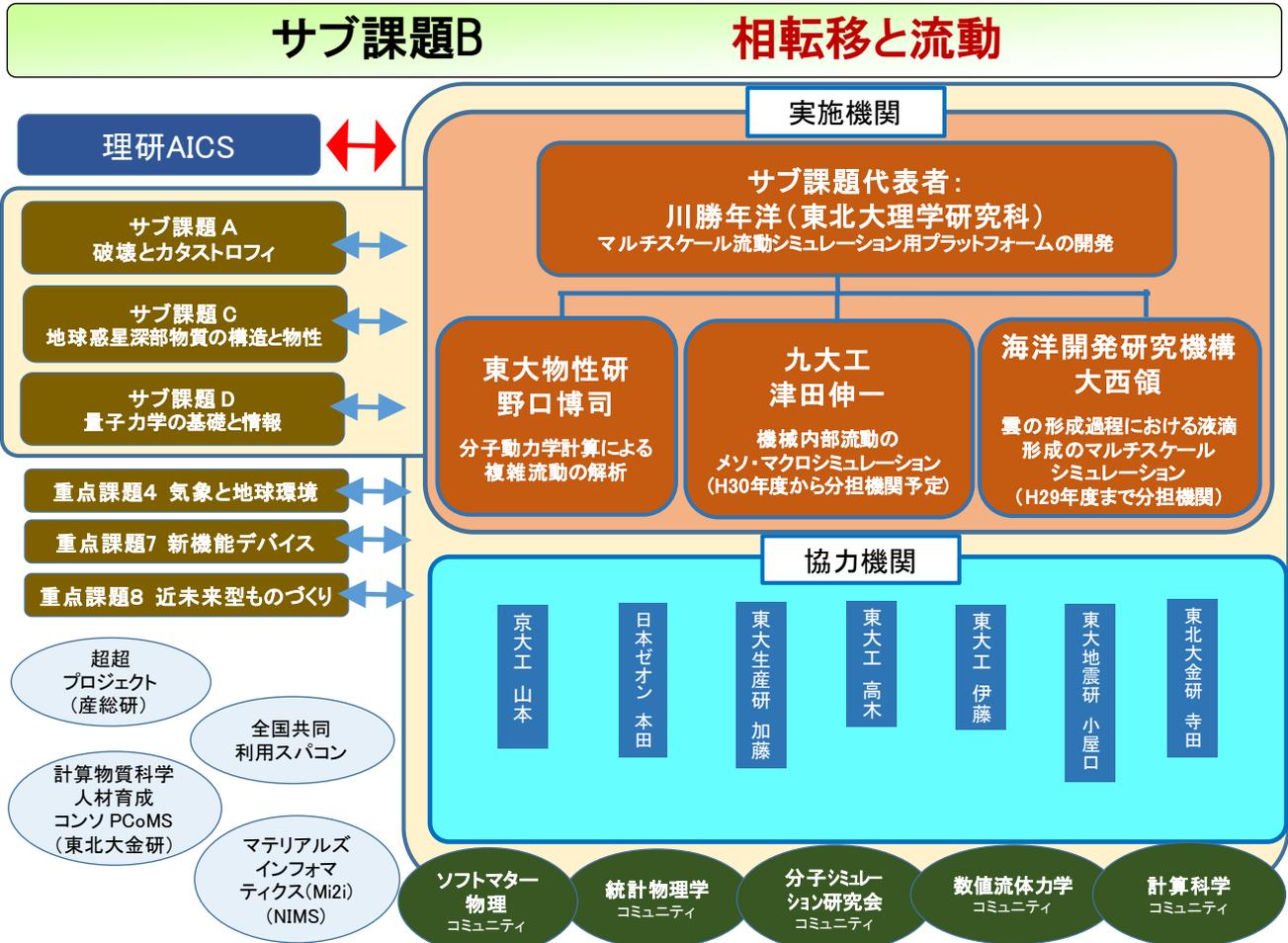


図3. サブ課題Bの実施体制 (H30.1時点)

## 2-3. サブ課題C. 地球惑星深部物質の構造と物性

### (1) 目的・意義

人が生きる地表は、低温真空の宇宙空間と高温高压の地球深部の狭間の薄皮であり、生命誕生の条件である地表に存在する適度な量の水は、膨大な地球深部鉱物に含まれる水（水素）との微妙なバランスの結果であるが、地球深部での水の存在形態を我々は未だ良く知らない。さらに高压では化学結合や周期律表などの概念すら全く変わってしまう未知の世界があり、リチウムが半導体になり、水素が金属になり超伝導にさえなる。本サブ課題では、ポスト「京」の性能をフルに活かす極限環境統合シミュレータを開発し、これらの地球惑星進化の理解に資する極限環境下での物質探索と物性研究を行う。

とくに、珪酸塩融体（マグマ）の知見は、地球科学上の現象のみならずガラスやスラグなど工業材料の理解にも究めて重要であるが、その特異な物性挙動は短距離構造だけでなく珪酸塩融体が持つ中長距離の多階層ネットワーク構造に由来すると考えられる。しかし、極限環境下の実験的測定、経験的分子動力学の適用には限界があり、密度汎関数法が扱える系は中長距離構造の再現には小さすぎる。ポスト「京」とオーダーN法密度汎関数法を用いた数万原子系分子動力学計算によりはじめて信頼性が高い解析を可能にする。

### <新規性・萌芽性>

地球深部を構成する珪酸塩・液体鉄・固体鉄などの物質の極限環境下でのミクロな振る舞いは実験的にも理論的にも未だ良く分かっていない。従来の地球科学では比較的緩やかな条件下での実験結果をもとに極限環境下の物性を推測することにより、地球流体力学シミュレーション等により地球の進化を論じてきたが、高压実験の発展により新たな物質過程が発見されるたびに地球進化のシナリオが大きく書き換えられてきた。この意味で、地球惑星深部物質科学は原子スケールがマクロスケールに大きな影響を与えるマルチスケール現象の典型と言えよう。サブ課題Cでは電子・原子のミクロな視点に基づく極限環境統合シミュレータを開発し活用することによりこれらの物質の未知の構造と物性を決定し、高压実験、地球流体力学や地球科学の専門家と連携することにより、地球の誕生から現在・未来までの巨視的進化を物理学の微視的基本法則に基づいて理解するための基礎を築く。

地球惑星深部物質の研究では密度汎関数法による標準的な第一原理計算が使われるが実験結果を説明するにはそれだけでは十分でない。サブ課題Cでは極限環境下の物性研究に適応させた標準的第一原理計算を越えた手法たちとそれらの複手法を開発する。たとえば、水素の核量子効果、重い元素を扱う量子多体効果、巨大惑星深部での相転移などを扱うために、経路積分法、インスタントン法、結晶構造予測法、反応経路探索法を極限環境に適応させるとともに、テンソルネットワークのような全く新しい量子多体問題の解法の検討が必要になる。地球惑星深部物質科学は材料科学、量子情報科学、生命科学、宇宙科学など多くの学問が出会う境界領域であり、新しい学問分野として成長する種子が数多く埋もれている。いままさに萌芽しようとする種子もあり、既に勢いよく芽吹いた種子もあり、土の中で静かにエネルギーを蓄えている種子もある。しかし、いずれも生まれたての命であるので大樹に成長してポストポスト「京」の重点課題として採択されるようしっかりと育てていきたい。

### (2) 実施内容

上記の目的を達成するため、極限環境オーダーN第一原理分子動力学法、極限環境経路積分分子動力学法、極限環境量子多体問題解法、極限環境構造物性予測法を含む極限環境統合シミュレータを開発する。

そして含水鉱物の熱力学的相図、地球の外核内核における軽元素不純物効果、巨大惑星中心部圧力における新鉱物結晶構造、「疑似」惑星中心部環境による水素系超伝導物質の探索など地球惑星進化の理解に資する極限環境下での物質探索と物性研究を行う。

第一原理計算による構造・物性予測のための多階層統合シミュレータを開発する。本アプリは、力場エンジン、分子動力学エンジン、熱力学積分エンジン、結晶構造探索エンジンなどから構成される。とくに力場エンジンにはオーダーN法の極限環境 CONQUEST も含まれ、これまで不可能だった数万原子の第一原理分子動力学計算による複雑流体や不純物を含んだ地球惑星物質のシミュレーションが可能になる。また、力場エンジンを利用した分子動力学(あるいは構造最適化)計算を多数並列に走らせることにより、水素の核量子効果を扱える経路積分分子動力学、自由エネルギーを計算する熱力学積分法、結晶構造予測法などのメタ並列計算が行えるようになる。また、これらの計算手法をひとつのパッケージに収めることにより、量子効果を取り入れた自由エネルギー計算のように複数の手法を組み合わせた計算が容易にできるようになる。力場計算には密結合通信が可能な MPI や OpenMP による並列化を行い、メタ並列化は疎結合通信でも十分であると考えられるが、具体的にどんな実装にするかはポスト「京」の設計の進行を見ながら調査準備期間中に決定する。これらの計算は多数のコアが利用できるポスト「京」で非常に高い効率が期待されるので、調査準備期間中に適切な並列化法や地球深部物質への適用の可能性を検討し、科学的視点・計算的視点から有望な課題を見だし、平成 30 年度からの本格実施期間に含水鉱物の熱力学的相図、地球の外核内核における軽元素不純物効果、巨大惑星中心部圧力における新鉱物結晶構造、「疑似」惑星中心部環境による水素系超伝導物質の探索などに挑戦する。

このような極限環境統合シミュレータにおいて不適切な計算結果を得る原因とその対策には、つぎのようなものが考えられる。(A) プログラムの誤り：小さなユニットセルの結晶系で通常の第一原理計算法で計算した結果とスーパーセルでオーダーN第一原理計算を用いて計算した結果を比較してプログラムの誤りを検出する。(B) 計算精度を制御するパラメータの妥当性：計算精度と計算資源はトレードオフの関係にある。問題を議論するのに十分な計算精度が必要最小限の計算資源で達成されているか、代表的な計算例について各種計算精度で計算して比較する必要がある。(C) 密度汎関数法の適用限界外：密度汎関数法の結果と高精度の計算手法(量子モンテカルロ法など)の結果を比較して、密度汎関数法の適用限界を検出する。(D) モデル化の問題：モデル化に問題があれば計算過程が正しくても妥当な計算結果は得られない。計算結果と実験結果を比較して、モデル化の適切性を検討する。

#### [サブ課題間連携の実施内容]

サブ課題Dと連携して、本サブ課題で検討される地球惑星深部の極限環境にある物質に対して、サブ課題Dが開発する強相関物質の物性解明に適した量子格子モデル Solver を適用する可能性を検討する。さらに、サブ課題Dで開発する新手法や計算プログラムは、重点課題7で用いられるものと深く関連しているため、重点課題7における高圧力を利用した新奇機能性電子材料の合成と物性の研究にも応用できるよう、アルゴリズムと計算プログラムの高度化について検討する。

### (3) 目標・期待される成果

地球深部を構成する珪酸塩・液体鉄・固体鉄などの物質の極限環境下での振る舞いは未だ良く分かっていない。電子・原子のミクロな視点に基づく極限環境統合シミュレータを開発し活用することによりこれらの物質の構造と物性を決定し、高圧実験、地球流体力学や地球科学の専門家と連携することにより、地

球の誕生から現在・未来までの進化をマクロに理解するための物質科学的基礎を築く。

サブ課題Cのテーマである地球惑星深部物質の構造と物性の研究では、おもに密度汎関数法による第一原理計算が使われている。しかし、地球最深部においては重い元素である遷移金属（鉄など）が多く分布し重要な役割を果たすので、密度汎関数法よりも正確に量子多体効果を取り入れた遷移金属の取り扱いが必要になる。また、スーパーアースなどの巨大惑星深部の超高温高压下の物質（Warm Dense Matter）では絶対零度常圧下でパラメータ化した密度汎関数法の適用範囲外になることがあり、超高温高压下でのパラメータ化や全く新しい量子多体問題の解法の開発が必要になる。このような地球惑星深部物質の計算は重点課題7で研究されている手法と密接に関連しているので、電子デバイス材料の問題用に拡張されたテンソルネットワーク法などの高度なアルゴリズムを適用して地球惑星科学上の重要問題を解決できないか検討する。新たな地球惑星深部物質科学が、電子デバイス材料、量子情報科学、地球惑星科学の境界領域から生まれることを期待したい。

サブ課題Cと重点課題7は、ともに原子レベルの電子状態計算に基づいた物質科学であるという点が共通であるので、計算手法の面で多くの共通点を持っている。他方、研究対象となる物質は、サブ課題Cでは自然界に存在する地球惑星深部物質であるのに対し、重点課題7では工業的用途を目的とした電子デバイス材料物質であるという点で異なる。電子状態計算の手法については、サブ課題Cが取り扱う地球惑星物質に適用されだしたのはごく最近で経験が浅いのに対し、重点課題7では、その工業的重要性に基づき膨大な資金と人材が投入されて高度に発達しているので、サブ課題Cは重点課題7から学ぶことが多い。他方、サブ課題Cが対象とする高温高压の極限環境は、重点課題7がおもに対象としてきた低温常圧の環境とは大きく異なるので、重点課題7に対して従来の手法を拡張発展させるモチベーションを提供することができる。

#### ＜サイエンス、エンジニアリング的な目標といつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのか＞

サブ課題Cでは、地球科学と物質科学の学際連携により、ピコ秒時間の結晶構造変化から数十億年にわたる地球惑星形成過程にいたる時間空間的にマルチスケールな地球惑星現象の第一原理に基づいた物質科学による理解を可能とする「地球惑星深部物質科学」を創立することを目標とする。具体的には、珪酸塩結晶の含水化や珪酸塩融体におけるナノスケール不均一化などの現象が、全地球規模の水循環やマグマ流動にいかに関係しているのか、さらにはそれが温度や圧力などの外部因子にどのように影響されるのかを解明する。これらは原子スケールの物理が地球スケールの現象に大きな影響を与えるマルチスケール現象であり、従来の地球科学と物質科学の垣根を取り払って初めて理解できるものである。いっぽう、誕生から46億年の時間をかけて地球はさまざまな原子構造の組み合わせの試行錯誤を行って有用な物質構造を探索してきた。その結果は地球内部や表層に存在する鉱物の物質構造という形に情報縮約されて保存されている。なかでも、鉱物表面における有機分子の反応から人類の誕生にいたる生命の歴史は特筆すべきである。そこで、これらの物質構造に情報縮約された地球46億年の知恵を常温超伝導、機能性ガラス、核廃棄物処理など人類による工業的利用に役立てようとする「Geology-inspired Materials Science」（地球惑星科学発の物質科学）の研究にも挑戦する。

上記目標に対して、サブ課題Cでは最終年度までに下記を実現する。理化学研究所で開発する極限環境統合シミュレータに関しては、経路積分分子動力学法、極限環境下反応経路探索法、極限環境インスタントン法などの導入により極限環境下での相転移・核量子効果の統合的研究を可能とする。量子科学技術研究開発機構ではセントロイド分子動力学法を開発し、極限環境下の物質のダイナミカルな特性を計算

できるようにする。愛媛大学では極限環境熱力学積分法を開発し極限環境下での含水鉱物の自由エネルギー計算を可能にする。物質・材料研究機構では、極限環境における数万原子のオーダーN 第一原理分子動力学法を開発し、珪酸塩融体のナノ構造をシミュレートできるようにする。山梨大学では、多階層構造解析法を開発し、珪酸塩融体のナノ構造と物性の関係を研究できるようにする。東京工業大学では、アダプティブな結晶構造予測法を開発し、系外巨大惑星深部の物質構造を明らかにする。大阪大学では、マテリアルインフォマティクスの考えを適用した結晶構造予測法を開発し、常温超伝導物質および地球惑星深部物質の発見に役立てる。北陸先端大学では、極限環境下での量子モンテカルロ法を開発し、密度汎関数法が破綻するような物質の特性を解明できるようにする。海洋機構では、大規模地球流体力学プログラムを開発し、本サブ課題で発見された第一原理的物性予測をもとにした新しい地球進化のシナリオを研究する。東京大学では、上記の大規模並列プログラムを「京」およびポスト「京」上で効率よく走らせる計算科学的手法を開発し研究を支援する。

本課題では、ポスト「京」の計算能力を前提として、第一原理に基づいた物質科学による地球惑星現象のマルチスケール理解の端緒を開くことが目的であるが、ポスト「京」に続くポストポスト「京」の計算能力を前提として、サブ課題A、BおよびDと連携して、必要に応じて量子多体効果を取り入れたうえで、マルチスケール破壊シミュレーションやマルチスケール・マルチフェーズ流体シミュレーションを極限環境に導入することができれば、45億年前の巨大衝突（ジャイアントインパクト）、地球の核生成、マグマオーシャンの固化などの破壊現象と多相複雑流体が織りなす地球史上の重大事象について真の意味で量子力学の基礎にもとづいたマルチスケールシミュレーションが初めて可能になるだろう。

#### <アウトプット成果>

##### (平成29年度終了時)

- ・極限環境統合シミュレータのプロトタイプを作成する。標準密度汎関数法による力場エンジン、分子動力学エンジン、経路積分分子動力学エンジンから構成される。
- ・温度一定オーダーN第一原理分子動力学法による、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性および、その不純物効果を研究できるようになる。
- ・圧力制御機能を付加し、温度圧力一定オーダーN第一原理分子動力学プログラムを開発する。
- ・多階層ネットワーク構造解析プログラムの作成を行う。

##### (本格実施フェーズ終了時)

- ・極限環境統合シミュレータ本格版が稼働する。本アプリは、オーダーNおよび標準密度汎関数法による力場エンジン、分子動力学エンジン、経路積分分子動力学エンジン、熱力学積分エンジン、結晶構造探索エンジンから構成される。
- ・温度圧力一定オーダーN第一原理分子動力学法による、珪酸塩融体、含水鉱物、液体鉄、固体鉄の物性およびその不純物効果を研究する。
- ・多階層ネットワーク構造解析プログラムの高度化を行う。

##### (ポスト「京」運用開始5年後)

- ・極限環境統合シミュレータをポスト「京」用に最適化してポスト「京」全体を使った計算を可能にする。
- ・ポスト「京」全体を使った計算により、それまでに実行したシミュレーションをさらに大規模化長時間化して初めて解ける問題、微量不純物、粒界、ナノ構造を持った系に挑戦する。

#### <アウトカム成果>

#### (ポスト「京」運用開始5年後)

・生命誕生の条件である地表の適度な水の量は、膨大な地球深部鉱物に含まれる水（水素）との微妙なバランスの結果であるが、地球深部での水の存在形態を我々は未だ良く知らない。地球深部に存在する水の量と存在形態を理解するためには、含水鉱物の結晶構造と熱力学的に安定な温度圧力条件を明らかにして含水鉱物の相図を作成する必要がある。そのためには、含水鉱物の各構造候補に対して熱力学積分法を用いて自由エネルギーを計算して最も安定な相を決定する必要がある。ただし、水の O-H 伸縮振動の量子エネルギーは数千 K の温度に相当するので、地球深部の高温高圧下で水の構造や物性値は量子効果の影響を強く受ける。この問題は、極限環境統合シミュレータにおいて経路積分分子動力学法と熱力学積分法を組み合わせた大規模並列計算を実行することにより解決される。

#### (ポスト「京」運用開始10年後)

・地球深部に多く存在する遷移金属（鉄など）が関連する圧力誘起スピン/構造転移、放射伝導、電気伝導・熱伝導などにおいて信頼できる予測をするには量子多体効果を正確に取り扱う必要があるが密度汎関数法は力不足である。また、巨大惑星深部の超高温高圧下の物質は、絶対零度付近で開発された密度汎関数法や量子多体問題解法の適用範囲外になることがある。これらの問題が電子デバイス材料の問題用に拡張されたテンソルネットワーク法などの高度なアルゴリズムによって解決される。

・サブ課題C全体をまとめると、含水鉱物の熱力学的相図、地球の外核内核における軽元素不純物効果、巨大惑星中心部圧力における新鉱物結晶構造、「疑似」惑星中心部環境による水素系超伝導物質の探索など地球惑星進化の理解に資する極限環境下での物質探索と物性研究が行われることで、地球深部における水や微量元素の分布や循環が明らかにされ、新たな地球観、惑星観が形成される。

#### <定量的目標>

また、課題全体として達成すべき成果を明確にするために、その成果実現に向けたサブ課題Cにおける定量的な目標を下記のように設定した。

#### (平成30年度末の定量的目標)

・サブ課題Cにおいて中心的なアプリとなるオーダーN 第一原理分子動力学シミュレータ「極限環境 CONQUEST」を用いて、サブ課題Cに1年間に配分された「京」の計算資源を用いて、地球深部における1万原子 10ps の SiO<sub>2</sub>メルトの定温定圧分子動力学を年に数回実際に実施することを可能とする。

#### (最終目標となる H31 年度末の定量的目標)

・サブ課題Cにおいて中心的なアプリとなるオーダーN 第一原理分子動力学シミュレータ「極限環境 CONQUEST」を用いて、サブ課題Cに1年間に配分された「京」の計算資源を用いて、地球深部における1万原子 50ps の SiO<sub>2</sub>メルトの定温定圧分子動力学を年に数回実際に実施することを可能とする。

#### [サブ課題間連携の目標]

サブ課題Dと連携して、本サブ課題で検討される地球惑星深部の極限環境にある物質に対して、サブ課題Dが開発する強相関物質の物性解明に適した量子格子モデル Solver を適用する可能性を検討する。さらに、重点課題7における機能性物質開発における課題解決などにも応用できるよう、アルゴリズムと計算プログラムの高度化を行う。

#### (4)「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

現在「京」により、CONQUEST による 20 万原子の構造最適化、3 万原子・1ps 分子動力学シミュレーション

ョンが実行されている。その他、通常の密度汎関数法分子動力学、経路積分分子動力学、熱力学積分法、結晶構造探索法、光学スペクトルの計算などの大規模単独シミュレーションが、「京」またはその他のパソコンで実現されている。

ポスト「京」によって、CONQUESTによる最大で100万原子・500psのシミュレーションが可能になり、珪酸塩融体が示す多階層構造と特異な物性の関係が解明できるようになる。またポスト「京」では日常的に結果を得るための日数が1/5程度となり、多様な条件下における第一原理分子動力学シミュレーションを同時に行う事が可能となる。ポスト「京」において極限環境統合シミュレータを利用することにより、上記単独シミュレーションを階層的に組み合わせて大規模並列複合シミュレーションを行うことができるようになる。たとえば、自由エネルギーを計算する熱力学積分法では通常の分子動力学計算を個々の異なった $\lambda \sim 1000$ の値に対して並列に実行するので並列数は( $\lambda$ の個数)  $\times$  (分子動力学の並列数)になり、量子効果を計算する経路積分分子動力学では、ボルツマン因子を $P(\sim 100)$ 分割して並列計算するので全並列数は $P \times$  (分子動力学の並列数)となる。したがって、量子系の自由エネルギーの計算は、( $\lambda$ の個数)  $\times P \times$  (分子動力学の並列数)の並列数を持った大規模並列複合シミュレーションとなり、ポスト「京」の膨大なCPU数を活用することにより実現される。

#### <ポスト「京」で初めてできる利活用>

サブ課題Cにおいて中心的なアプリとなる「極限環境 CONQUEST」に関しては、開発しているプログラムの公開に向けて、準備をしている。広く用いられている擬ポテンシャルの活用、PAO基底のデータベース作成を現在進めている。プログラム使用のためのマニュアル整備、チュートリアル資料の作成も行う予定である。(現在は限定BETA版使用者(>数十名)のみ。)

さらに、本課題による成果の画期的な利活用としては、人類の安全・便利で快適な生活の向上に役立つ(1)ナノ不均一性を考慮した機能性ガラスの構造と物性の理解と新材料の開発、(2)ナノ不均一性を考慮した高レベル放射性廃棄物(ガラス固化体)の構造と物性の理解と廃棄物処理法の開発に貢献すると期待される。

#### (5) 実施体制

サブ課題Cの組織体制、連携関係等の運営体制は、図4に示されているとおりである。サブ課題Cの全体の取りまとめと全体の研究連絡はサブ課題代表機関の理化学研究所が担当する。次に、2-3.(2)に掲げた課題について、科研費新学術研究の計画研究「核マントル物質とダイナミクスの理論モデリング」と連携しつつ、以下のような体制で研究を推進する。

極限環境統合シミュレータの設計と開発は、本サブ課題の分担機関、協力機関および連携を行う他のサブ課題の研究者の協力のもとで、サブ課題代表機関の理化学研究所が実施する。極限環境統合シミュレータと各種計算エンジンとを接続するインターフェース部の設計には、個々の計算エンジンの特性を考慮しつつ出来るだけ一般性を持たせて設計する。また、ポスト「京」の並列性能をフルに引き出すために理化学研究所AICSとの討議を行いながら作業を進める。

オーダーN密度汎関数法力場エンジンの開発は、サブ課題分担機関である、物質・材料研究機構の宮崎剛が担当する。理化学研究所AICSの大塚教雄はポスト「京」に向けた最適化を行い、宮崎剛を助ける。標準的密度汎関数法分子動力学およびオーダーN密度汎関数法分子動力学を用いた珪酸塩融体のシミュレーションは山梨大学の則武史哉が担当する。則武史哉はシミュレーション結果の多階層構造と物性と

の関係解析する。高エネルギー研究機構の若林大佑は、珪酸塩およびシリカの多階層構造と物性との関係に関わる X 線測定結果を提供する。原子力機構の服部高典および佐野亜沙美は、高圧中性子ビームラインの実験研究者たちとの連携を助ける。

標準的密度汎関数法分子動力学およびオーダーN密度汎関数法分子動力学を用いた外核・内核および系外惑星深部のシミュレーションは東京工業大学の梅本幸一郎が担当する。東北大学の鎌田誠司は、外核・内核の構造と物性に関わる実験結果を提供する。

熱力学積分法エンジンの開発は、愛媛大学の土屋旬が担当する。また、土屋旬は、愛媛大学地球深部ダイナミクスセンターの実験家たちとも連携して、熱力学積分法を用いた自由エネルギー計算により温度圧力空間での各種鉱物とくに含水鉱物の熱力学的安定領域を明らかにする。海洋研究開発機構の中川貴司は、得られた含水鉱物の相図を取り入れたマントル対流シミュレーションを行い、地球の進化における地球深部水の影響を明らかにする。

経路積分分子動力学法エンジンの開発は、横浜市立大学の立川仁典、量子科学技術研究開発機構の池田隆司らが担当して、原子核の量子効果を研究する。地球惑星深部物質としてあらゆる局面で重要な水素は、原子核の運動の量子効果が重要であることが知られている。

結晶構造予測法エンジンの開発は、大阪大学の石川孝洋が担当する。石川孝洋は、遺伝的アルゴリズムなどの手法を活用し、地球惑星深部の極限環境下における結晶構造を予測し地球科学の物質科学的理解に役立てる。それとともに、大阪大学極限科学センターの清水克哉の実験グループおよび萌芽的課題「極限マテリアル」の明石遼介らと連携して、結晶構造予測法を高圧力を利用した水素系高温超伝導体の合成にも応用する。東北大学金属材料研究所の高木成幸は、東北大学金属材料研究所の実験家と連携して水素貯蔵材料の探索を行う。東京大学の吉本芳英は、拡張マルチカノニカル法による古典ポテンシャルの最適化および粗視化ダイナミクスによるシミュレーションの加速を研究する。

量子モンテカルロ法エンジンは、北陸先端大学の前園涼と本郷研太が担当する。地球惑星深部の極限環境下における密度汎関数法を超える量子多体効果については、Franco Nori、柚木清司、有田亮太郎らの支援を受けながら、サブ課題Dおよび重要課題7と連携して飯高敏晃が取り組む。

# サブ課題C

# 地球惑星深部物質の構造と物性

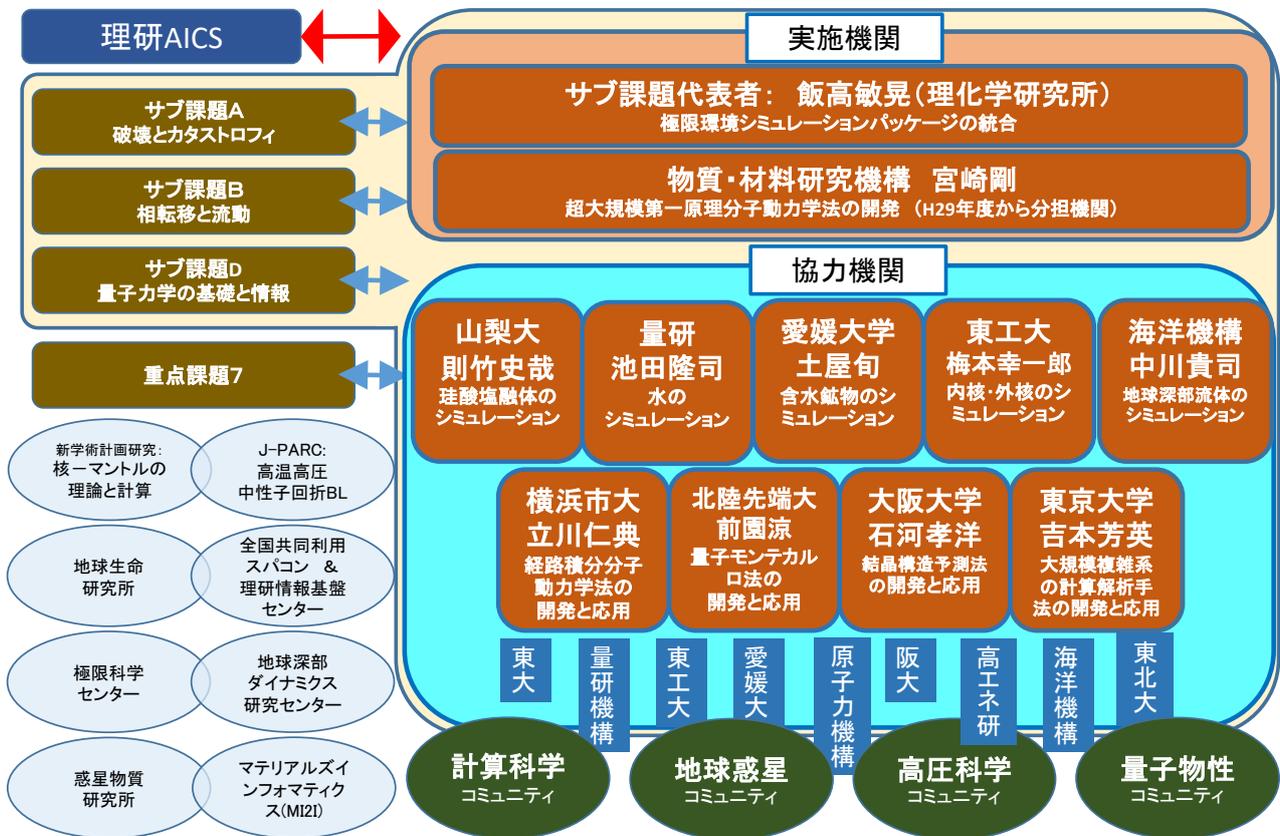


図4. サブ課題Cの実施体制 (H30.1時点)

## 2-4. サブ課題D. 量子力学の基礎と情報

### (1) 目的・意義

トポロジカル量子相や量子色力学(QCD)計算など、多くのグランドチャレンジ問題を数値的に扱う際、代表的な従来の計算手法を用いると、必ず負符号問題と呼ばれる困難に遭遇し、大規模な計算ができない。したがって、量子多体問題に対して、負符号問題の制約なく、任意に与えられた系の計算を多項式時間で行いうる計算手法を得ることは、量子力学の創始以来の大きなブレイクスルーである。本課題で中心的な手法と位置付けているテンソルネットワーク法では、負符号問題の困難なく、高精度の計算を実現できる。これによって、新しいメカニズムによる超伝導体など、強相関電子系における物質探索の問題、宇宙や物質の起源に迫る有限密度 QCD における相構造解析の問題、近年さかんに研究されている光格子で実現されるさまざまな量子多体問題、とくに量子計算や量子通信との関連で議論される量子シミュレータや量子アニーリングの問題など多岐にわたる問題の解決が可能となる。これらは、自由に物質パラメータをコントロールできない物質に関する問題や、極限的な環境下での問題であるため、多くは実験によって再現することは困難あるいは不可能であり、ポスト「京」でなければ達成できない成果に直結する。対象となる未解決の重要問題は、非常に多岐にわたっており、広く古典・量子を含めた統計力学モデル、近年注目を集めているトポロジカル相をはじめとする強相関量子系に現れる質的に新しい相の解明、宇宙や物質の起源に迫る格子 QCD 計算による QCD 相構造の解明の問題、光格子で実現されるさまざまな量子多体問題、とくに量子計算や量子通信に関わる問題などがあり、これらの問題に対して統一的で一般性のある新手法を開発する。より具体的には、テンソルネットワーク(TN)法、数値対角化法、量子マスター方程式法、熱的純粋状態法など、量子多体問題の各側面に対してベストな手法をベースにしつつ、TN 繰り込み(TNR)法やウェーブレット展開法など、最近になって得られたマルチスケール性を手法にも取り入れる知見を応用して、大規模並列計算のための一般的かつ強力な新手法を開発し、ポスト「京」用に最適化されたコードを開発する。また、それらを利用した物性科学、素粒子論、量子暗号通信などにおける実証研究を行う。とくに、従来解決されていなかった重要課題(新奇量子状態の実現、相関と乱雑さを持つ系の様相解明、有限密度 QCD の相図、Strong CP 問題など)の解決に直結する知見の獲得や効率的な情報圧縮に対する新手法の確立を目指す。

### <新規性・萌芽性>

サブ課題Dの最終目標は量子系を自由にシミュレートする方法論と計算コードの開発であるが、テンソルネットワーク(TN)法は最近になって本格的な方法論の開発が始まったものであり、根本的な改良についての提案もいまだになされている状況である。また、多項式時間の計算量複雑性をもった画期的な方法であるものの、多項式のべき指数が大きく、計算量の困難をまだ十分に解消した状態にはなっていない。TN法について、すでに知られているべき指数よりも低い複雑性をもった方法論は、必然的に既存のTN法とは非常に異なるものとなり、その開発と並列化が今後のチャレンジングな課題となる。

サブ課題Dのもう一つのテーマである量子通信のための基礎技術開発に関しては、光子からダイヤモンド核子への量子テレポーテーション転写の手法が、分担者が独自に開発した独創的なアイデアであり、物質に内在する量子もつれを利用する世界でも例を見ないものである。このため、光子の吸収という自然現象を利用した光子から物質への量子状態の転写が可能となる。転写の成功率を向上させる仕組みを内蔵する点でも優位性を持つ。また、量子操作に機械学習の技術を導入する例は世界的にもなく、量子技術とポスト「京」を組み合わせることで、圧倒的な優位性を示すことができる。さらに、精密第一原理計算

を組み合わせることで、量子技術の実用化に必要な 99%を遥かに超える量子制御精度を実現できれば、さらなる優位性を示すことができる。

## (2) 実施内容

物性理論、素粒子理論、極低温原子系、量子通信などの分野で現れる問題に対して広く適用可能な、汎用的で強力な古典・量子格子問題の解決スキームの確立と、その量子ビット系ダイナミクスに対する応用をおこなう。また、それに必要な数理構造の解明、およびマルチスケールダイナミクスに対する一般的処方箋の提示を行う。

テンソルネットワーク (TN) 法、数値対角化法、量子マスター方程式法、熱的純粋状態法など、量子多体問題の各側面に対して最適な手法をベースにしつつ、TN 繰り込み (TNR) 法やウェーブレット展開法など、最近になって得られたマルチスケール性を手法にも取り入れる知見を応用して、大規模並列計算のための一般的かつ強力な新手法を開発し、ポスト「京」用に最適化されたコードを開発する。これは、従来法 (モンテカルロ法など) と比較して、計算コストの体積依存性が小さいことや符号問題がないことなどの明確な優位性を持つ新手法となる。これによって、従来計算不可能だった量子多体系物理、ランダム古典系、カオス的な流動など多くの研究対象を統一的に解明するための一般性の高い理論手法として整備し、弾性体におけるカタストロフィックな現象や複雑流体など、マルチスケール現象が重要となる本萌芽的課題中の他サブ課題における目標達成にも貢献する。とくに初年度は他サブ課題における問題の詳細を調査し、本サブ課題における手法開発方針に反映させる。さらに、量子力学多体問題を計算の数理的構造の問題としてとらえなおし、これを解明することで、ポスト「京」レベルの並列計算を実現するアルゴリズムの開発を行う。とくにそれを物性物理学における強相関電子系の問題に適用する。

このなかで、物性研究所では、応用として、物性理論の諸課題 (トポロジカルな量子相、トポロジカル励起子が重要な役割を果たす量子臨界現象、量子多体状態の実現メカニズム解明など) を念頭に置いた応用を目指し、そのために必要な計算プログラムの開発・高度化を行う。また、コード開発において、サブ課題D内の複数テーマに共通の課題や、複数のサブ課題に共通のテーマを整理・検討し、解決のための研究活動を調整する。

筑波大学では、素粒子物理学の諸課題 (軽いクォークのダイナミクス、有限密度 QCD の相図、Strong CP 問題、格子超対称性理論、格子カイラルゲージ理論など) の解明を念頭においた計算プログラムの開発・高度化を行い、それを応用することによって、これら諸課題の解決に直結する知見を獲得する。

横浜国立大学では、量子通信から派生する諸課題を解決する。さらに、量子暗号通信や、量子計算機の実現に向け、現実の量子ビット系 (ダイヤモンドの窒素空孔 (NV) など) を想定した支配方程式導出を行い、上述の TN 計算やダイナミクス計算へと橋渡しをする。

以上の遂行のため、テンソルネットワーク法計算における多数の近似法の比較検討、複数の並列化方式の比較検討、より精度の高い計算手法を考案するためのブレイクスルーミーティング、テンソルネットワーク法や量子ダイナミクス計算の手法に関する海外の専門家との討論などを行う。(このために参加研究者に旅費を支給する。)

### [サブ課題間連携の実施内容]

・ウェーブレット解析は、方法論自体が多階層の構造を有しているため、階層間を連続的につなぐ解析あるいはシミュレーションの手法として注目されている。サブ課題Dで中心にあつかうテンソルネット

ワーク法も一種のウェーブレットであるとみなせる形式のものも存在する。サブ課題Bと連携し、ウェーブレットに代表される多階層解析のアイデアを並列計算に生かした新しい流体計算の方法論を提案することを目指す。

・サブ課題Cで検討される地球惑星深部に特有な物質科学計算で登場する計算手法に対して、サブ課題Dでは量子格子モデルの Solver であり、相関の強い物質の性質を解明するのに適している。サブ課題Cと連携し、両者の方法論上の接点を議論し、量子格子モデル Solver の地球惑星深部科学への応用の可能性を検討する。

・本萌芽的課題で開発する新手法や計算プログラムは、重点課題7で用いられるものと深く関連しているため、重点課題7における機能性物質開発における課題解決などにも応用できるよう、アルゴリズムと計算プログラムの高度化を行う。

#### < 厳密対角化パッケージ HΦ の重点課題7サブ課題Bとの切り分け >

本萌芽的課題 サブ課題 D では、特に大規模な計算を志向し、方法論にまで立ち入った高度化・並列化を行う部分を実施内容としている。すなわち、本萌芽的課題においては、現在必ずしも HΦ に反映されているわけではないが、将来的には HΦ などのオープンソースコードに反映され、一般の利用に供せられるべき技術開発が含まれる。これに対して、重点課題7サブ課題Bでは、既存アルゴリズムの通常の並列化と、産業応用を志向し使い勝手の良さを追求したアプリケーションとしての整備を実施内容とする、という切り分けになっている。

### (3) 目標・期待される成果

近年、情報数理コミュニティと理論物理学コミュニティの接点において誕生したテンソルネットワーク法は、物理学におけるブレイクスルーを実現する鍵として注目されており、本課題では、この方法を中心として、物性論、素粒子論、応用数理、量子通信など複数分野に跨る研究者がそれぞれの分野の知見を持ち寄ることによって、ポスト「京」レベルの大規模並列化に適した一般性のある新手法・アルゴリズムを開発し、上記の諸問題の解決を可能とする科学研究基盤を構築する。

#### < サイエンス、エンジニアリング的な目標といつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのか >

サブ課題Dで主に扱うテンソルネットワーク法は、最近になって情報数理コミュニティと理論物理学コミュニティの接点において誕生した新手法であり、物理学におけるブレイクスルーを実現する鍵として注目されている。本課題では、この手法を中心としながら、従来法の高度化も併せて、量子多体問題の一般的ソルバの開発というグランドチャレンジ課題に挑んでいる。この手法では、テンソルの低ランク近似が利用されており、情報圧縮・機械学習などへの展開も期待されている。本課題では量子ダイナミクス計算もターゲットとしており、従来計算不可能だった長時間の量子ダイナミクスの追跡が可能になることによって、光格子、光コンピュータなど量子デバイスの設計にも大きな寄与をすると期待している。

本サブ課題では、物性論、素粒子論、応用数理、量子通信など複数分野に跨る研究者がそれぞれの分野の知見を持ち寄ることによって、ポスト「京」レベルの大規模並列化に適した一般性のある新手法・アルゴリズムを開発し、上記の諸問題の解決を可能とする科学研究基盤を構築する。またこれを応用した京コンピュータ上での応用計算を行う。具体的には、京での予備的な計算によって、物性理論における諸モデル、すなわち、カゴメ格子系、三角格子ハイゼンベルクモデル、J1-J2 モデル、双2次相互作用ハイゼンベルクモデル、などのフラストレート量子スピン系における量子スピン系の相図の概要が得られるまで

に必要な計算を実施する。また、2次元超対称模型、3次元格子ゲージ理論などの素粒子物理学における基本的なモデルにおける実証計算を行う。さらに、量子ビット系のダイナミクス計算を行い、サブ課題内で実施する量子通信素子系の実験と比較対照することにより量子通信素子の設計のための指針を得る。ただし、京コンピュータおよび現状で利用可能な計算資源のレベルでは、より詳細な物性解明には至らないと予想している。たとえば、カゴメ格子系や J1-J2 モデルの計算では、京コンピュータの利用によって、従来得られていたエネルギー値を超える計算結果が得られるものと期待しているが、そこから更に進んで、期待されるスピン液体相のトポロジカル励起の詳細などを議論の余地がないレベルで明らかにするためには、ポスト京を利用した大規模並列計算が不可欠であると考えている。また、更に進んで、一般のフェルミオン系の多項式時間計算の実現や、QCD相図の確定のためには、ポスト京のさらに次の計算機が必要になると予想する。

#### <アウトプット効果>

##### (平成29年度終了時)

物性理論、素粒子理論、極低温原子系、量子通信などの分野で現れる問題に対して広く適用可能な、汎用的で強力な古典・量子格子問題の解決スキームを、テンソルネットワーク法に基いて確立し、それに必要な数理構造の解明を行う。また、新しいスキームを用いた基礎的プログラムを平成29年度終了時までまでに1件開発する。ウェーブレットなど多階層計算手法の可能性を検討する。また、量子通信を念頭においた、量子ビット系ダイナミクスモデルを構築し、その計算のためのアプリケーションプログラムを平成29年度終了時までまでに1件試作する。

##### (本格実施フェーズ終了時)

平成29年度までの成果として得られる応用プログラムを利用して、各分野の応用計算を実施する。同時に、平成29年度終了時までまでに開発されたテンソルネットワーク法の計算プログラムの高度化を行うことによって、1件の応用計算プログラムを開発する。およびマルチスケールダイナミクスに対する一般的処方箋に従って、計算プログラムを試作する。また、平成29年度までに試作したプログラムを応用して、量子ビット系のダイナミクス計算を行う。また、試作版のアプリケーションプログラムを本格実施フェーズ終了時までまでに完成させる。

##### (ポスト「京」運用開始5年後)

本格実施フェーズで得られたテンソルネットワーク法に基づく計算プログラムを更に高精度化する。具体的には到達近似精度を10倍程度向上させる。また、量子ダイナミクス計算のための計算プログラムなどとも統合した、一般的で適用範囲の広い、量子系ソルバライブラリーとして整備・公開する。

#### <アウトカム成果>

##### (ポスト「京」運用開始5年後)

強相関電子系、素粒子物理、原子核物理、量子化学、量子情報、極低温原子系、複雑流体などの各分野において、理論予測の精度が格段に向上し、質的に異なった知見が得られる。とくに、量子格子問題の大規模並列化ソルバを利用した物性科学分野のグランドチャレンジ問題の解決に向けた知見獲得として、物性理論におけるトポロジカル量子相のいくつかの実例における解明、新奇量子状態の実現、相関と乱雑さを持つ系の様相解明が行われる。また、量子格子問題の大規模並列化ソルバを利用した素粒子・原子核分野の未解決問題の知見獲得として、有限密度QCDの相図、Strong CP問題などの解決に直結する計算結果が創出される。また、効率的な情報圧縮に対する新手法の確立へのきっかけが与えられる。さらに、複

雑流体などにおける経験則の新しい解釈、または新現象論の発見、量子通信ネットワークの制御理論への応用につながる新たな量子アルゴリズムが提案される。

#### (ポスト「京」運用開始10年後)

強相関電子系、素粒子物理、原子核物理、量子化学、量子情報、極低温原子系、複雑流体などの各分野において、精度の高い計算結果が蓄積し、いくつかのグランドチャレンジ問題が解決される。物性科学分野のグランドチャレンジ問題の解決として、フラストレート磁性体や、新奇超伝導体など強相関電子系の本質が明らかになる。素粒子・原子核分野のグランドチャレンジ問題の解決として、有限密度 QCD の相図、Strong CP 問題などが解決される。さらに、現象の数理構造を利用した大規模固有値解析手法は、機械学習や、ビッグデータの解析など、数理的手法を用いる多くの分野において応用されるようになり、実験と強く連携したダイナミクスソルバは、IoT から AIP に至る社会のセキュリティを支える量子情報技術の基礎となる。

#### <定量的目標>

また、課題全体として達成すべき成果を明確にするために、その成果実現に向けたサブ課題Dにおける定量的な目標を下記のように設定した。

#### (平成30年度末の定量的目標)

・サブ課題Dにおいては、量子系虚数時間発展 (ITE) + 角転送行列 (CTM) 法のプログラムを開発し、これを用いて実空間2次元、テンソル次元200の計算を実施する。また、量子スピン系 (共振器系) の計算においてはスピン数40、フォトン数160の非平衡定常状態のシミュレーションを実行する。

#### (最終目標となるH31年度末の定量的目標)

・サブ課題Dにおいては、量子系虚数時間発展 (ITE) + 角転送行列 (CTM) 法のプログラムによる計算では、実空間2次元、テンソル次元300の計算を実施する。また、量子スピン系の計算においてはスピン数50、フォトン数カットオフ250の非平衡定常状態のシミュレーションを実行する。

#### [サブ課題間連携の目標]

サブ課題Bと連携し、ウェーブレットに代表される多階層解析のアイデアを並列計算に生かした新しい流体計算の方法論を確立する。また、サブ課題Cで検討される地球惑星深部に特有な物質科学計算で登場する計算手法に対して、サブ課題Cと連携し、量子格子モデル Solver の地球惑星深部科学への応用方法を明らかにする。さらに、重点課題7における機能性物質開発における課題解決などにも応用できるよう、アルゴリズムと計算プログラムの高度化を行う。

#### (4)「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

①現状でできていること： 基本的な2次元量子磁性モデルにたいして、低いテンソル次元の計算を逐次実行で実施 (変分モンテカルロ法など最善の既存手法と比較してほぼ同程度の精度)。2次元量子電磁力学を用いた、TN法の実証と4次元イジングモデル解析による高次元モデルへの応用可能性の検証。固有値解法アプリケーション10億から150億次元の計算を数万ノード規模で実施。40量子ビット程度の量子多体系の基底状態波動関数、励起状態計算。

②ポスト「京」でなければならないこと： 負符号問題のある磁性モデル、電子系モデル、格子QCDにたいして、高テンソル次元の高並列計算によって既存手法では到底到達できない精度を達成し、先駆的知見を獲得。非一様な古典統計力学モデルに対する、階層を持ったTNの構築。50量子ビット程度の量子多体

系の基底状態波動関数計算。

#### <ポスト「京」で初めてできる利活用>

サブ課題Dで開発するテンソルネットワーク法プログラムや量子ダイナミクスシミュレーションコードに関しては、本課題実施中にオープンソースプログラムとして公開し、広く無償で利用できるよう整備する。これによって、量子通信素子や量子コンピュータ設計に資するものと期待している。

また、本課題で実施される量子通信のための基礎技術は高いセキュリティを持った通信技術として、社会の基礎的インフラストラクチャの構築に貢献すると期待している。

#### (5) 実施体制

サブ課題Dの組織体制、連携関係等の運営体制は、図5に示されているとおりである。本サブ課題では、研究項目①「計算物性科学の手法革新」については、東京大学物性研究所が担当し、物質科学研究におけるテンソルネットワーク法に基づく新しい並列化アルゴリズム開発を行う。(川島直輝) また、ウェーブレットやテンソルネットワーク法などに基づくマルチスケールダイナミクス計算の枠組みについて検討する。さらに、行列ベクトル積に帰着されるいくつかの計算科学的手法(シュレディンガー方程式の直接解法、量子マスター方程式、熱的純粋状態法など)の並列化アルゴリズム開発を行う。研究項目②「テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用と数理的・計算機科学的な高度化開発」は、筑波大学が担当し、テンソルネットワーク(TN)法の素粒子物理学への応用を目指し、「京」を用いたTN法の大規模並列アプリケーション開発などに取り組む。(藏増嘉伸) また、数理的・計算機科学的観点から、TN法における数理構造の解析と低ランク近似法の開発などを行う。(櫻井鉄也) これらの研究内容については、方法論上の共通性が高いため、東大物性研究所と筑波大学が密接に連携して実施を進める。研究項目③「量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーシミュレーション」は横浜国立大学が担当し、量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーの実験系(ダイヤモンドNV中心系)を準備するとともに、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、核スピンとの超微細相互作用を評価する。これに基づいて導かれたモデルハミルトニアン解析において、東京大学物性研究所で実施する量子ダイナミクス計算のためのアルゴリズムや計算プログラムを利用する。(小坂英男)

さらに、運営体制組織図に示すように数多くの協力機関が参画する。各協力機関の協力内容は以下のとおり。東京大学は、TN法に基づく新しい方法論の応用(今田正俊)、TN法に基づく並列化計算プログラム開発(大久保毅)、量子ダイナミクス計算手法開発(藤堂眞治、宮下精二、三澤貴宏、山地洋)、線形演算並列化(須田礼仁)、第一原理計算プログラム並列化(野口良史)、マルチスケールシミュレーション手法開発(渡辺宙志)、京都大学は、TN法(MERA)に基づく新しい方法論開発(原田健自)、兵庫県立大学は、TN法(PEPS)に基づく新しい方法論開発(鈴木隆史)、シュレディンガー方程式の直接解法の並列化(中野博生、坂井 徹)、豊橋技術科学大学は、TN法の観点からのウェーブレット展開法の開発(浜田信次)、神戸大学は、TN法(TPS、TNR)を用いた非一様古典統計モデルの熱力学解析(西野友年)、東京工業大学理学院は、量子ウォークによる量子ダイナミクス(関野秀男)、新潟大学は、共形場理論のTN法(MERA、TNR)による表現と量子・古典対応の解析(奥西巧一)、東京理科大学は、実時間シミュレーション手法の開発(遠山貴巳)、理化学研究所は、実時間シミュレーション手法の開発(伊藤伸泰、飯高敏晃)、量子ダイナミクス解析(曾田繁利、柚木清司)、テンソルネットワーク法による高次元(3次元以上)格子ゲージ理論・スピンモデルの解析(中村宜文、清水裕也、吉村友祐)、TN法に基づいた量子化学における電子相関

法の開発（中嶋隆人、中谷直輝）、TN法（TPS、TNR）を用いた並列計算による繰り込み群解析（上田宏）、金沢大学は、テンソルネットワーク法による物理量計算のための手法開発（武田真滋）、名古屋大学は、TN計算における数理論の解析（曾我部知広）、Slovak Academy of Scienceは、TN法を用いた古典統計系のエンタングルメント解析（Andrej Gendiar, Roman Kremar, Jozef Genzor）、岐阜大学は、第一原理グリーン関数法による量子ダイナミクス計算（小野頌太）、横浜国立大学は、第一原理電子状態計算プログラム開発（大野かおる、堀切智之）、東北大学は、マルチスケールシミュレーション手法開発と応用（川勝年洋、久保百司）である。

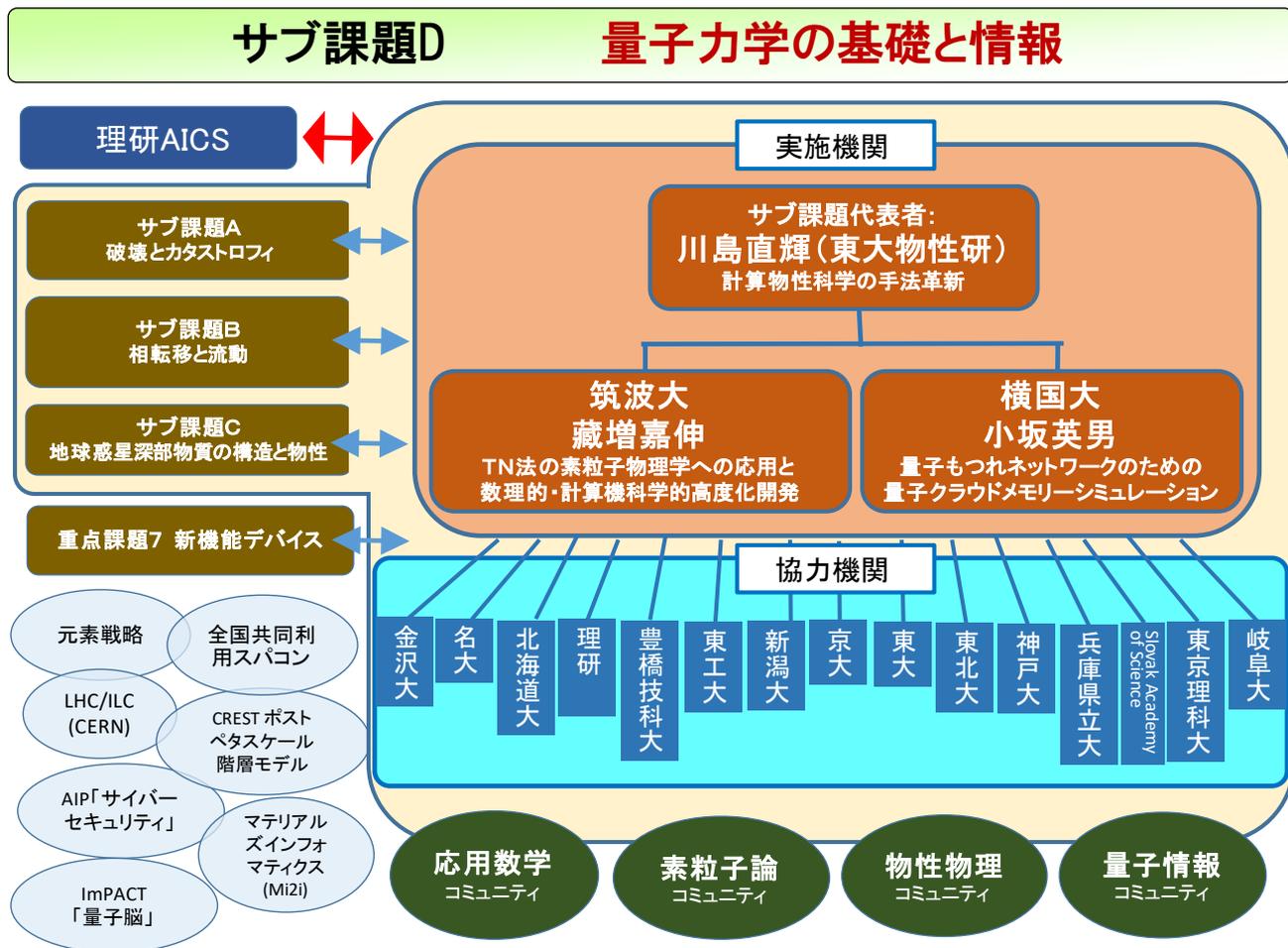


図5. サブ課題Dの実施体制 (H30.1時点)

### 3. 採択時の留意事項への対応状況

#### 【サブ課題Aの指摘事項への対応】

(1) 重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」および、重点課題3「津波・地震による複合災害の統合的予測システムの構築」とのアプローチの違いも明確にすること。

重点課題7、重点課題3との違いは両者とも、2-1.(3)に反映済みである。

(2) 原子分子レベルからの破壊のメカニズムと、地震に関係する破壊断層に共通性に関する分析を行い、その分析を踏まえた研究計画の立案を行うこと。

材料破壊と断層破壊に関連する共通現象として、例えば、「摩擦（物理・化学）」、「変形の局在化（材料のせん断帯・地殻の断層）」、「2次元破面に対する3次元的な塑性域・破壊域の広がり（材料亀裂前方の塑性域・断層のマイクロクラックによる分岐）」が存在する。

そこで、大規模分子動力学計算により、上記の現象を踏まえた材料の塑性・破壊現象における統計法則を導き出し、地震現象における統計法則との比較を通じて、材料と断層破壊の類似性および相違性が探求可能となる。当初は、塑性・破壊現象の統計法則の対象材料として結晶材料のみを考えていた。しかし、観察されている地震統計法則が、大規模地震の前後で変化するなど、地殻に溜まったひずみ量に応じて、断層破壊メカニズムが変化している可能性があり、地震統計法則と材料シミュレーションの統計的性質を比較するためには、多様な変形・破壊モードを表現できる材料モデリングが必要不可欠であることがわかった。そのため、対象とする材料に非晶質材料を加えることにした。現在、原子半径の異なる数種類の原子をある割合で混ぜ合わせることで、結晶構造から非晶質構造まで多様な原子構造を連続的に表現する原子モデリングの開発を進めており、単結晶、合金、多結晶、非晶質構造を作成することが可能になりつつある。

さらに、作成した非晶質構造に対する変形シミュレーションにおいて、結晶材料と同様に、間欠的な塑性現象と地震とで共通する統計的性質（ベキ分布）が表現できている。また、結晶と非晶質を混在したモデルも作成可能であるため、外部負荷レベルに応じて起動する変形・破壊モードの遷移現象も観察できる。この原子モデリングの開発により、固体材料の組織や構造に起因した様々な変形・破壊モードの統計的性質の獲得が可能となり、原子レベルの材料破壊現象とマクロスケールで観察される断層破壊の関係性の理解をより深化できるようになる。上記の分析と原子シミュレーションの成果を踏まえて、研究計画の立案を行い、2-1.(2)④に反映させた。

(3) 提案にあるアプリケーション、手法（「LASKYO」「加速分子動力学」「境界積分」等）が、どのような原理に基づくもので、従来とどのように違うのか破壊現象の何を明らかにするのかを明確にすること。

LASKYO に関しては、2-1.(2)①に反映済みである。

加速分子動力学に関しては、2-1.(2)②に反映済みである。

境界積分方程式法に関しては、2-1.(2)③に反映済みである。

(4) 複数の提案課題が連携することによる相乗効果を見込むものとして、萌芽的課題①の以下の3提案と統合して事業を推進すること。

(ア) 提案課題名：極限環境への挑戦：地球惑星深部物質の多階層構造と物性

研究代表者：飯高敏晃（理化学研究所戎崎計算宇宙物理研究室・専任研究員）

(イ) 提案課題名：相転移と流動の織りなす大変動：マルチスケール手法で解明するナノバブルから火山噴火までの混相流動

研究代表者：川勝年洋（東北大学大学院理学研究科・教授）

(ウ) 提案課題名：量子力学の基礎と情報：エンタングルメント統御による極限精度への挑戦

研究代表者：川島直輝（東京大学物性研究所・教授）

上記の(ア)～(ウ)とは、統合して事業を推進することで、研究成果の議論や相互利用を活性化させ、研究の相乗効果を図る。このことは、1.(6)に反映済みである。特に、上記の(イ)とはサブ課題間連携を実施する。その具体的な内容については、1.(2)および2-1.(2)[サブ課題間連携の実施内容]と2-1.(3)[サブ課題間連携の目標]に反映済みである。

#### 【サブ課題Bの指摘事項への対応】

(1) アプリケーション開発においては、具体的な応用分野を想定した開発計画を立案すること。

1.(5)のサブ課題Bの年次計画に記載の通り、超大規模分子動力学シミュレータを用いた気泡形成における添加成分効果、MSSPとミクロシミュレータの連携によるマルチスケールシミュレーションによる雲の形成過程および機械内部流動での気泡発生の機構等をターゲットとした応用を目指すこととしており、2-2.(2)にも反映済みである。

(2) 複数の提案課題が連携することによる相乗効果を見込むものとして、萌芽的課題①の3提案と統合して事業を推進すること。

(ア) 提案課題名：極限環境への挑戦：地球惑星深部物質の多階層構造と物性

研究代表者：飯高敏晃（理化学研究所戎崎計算宇宙物理研究室・専任研究員）

(イ) 提案課題名：破壊とカタストロフィの極限への挑戦：材料、人工物から地球までのマルチスケールアプローチ

研究代表者：久保百司（東北大学金属材料研究所・教授）

(ウ) 提案課題名：量子力学の基礎と情報：エンタングルメント統御による極限精度への挑戦

研究代表者：川島直輝（東京大学物性研究所・教授）

上記の(ア)～(ウ)とは、統合して事業を推進することで、研究成果の議論や相互利用を活性化させ、研究の相乗効果を図る。このことは、1.(6)に反映済みである。特に、上記の課題(イ)および(ウ)とのサブ課題間連携を実施する。その具体的な内容については、1.(2)および2-2.(2)[サブ課

題間連携の実施内容]と2-2.(3)[サブ課題間連携の目標]に反映済みである。

#### 【サブ課題Cの指摘事項への対応】

(1) 従来の計算のスケールアップに加えて、独創性・新規性、計算の大規模化により得られるブレイクスルーについても明確にすること

2-3.(2)と、2-3.(4)に記載しており、反映済みである。

(2) マルチスケール・マルチフィジックスの問題として、個々のシミュレータを統合する仕組みを明確にすること

2-3.(2)に記載しており、反映済みである。

(3) 計算結果について、妥当性の検証の方法を明確にすること。

2-3.(2)に記載しており、反映済みである。

(4) 重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」との関係、違い、および、学際連携の進め方についても明確にすること。

2-3.(3)に記載しており、反映済みである。

(5) 複数の提案課題が連携することによる相乗効果を見込むものとして、萌芽的課題①の以下の3提案と統合して事業を推進すること

(ア) 提案課題名：相転移と流動の織りなす大変動：マルチスケール手法で解明するナノバブルから火山噴火までの混相流動

研究代表者：川勝年洋（東北大学大学院理学研究科・教授）

(イ) 提案課題名：破壊とカタストロフィの極限への挑戦：材料、人工物から地球までのマルチスケールアプローチ

研究代表者：久保百司（東北大学金属材料研究所・教授）

(ウ) 提案課題名：量子力学の基礎と情報：エンタングルメント統御による極限精度への挑戦

研究代表者：川島直輝（東京大学物性研究所・教授）

上記の(ア)～(ウ)とは、統合して事業を推進することで、研究成果の議論や相互利用を活性化させ、研究の相乗効果を図る。このことは、1.(6)に反映済みである。特に、上記の課題(ウ)とのサブ課題間連携を実施する。その具体的な内容については、1.(2)および2-3.(2)[サブ課題間連携の実施内容]と2-3.(3)[サブ課題間連携の目標]に反映済みである。

### 【サブ課題Dの指摘事項への対応】

(1) 具体的にどのような科学技術上の課題が存在し、どのように解決するか具体的なアプローチについても明確にすること

トポロジカル相をもつ量子系などを扱うとき、代表的な従来の計算手法を用いた場合、必ず負符号問題に遭遇し、大規模な計算ができない。本課題で中心的な手法と位置付けているテンソルネットワーク法では、負符号問題の困難なく、高精度の計算を実現できる。その具体的な内容については、2-4.(2)に反映済みである。

(補足) 科学技術上の課題は、最近ノーベル物理学賞の受賞対象となったトポロジカル励起や、トポロジカル量子相に関する研究などを理論的に定量的に扱おうとしたとき、代表的な従来の計算手法であるモンテカルロ法を用いた場合、必ず負符号問題に遭遇し、大規模な計算ができないことである。これによって、トポロジカルな性質が絡んだフラストレートスピン系や、新奇な超伝導物質などを数値計算によって十分に解明できてこなかった。これは、有限密度格子 QCD などの問題でも共通している。これにたいして、本課題で中心的な手法と位置付けているテンソルネットワーク法では、ほとんどの興味ある物理系が、実は量子エンタングルメントの小さい特殊な状態であることを利用して、負符号問題の困難なく、高精度の計算を実現する手法であると期待されており、実際に、いくつかの実例からその期待が裏付けられている。

(2) 旅費（国内、海外旅費）について、研究計画の具体的内容との関係を明確にすること

テンソルネットワーク法計算における多数の近似法の比較検討、複数の並列化方式の比較検討より精度の高い計算手法を考案するためのブレインストーミング、テンソルネットワーク法や量子ダイナミクス計算の手法に関する海外の専門家との討論などにおいて、意見交換するために旅費が必要。この内容は、2-4.(2)に反映済みである。

(補足) サブ課題Dでは、従来共同研究の関係になかった、異分野の研究者が多く参加しており、十分な意思疎通を図るために高い頻度での研究会合が必須である。具体的には、テンソルネットワーク法計算における多数の近似法の比較検討、複数の並列化方式の比較検討、より精度の高い計算手法を考案するためのブレインストーミング、テンソルネットワーク法や量子ダイナミクス計算の手法に関する海外の専門家との討論など研究のすべての局面で、複数の研究者が意見交換する必要が生じる。初年度は、とくに、問題意識の共有化や詳細な課題の整理のために、旅費を多めに計上していた。しかし、その後、利用可能な「京」コンピュータの計算資源量が期待よりも大幅に少ないことが判明したため、旅費を圧縮し、開発用 PC クラスタを導入することとした。サブ課題Dでは、協力機関も含めて約 36 名の研究者が参加しており、うち 17 名が代表機関である物性研、あるいは多くの会合が開かれる東京都心部に出張するには旅費・宿泊費が必要である。年度ごとに、協力研究者全員が参加する萌芽的課題全体の会合（仙台開催）が年 1 回とサブ課題D全体会合（東京開催）が年 1 回を開催する予定であり、このために、延べ約 50 回の遠距離旅費が発生する。さらに、テーマごとの小規模研究会をメンバーあたり 2 回程度開催するためにさ

らに約 30 回の旅費が必要である。外国旅費については、数件の海外出張および海外研究者招聘を想定している。このうち、約半数は、海外出張、残りが海外研究者の招聘で、前者は主に急速に進展するテンソルネットワーク法の最新動向の調査のため、後者は主に量子ダイナミクス計算手法に関する海外研究者の専門知識供与のためである。

(3) 複数の提案課題が連携することによる相乗効果を見込むものとして、萌芽的課題①の以下の 3 提案と統合して事業を推進すること

- (ア) 提案課題名：極限環境への挑戦：地球惑星深部物質の多階層構造と物性  
研究代表者：飯高敏晃（理化学研究所戒崎計算宇宙物理研究室・専任研究員）
- (イ) 提案課題名：相転移と流動の織りなす大変動：マルチスケール手法で解明するナノバブルから火山噴火までの混相流動  
研究代表者：川勝年洋（東北大学大学院理学研究科・教授）
- (ウ) 提案課題名：破壊とカタストロフィの極限への挑戦：材料、人工物から地球までのマルチスケールアプローチ  
研究代表者：久保百司（東北大学金属材料研究所・教授）

上記の (ア) ～ (ウ) とは、統合して事業を推進することで、研究成果の議論や相互利用を活性化させ、研究の相乗効果を図る。このことは、1. (6) に反映済みである。特に、課題 (ア)、(イ) とのサブ課題間連携を実施する。その具体的な内容については、1. (2) および 2-4. (2) [サブ課題間連携の実施内容] と 2-4. (3) [サブ課題間連携の目標] に反映済みである。

## (別紙1)実施機関一覧(H31.1版)

	実施機関	備考
	国立大学法人東北大学	代表機関 (課題責任者 久保 百司)
サブ課題A	国立大学法人東北大学金属材料研究所	分担機関 (サブ課題責任者 久保 百司)
	国立大学法人大阪大学大学院理学研究科	分担機関
	国立大学法人大阪大学大学院基礎工学研究科	分担機関
	国立大学法人金沢大学理工研究域	分担機関
	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター	分担機関
	国立大学法人東京大学大学院工学系研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院理学系研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学人工物工学研究センター	協力機関
	国立大学法人東北大学大学院工学研究科	協力機関
	国立大学法人佐賀大学理工学部	協力機関
	国立大学法人京都大学大学院工学研究科	協力機関
	国立大学法人信州大学工学部	協力機関
	国立大学法人横浜国立大学大学院工学研究院	協力機関
	国立大学法人九州大学大学院工学研究院	協力機関
	学校法人豊田工業大学工学部	協力機関
	国立研究開発法人物質・材料研究機構構造材料研究拠点	協力機関
	新日鐵住金株式会社技術開発本部	協力機関
	国立研究開発法人産業技術総合研究所関西センター	協力機関
	国立研究開発法人物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点	協力機関
	サブ課題B	国立大学法人東北大学大学院理学研究科
国立大学法人東京大学物性研究所		分担機関
国立研究開発法人海洋研究開発機構 地球情報基盤センター		協力機関
国立大学法人東北大学金属材料研究所		協力機関
国立大学法人東京大学地震研究所		協力機関
国立大学法人東京大学大学院工学系研究科		協力機関
国立大学法人東京大学生産技術研究所		協力機関
国立大学法人京都大学大学院工学研究科		協力機関
国立大学法人九州大学大学院工学研究院		分担機関
国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構		協力機関
日本ゼオン株式会社	協力機関	
サブ課題C	国立研究開発法人理化学研究所	分担機関 (サブ課題責任者 飯高 敏晃)
	国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点	分担機関
	国立研究開発法人理化学研究所 理論科学連携研究推進グループ	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所情報基盤センター	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所生命システム研究センター	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院工学系研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院理学系研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学物性研究所	協力機関
	国立大学法人東京大学地殻化学実験施設	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院情報理工学系研究科	協力機関
	国立大学法人東北大学大学院理学研究科	協力機関
	国立大学法人東北大学学際科学フロンティア研究所	協力機関
	国立大学法人東北大学金属材料研究所	協力機関
	国立大学法人大阪大学基礎工学研究科附属極限科学センター	協力機関
	国立大学法人東京工業大学物質理工学院	協力機関
	国立大学法人東京工業大学地球生命研究所	協力機関
	国立大学法人愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター	協力機関
	公立大学法人横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科	協力機関
	国立大学法人北陸先端科学技術大学院大学情報科学系	協力機関

サブ課題C	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 放射光科学研究センター	協力機関
	国立研究開発法人海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究分野	協力機関
	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所	協力機関
	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 J-PARC センター	協力機関
	University College London Department of Physics and Astronomy	協力機関
	SISSA- International School of Advanced Studies DEMOCRITOS Simulation Centre	協力機関
	Univeristy of Saskatchewan Department of Physics and Engineering Physics	協力機関
	Jilin University State Key Lab of Superhard Materials	協力機関
	Hanoi University of Science and Technology Computational Physics	協力機関
サブ課題D	国立大学法人東京大学物性研究所	分担機関 (サブ課題責任者 川島 直輝)
	国立大学法人筑波大学計算科学研究センター	分担機関
	国立大学法人横浜国立大学大学院工学研究院	分担機関
	国立大学法人筑波大学システム情報系	協力機関
	国立大学法人筑波大学情報工学研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院工学系研究科	協力機関
	国立大学法人東京大学大学院理学系研究科	協力機関
	国立大学法人東北大学金属材料研究所	協力機関
	国立大学法人東北大学大学院理学研究科	協力機関
	国立大学法人京都大学大学院情報学研究科	協力機関
	国立大学法人神戸大学大学院理学研究科	協力機関
	国立大学法人新潟大学理学部物理学科	協力機関
	国立大学法人北海道大学触媒化学研究センター	協力機関
	国立大学法人金沢大学数物科学系	協力機関
	国立大学法人横浜国立大学大学院工学研究院	協力機関
	国立大学法人岐阜大学工学部	協力機関
	国立大学法人名古屋大学大学院工学研究科	協力機関
	公立大学法人兵庫県立大学大学院物質理学研究科	協力機関
	公立大学法人兵庫県立大学大学院工学研究科	協力機関
	国立大学法人豊橋技術科学大学社会連携推進センター	協力機関
	国立大学法人東京工業大学理学院	協力機関
	学校法人東京理科大学理学部第1部応用物理学科	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所戒崎計算宇宙物理研究室	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構	協力機関
	国立研究開発法人理化学研究所基幹研究所	協力機関
	Slovak Academy of Science Institute of Physics	協力機関
	Slovak Academy of Science Research Center for Quantum Information	協力機関

平成30年度 成果報告書 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」資料  
4-3. 活動（研究会等）

## 目次

<資料1>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」第2回合同公開シンポジウム （平成30年7月3日）報告書	..... 1
<資料2>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 第4回運営委員会（平成30年7月3日）報告書	..... 4
<資料3>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」第2回合同公開ワークショップ （平成31年1月10日）報告書	..... 5
<資料4>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 第5回運営委員会（平成31年1月10日）報告書	..... 8
<資料5>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 第4回サブ課題代表者会議（平成30年10月16日）報告書	..... 9
<資料6>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 第5回サブ課題代表者会議（平成31年1月11日）報告書	..... 10
<資料7>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 第6回サブ課題代表者会議（平成31年3月2日）報告書	..... 11
<資料8>	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」 The 9th International Conference Multiscale Materials Modeling Multiscale Simulations of Catastrophic Phenomena:Toward Bridging between Materials	

Fracture and Earthquake シンポジウム (平成 30 年 11 月 1 日～平成 30 年 11 月 2 日) 報告書	12
<資料 9 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
サブ課題A会議 (平成 31 年 2 月 9 日) 報告書	16
<資料 10 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
サブ課題B内連携 連絡会議 (平成 30 年 5 月 21 日) 報告書	17
<資料 11 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
マルチスケールモデリング講演会 (平成 30 年 9 月 10 日) 報告書	18
<資料 12 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
第6回サブ課題B全体会議 (平成 30 年 11 月 10 日) 報告書	19
<資料 13 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
第7回サブ課題B全体会議 (平成 31 年 2 月 22 日) 報告書	20
<資料 14 >	
ポスト「京」重点課題 (7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ	
課題 7 F「次世代機能性化学品」ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチス	
ケール問題を通した極限の探求」サブ課題 A「破壊とカタストロフィ」、サブ課題 B「相転移と	
流動」合同研究会 (平成 31 年 3 月 28 日) 報告書	21
<資料 15 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
サブ課題B連絡会議 (平成 31 年 3 月 30 日) 報告書	23
<資料 16 >	
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」	
第5回「地球惑星深部物質の構造と物性」(平成 30 年 11 月 25 日) 報告書	24

<資料17>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 第6回極限物質科学研究会（平成31年1月18日）報告書	25
<資料18>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 第7回極限物質科学研究会（平成31年2月4日）報告書	27
<資料19>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 第1回代表者会議（平成30年10月19日）報告書	29
<資料20>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 サブ課題Dワークショップ（平成30年10月19日）報告書	30
<資料21>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA2018-2019)（平成30年12月3日～平成30年12月6日）報告書	32
<資料22>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 グループリーダー会議（平成31年2月22日）報告書	35
<資料23>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 第4回サブ課題A－B間連携研究会（平成30年6月20日）報告書	36
<資料24>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 サブ課題AB連携連絡会議（平成30年11月9日）報告書	37
<資料25>	ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」 第5回サブ課題A－B間連携研究会（平成30年12月9日）報告書	

	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	38
<資料26>		
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」		
サブ課題AB連携連絡会議（平成30年12月14日）報告書	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	39
<資料27>		
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」		
サブ課題B－D連携研究会（平成30年5月2日）報告書	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	40
<資料28>		
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」		
第1回サブ課題C－D間連携研究会（平成30年10月12日）報告書	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	41

<資料1>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」  
第2回合同公開シンポジウム 報告書

(1) 日時 平成30年7月3日(火) 10:00~18:00

(2) 場所 東北大学金属材料研究所講堂

(3) 開催主体

共催 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」代表機関 東北大学金属材料研究所  
ポスト「京」萌芽的課題「極限マテリアル」代表機関 東京工業大学フロンティア材料研究所

協賛 ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」  
ポスト「京」重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」  
計算物質科学人材育成コンソーシアム

(4) 概要 ポスト「京」萌芽的課題の「基礎科学の挑戦」と「極限マテリアル」における研究進捗について、東北大学金属材料研究所にて公開シンポジウムを開催した。「基礎科学の挑戦」からは各サブ課題の進捗と体制、サブ課題内連携研究、サブ課題間連携研究を含む、計18の発表が実施された。「極限マテリアル」からは、計4つの発表が実施された。本シンポジウムは公開行事として実施し、プロジェクトの参画者以外からも多数の参加を頂き、参加者は企業研究者24名を含む94名であった。また、研究発表に対する産業界からの期待を、3人の民間企業の技術者幹部からコメント頂き、3人の本課題アドバイザーから講評を頂いた。

(5) プログラム

10:00-10:10 挨拶

東北大学金属材料研究所 所長 高梨弘毅

文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室 室長 坂下鈴鹿

10:10-10:15 「基礎科学の挑戦」課題責任者、サブ課題A代表 東北大学 久保百司

「サブ課題A「破壊とカタストロフィ」の進捗と体制」

10:15-10:30 サブ課題A 東北大学 大谷優介

「岩石のミクロな摩擦現象と地震メカニズムに関する連携研究」

10:30-10:45 サブ課題A 東京大学 波多野恭弘

「変形と破壊を支配する摩擦法則の探求：材料科学と地震学の連携研究」

- 10:45-11:00 サブ課題A 金沢大学 新山友暁  
「岩石破壊とアモルファス塑性をつなぐメゾスケールモデルの統計性：地震学と材料科学の連携」
- 11:00-11:05 サブ課題B代表 東北大学 川勝年洋  
「サブ課題B「相転移と流動」の進捗と体制」
- 11:05-11:20 サブ課題B 九州大学 津田伸一  
「キャビテーションのマルチスケール解析」
- 11:20-11:35 サブ課題B 東京大学 浅野優太  
「複雑流体中のカルマン渦」
- 11:35-11:40 サブ課題C代表 理化学研究所 飯高敏晃  
「サブ課題C「地球惑星深部物質の構造と物性」の進捗と体制」
- 11:40-11:55 サブ課題C 量子科学技術研究開発機構 池田隆司  
「高圧氷の第一原理経路積分セントロイド分子動力学シミュレーション」
- 11:55-12:10 サブ課題C 愛媛大学 土屋 旬  
「地球深部における揮発性元素循環モデルの構築に関する連携研究」
- 12:10-12:25 サブ課題C 物質・材料研究機構 宮崎 剛  
「オーダーN法第一原理計算プログラム CONQUEST による大規模定温定圧分子動力学に関する連携研究」
- 12:25-14:00 昼休み
- 14:00-14:05 サブ課題D代表 東京大学 川島直輝  
「サブ課題D「量子力学の基礎と情報」進捗と体制」
- 14:05-14:20 サブ課題D 東京大学 川島直輝  
「テンソルネットワーク法と関連要素技術の開発」
- 14:20-14:35 サブ課題D 理化学研究所 中村宜文  
「テンソルネットワーク法の素粒子物理学への応用と数理的・計算機科学的な高度化開発」
- 14:35-14:50 サブ課題D 横浜国立大学 倉見谷航洋  
「量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーのハミルトニアンラーニング」
- 14:50-15:05 サブ課題AB連携 東北大学 川勝年洋  
「マルチスケールシミュレーションを用いたアモルファス固体の破壊シミュレーション」
- 15:05-15:20 サブ課題BD連携 東京大学 玉井敬一  
「機械学習の手法による分子動力学法と連続体シミュレーションの融合」

- 15:20-15:35 サブ課題CD連携 理化学研究所 Le The Anh  
「Electronic and magnetic state of  $\epsilon$ - $\text{FeO}_2$ 」
- 15:35-15:55 休憩
- 15:55-16:00 「極限マテリアル」課題責任者 東京工業大学 松下雄一郎  
「「極限マテリアル」の進捗と体制」
- 16:00-16:15 サブ課題A代表 東京工業大学 松下雄一郎  
「結合クラスター法による一電子スペクトル計算：孤立原子から一次元周期物質への適用」
- 16:15-16:30 サブ課題B代表 東京大学 明石遼介  
「ポテンシャル極小から最適脱出経路をたどる非経験的方法」
- 16:30-16:45 サブ課題C代表 東京大学 篠原 康  
「固体高次高調波発生の原子論的シミュレーション」
- 16:45-17:00 産業界からの期待  
トヨタ自動車 福間隆雄 / パナソニック 鈴木正明 / 三菱重工業 野島 繁
- 17:00-17:15 アドバイザーからの講評  
東京大学 常行真司 / 東京大学 今田正俊 / 東北大学 毛利哲夫
- 17:15-18:00 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター スーパーコンピュータ  
“MASAMUNE-IMR” 見学会

(6) 参加者

94名

内訳：	東北大学	27名	理化学研究所	4名
	東京大学	17名	物質材料研究機構	2名
	九州大学	2名	海洋研究開発機構	2名
	その他大学	9名	日本原子力研究開発機構	2名
			量子科学技術研究開発機構	1名
			行政機関	3名
			民間企業	24名
			一般参加	1名

<資料2>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第4回運営委員会 報告書

- (1) 日時 平成30年7月3日(火) 13:10～13:45
- (2) 場所 東北大学金属材料所4号館1階セミナー室
  
- (3) 概要 平成29年度の成果報告書、および業務計画書を基に、体制や連携、アプリケーションの開発状況について報告した。また今後の会議・報告の予定について報告した。
  
- (4) 議題
  - 1) 新メンバーの報告
  - 2) 平成29年度成果の報告
  - 3) 実施計画の報告
  - 4) 次回の運営委員会と全体会議予定
  - 5) その他
  
- (5) 参加者
  - 11名
  - 久保百司(東北大)、川勝年洋(東北大)、飯高敏晃(理研)、川島直輝(東大)
  - アドバイザー: 今田正俊(東大)、常行真司(東大)、毛利哲夫(東北大)
  - オブザーバー: 坂下鈴鹿(文科省)、松岡浩司(文科省)、野村敦子(文科省)、高橋昭(東北大)

<資料3>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」  
第2回合同公開ワークショップ 報告書

(1) 日時 平成31年1月10日(木) 10:00~20:20

(2) 場所 ステーションコンファレンス東京 602BCD会議室(サピアタワー6階)

(3) 開催主体

共催 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」代表機関 東北大学金属材料研究所  
ポスト「京」萌芽的課題「極限マテリアル」代表機関 東京工業大学フロンティア材料研究所

協賛 ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」  
ポスト「京」重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」  
計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)

(4) 概要 ポスト「京」の萌芽的課題の平成30年度までの研究進捗について、各分担機関の若手研究者から研究発表を実施し、積極的な質疑応答、討議を実施した。「基礎科学の挑戦」からは各サブ課題の進捗と体制、サブ課題内連携研究、サブ課題間連携研究を含む、計13の発表が実施された。「極限マテリアル」からは、計2つの発表が実施された。本ワークショップは公開行事とし東京で実施し、プロジェクトの参画者以外からも多数の参加を頂き、参加者は企業研究者・一般研究者12名を含む計69名であった。最後に講評を本課題アドバイザーの3人から頂いた。

(5) プログラム

10:00-10:10 挨拶

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」課題責任者 東北大学 久保百司

ポスト「京」萌芽的課題「極限マテリアル」課題責任者 東京工業大学 松下雄一郎

文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室

[基礎科学の挑戦]

10:10-10:15 「基礎科学の挑戦」課題責任者 東北大学 久保百司

「萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の全体概要と体制」

10:15-10:20 サブ課題D代表 東京大学 川島直輝

「サブ課題D「量子力学の基礎と情報」の全体概要と体制」

10:20-10:40 サブ課題D 東京大学 Hyun-Yong Lee

- 「Kitaev spin liquid in the tensor network representation」
- 11:00-11:20 サブ課題 D 筑波大学 山下 巧  
「高次テンソル繰り込み群による並列計算を用いた分配関数の計算」
- 11:20-11:40 サブ課題 D 東京大学 白井達彦  
「光双安定現象の微視的な共振器モデルによる記述」
- 11:40-12:00 サブ課題 D 東京大学 玉井敬一  
(サブ課題 BD 連携)「機械学習を用いた、分子動力学と連続体シミュレーションの融合手法開発」
- 12:00-13:30 昼休み
- 13:30-13:35 サブ課題 C 代表 理化学研究所 飯高敏晃  
「サブ課題 C「地球惑星深部物質の構造と物性」の全体概要と体制」
- 13:35-13:55 サブ課題 C 理化学研究所 河津 励  
「圧力による水素結合相転移とそれに伴う水素同位体分配の評価」
- 13:55-14:15 サブ課題 C 理化学研究所 Le The Anh  
(サブ課題 CD 連携)「GGA (PBE) + U and Meta GGA (SCAN) + van der Waals functionals (rvv10) calculations for solid oxygen: epsilon and zeta phase」
- 14:15-14:20 サブ課題 B 代表 東北大学 川勝年洋  
「サブ課題 B「相転移と流動」の全体概要と体制」
- 14:20-14:40 サブ課題 B 東京大学 浅野優太  
「カルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション」
- 14:40-15:00 サブ課題 B 九州大学 國嶋雄一  
「キャビテーション初生のマルチスケール性を考慮したモデリングおよび CFD 解析」
- 15:00-15:20 サブ課題 B 東北大学 森井洋平  
(サブ課題 AB 連携)「弾塑性体のマルチスケールシミュレーション」
- 15:20-15:40 休憩
- 15:40-15:45 サブ課題 A 代表 東北大学 久保百司  
「サブ課題 A「破壊とカタストロフィ」の全体概要と体制」
- 15:45-16:05 サブ課題 A 東北大学 宮崎成正  
「1 億原子系大規模金属モデルにおける応力腐食割れの分子動力学シミュレーション」
- 16:05-16:25 サブ課題 A 東京大学 樋口祐次  
「粗視化分子動力学法を用いた 1 億粒子シミュレーションによる結晶性高分子の伸長プロセス」

16:25-16:45 サブ課題 A 大阪大学 石井明男  
「地震と材料破壊をつなぐすべり破壊モデルの構築 ～金属ガラスのすべり弱化の物理～」

16:45-17:05 サブ課題 A 東京大学 齋藤拓也  
「乱雑な条件下で成長する地震破壊核の応力摂動応答性」

[極限マテリアル]

17:05-17:10 「極限マテリアル」課題責任者 東京工業大学 松下雄一郎  
「萌芽的課題「極限マテリアル」の全体概要と体制」

17:10-17:30 サブ課題 A 東京大学 小杉太一  
「CCSD グリーン関数法の開発と応用の最近の進展」

17:30-17:50 サブ課題 B 東京大学 明石遼介  
「反応座標を用いない反応経路探索: クラスタ・分子系への応用」

17:50-18:05 アドバイザーからの講評  
東京大学 常行真司 / 東京大学 今田正俊 / 東北大学 毛利哲夫

18:20-20:20 情報交換会  
会場/ステーションコンファレンス東京 605AB 会議室

(6) 参加者

69名

内訳:	東北大学	14名	理化学研究所	3名
	東京大学	17名	物質・材料研究機構	3名
	大阪大学	3名	海洋研究開発機構	1名
	金沢大学	2名	量子科学技術研究開発機構	1名
	筑波大学	2名	文部科学省	2名
	九州大学	2名	民間企業	10名
	東京工業大学	2名	一般参加	2名
	兵庫県立大学	2名		
	東京理科大学	1名		

<資料4>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第5回運営委員会 報告書

- (1) 日時 平成31年1月10日(木) 12:00～13:30
- (2) 場所 ステーションコンファレンス東京6階 601会議室
  
- (3) 概要 理研シミュレータで性能評価をするアプリの候補、平成31年度の借り置き所要経費、平成30年度～平成31年度の会議の実施状況、実施予定についてアドバイザーに報告をした。また、平成31年1月28日予定の年度末ヒアリングの資料について説明を行った。
  
- (4) 議題
  - 1) 理研シミュレータで性能評価をするアプリの候補
  - 2) 平成31年度の仮置き所要経費
  - 3) 平成30年度～平成31年度の会議の実施状況、実施予定
  - 4) 平成30年度末ヒアリング資料(未完成)
  
- (5) 参加者
  - 10名
  - 久保百司(東北大)、川勝年洋(東北大)、飯高敏晃(理研)、川島直輝(東大)
  - アドバイザー:今田正俊(東大)、常行真司(東大)、毛利哲夫(東北大)
  - オブザーバー:根津純也(文科省)、松岡浩司(文科省)、高橋昭(東北大)

<資料5>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第4回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 平成30年10月16日(火) 16:00~18:00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室C(サピアタワー10階)
- (3) 概要 理研作成の資料に基づきポスト「京」関連の推奨語句について出席者間で共有した。また、メーリングリストの運用について検討し、本課題に関する通知は配信停止しないが他機関からのイベント等の案内は停止希望者には配信停止することとした。平成31年1月10日開催ワークショップのプログラムについて内容を確認した。協力機関のシミュレータ NDA 参加について検討し、学生の参加についての対応を確認した。理研シミュレータの活用について検討し、2つを選定するべく進めることとした。ハッカソン参加について検討し、希望者有無を確認し申し込むこととした。今後の予定について確認した。
- (4) 議題
  - 1) ポスト「京」関連の推奨語句について
  - 2) メーリングリストの運用について
  - 3) 1月10日開催のワークショップについて
  - 4) シミュレータ NDA の対象機関拡大について
  - 5) 理研シミュレータの活用と HPCI で公開するソフトについて
  - 6) 11月5日~7日 Arm クラスタ & SVE ハッカソン参加について
  - 7) 今後の予定について
  - 8) その他
- (5) 参加者  
5名  
久保百司(東北大)、川勝年洋(東北大)、飯高敏晃(理研)、川島直輝(東大)  
オブザーバー参加: 高橋昭(東北大)

<資料6>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」

第5回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 平成31年1月11日(金) 15:00~17:00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室C(サピアタワー10階)
- (3) 概要 理研シミュレータを使うアプリケーションの選定につき出席者間で検討を行い、候補を3つに絞り、優先順を検討した。また、今後の研究計画について検討を行った。
- (4) 議題
  - 1) 理研シミュレータを使うアプリケーションの選定
  - 2) 今後の研究計画の打ち合わせ
  - 3) その他
- (5) 参加者  
5名  
久保百司(東北大)、川勝年洋(東北大)、飯高敏晃(理研)、川島直輝(東大)  
オブザーバー参加:高橋昭(東北大)

<資料7>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

第6回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 平成31年3月2日(土) 13:00~17:00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室B(サピアタワー10階)
- (3) 概要 最終年度となる平成31年度の研究計画について議論を行うとともに、本萌芽的課題で統一的に取り組む新しい学問分野体系「インフォメーション・ディステーション」の展開について議論を行った。さらに、本萌芽的課題で開発したアプリケーションの、ポスト「京」稼働後の早期成果創出について、議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) 平成31年度の研究計画について
  - 2) 「インフォメーション・ディステーション」の展開について
  - 3) 本萌芽的課題で開発したアプリケーションのポスト「京」稼働後の早期成果創出について
- (5) 参加者  
5名  
久保百司(東北大)、川勝年洋(東北大)、飯高敏晃(理研)、川島直輝(東大)  
オブザーバー参加: 高橋昭(東北大)

<資料8>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」

The 9th International Conference Multiscale Materials Modeling

Multiscale Simulations of Catastrophic Phenomena:

Toward Bridging between Materials Fracture and Earthquake シンポジウム 報告書

(1) 日時 平成30年11月1日(木)～平成30年11月2日(金)

(2) 場所 大阪府立国際会議場

(3) 開催主体

主催 Multiscale Materials Modeling 国際会議実行委員会

協賛 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」サブ課題A「破壊とカタストロフィ」  
ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題E「高信頼性構造材料」

(4) 概要 原子レベルおよびミクロスケールでの材料破壊のメカニズムと原理は、地震、雪崩、火山噴火、大型建造物の破壊などの現実世界での多様な巨大カタストロフィ現象と共通の特徴および特性を有する可能性がある。しかし、材料破壊と地震の基礎科学は大きく異なっている。これまで、材料破壊と地震の間の正確な関係はあまり議論されてこなかった。最近のマルチスケールシミュレーション技術の進歩は、材料破壊と地震の間のメカニズムと原理の一般性、共通性、非類似性などを明らかにできる可能性がある。そこで、材料破壊と地震の一般性、共通性、非類似性などを議論するための理論的および計算科学的研究に焦点を当てたシンポジウムを開催した。特に、本シンポジウムでは、原子レベルからマクロスケールまでの材料破壊ならびに地震、雪崩、滑り台、火山噴火、大型建造物の破壊などの多様なカタストロフィックな自然災害に関するマルチスケールシミュレーションアプローチに焦点をあてる。

(5) プログラム

November 1, Thursday

11:15-11:30 Supercomputer post-K project “Challenge of basic science exploring extremes through multiphysics and multi-scale simulations”  
Momoji Kubo, Tohoku Univ., Japan

11:30-12:00 Invited

Universal avalanche statistics across 16 decades in length: from nanocrystals (and neurons) to earthquakes and stars?

Karin Dahmen, University of Illinois at Urbana Champaign, United States of America

12:00-12:15 Predicting avalanches and failure: wood and paper

Mikko Alava, Aalto University, Finland

12:15-12:30 System-spanning shear avalanches induced by thermal structural relaxation in metallic glasses

Tomoaki Niiyama, College of Science and Engineering, Kanazawa Univ., Japan

12:30-14:00 Lunch

14:00-14:30 Invited

Predictability of catastrophic failure in porous media

Ian Main, University of Edinburgh, UK

14:30-14:45 Deciphering the dynamics of precursors to failure in quasi-brittle solids: an inspiration for understanding the statistics of earthquakes ?

Laurent Ponson, Institut Jean le Rond d'Alembert, CNRS - Sorbonne University, Paris, France

14:45-15:00 Avalanche precursors and fracture strength in the limit of high disorder

Ferenc Kun, Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, Hungary

15:00-15:15 Jump statistics of epicenters in thermally induced cracking of fiber bundles

Naoki Yoshioka, RIKEN Center for Computational Science, Japan

15:15-15:30 Time dependent fracture under unloading in a fiber bundle model

Reka Korei, Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, Hungary

15:30-16:00 Coffee Break

16:00-16:30 Invited

Creep of strongly disordered materials: plasticity, damage and approach to failure

Michael Zaiser, Inst., of Materials Simulation, Dept of Materials Science, FAU University of Erlangen-Nuremberg, Germany

16:30-16:45 Creep rupture and Omori-Utsu law: fiber bundle model approach

Takahiro Hatano, University of Tokyo, Japan

16:45-17:00 Temperature dependent shear friction in metallic glass

Akio Ishii, Osaka Univ., Japan

17:00-17:15 Mechanism of controlled crack formation induced by memory effect of clay paste

Akio Nakahara, Nihon Univ., Japan

17:15-17:30 Effects of shockwave-induced nanobubble collapse on precision polishing: molecular dynamics study

Yoshimasa Aoyama, Dept. of Materials Science, Tohoku Univ., Japan

November 2, Friday

09:45-10:15 Invited

Disclination dipole model of kink deformation in layered solid Akihiro Nakatani, Dept. of Adaptive

Machine Systems, Osaka Univ., Japan

10:15-10:30 Large-scale coarse-grained molecular dynamics simulations on fracture processes of lamellar structure in crystalline polymers

Yuji Higuchi, The University of Tokyo, Japan

10:30-10:45 Grain boundary sliding within the entropy production rate theory

Tetsuo Mohri, IMR, Tohoku University, Japan

10:45-11:00 Molecular dynamics simulation on intergranular cracking mechanism of iron material in high temperature pressurized water environment

Qian Chen, Institute for Materials Research, Tohoku University, Japan

11:00-11:15 Break

11:15-11:30 Effects of a bulk-region size in the first-principles tensile test of a grain boundary

Masanori Kohyama, AIST, Japan

11:30-11:45 Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of an alloy steel

Masatake Yamaguchi, Japan Atomic Energy Agency, Japan

11:45-12:00 First-principles local energy analysis of grain boundary segregation of elements on bcc Fe

Kazuma Ito, Osaka University, Japan

12:00-12:15 Fast and scalable prediction of local energy at grain boundaries: machine-learning based modeling of first-principles calculations

Tomoyuki Tamura, Nagoya Institute of Technology, Japan

(6) 参加者

22名 (その他聴講者多数)

Momiji Kubo (Tohoku University, Japan)

Karin Dahmen (University of Illinois at Urbana Champaign, United States of America)

Mikko Alava (Aalto University, Finland)

Tomoaki Niiyama (College of Science and Engineering, Kanazawa University, Japan)

Ian Main (University of Edinburgh, UK)

Laurent Ponson (Institut Jean le Rond d'Alembert, CNRS - Sorbonne University, Paris, France)

Ferenc Kun (Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, Hungary)

Naoki Yoshioka (RIKEN Center for Computational Science, Japan)

Reka Korei (Department of Theoretical Physics, University of Debrecen, Hungary)

Michael Zaiser (Institute, of Materials Simulation, Department of Materials Science, FAU University of Erlangen-Nuremberg, Germany)

Takahiro Hatano (University of Tokyo, Japan)

Akio Ishii (Osaka University, Japan)

Akio Nakahara (Nihon University, Japan)

Yoshimasa Aoyama (Department of Materials Science, Tohoku University, Japan)

Machine Systems (Osaka University, Japan)

Yuji Higuchi (The University of Tokyo, Japan)

Tetsuo Mohri (IMR, Tohoku University, Japan)

Qian Chen (Institute for Materials Research, Tohoku University, Japan)

Masanori Kohyama (AIST, Japan)

Masatake Yamaguchi (Japan Atomic Energy Agency, Japan)

Kazuma Ito (Osaka University, Japan)

Tomoyuki Tamura (Nagoya Institute of Technology, Japan)

<資料9>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
サブ課題A会議 報告書

- (1) 日時 平成31年2月9日(土) 15:00～17:00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室C(サピアタワー10階)
- (3) 概要 平成30年度の今後の研究計画について議論とともに、最終年度となる平成31年度の研究計画について議論を行った。さらに、本萌芽的課題サブ課題Aで開発したアプリケーションのポスト「京」稼働後の早期成果創出に関する施策について議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) 平成30年度の今後の研究計画の議論
  - 2) 最終年度となる平成31年度の研究計画の議論
  - 3) 本萌芽的課題サブ課題Aで開発したアプリケーションのポスト「京」稼働後の早期成果創出に関する施策の議論
- (5) 参加者
  - 3名
  - 久保百司(東北大)、尾方成信(大阪大学)、下川智嗣(金沢大学)

<資料10>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」  
サブ課題B内連携 連絡会議 報告書

- (1) 日時 平成30年5月21日(月) 13:00~15:00
- (2) 場所 東京大学物性研究所 5階理論セミナー室 (A514a)
- (3) 概要 キャビテーション生成に関するサブ課題B内での連携についての研究連絡
- (4) 議題
  - 1) 「相転移と流動」というテーマに対し、大規模MDでできること(渡辺)
  - 2) 大規模MDによる円柱を過ぎるキャビテーション流の解析(浅野)
  - 3) キャビテーションの初生モデリング(國嶋)
  - 4) 今後の方針についての討論(全員)
- (5) 参加者  
5名  
野口博司(東京大)、渡辺宙志(東京大)、浅野優太(東京大)、  
川勝年洋(東北大)、國嶋雄一(九州大)

<資料11>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
マルチスケールモデリング講演会 報告書

(1) 日時 平成30年9月10日(月) 15:00~18:00

(2) 場所 東北大学大学院理学研究科 合同B棟721セミナー室

(3) 概要 Prof. Dr. Florian Mueller-Plathe  
(Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie,  
Technische Universität Darmstadt, Germany)  
による講演会と技術討論

(4) 議題

1) 粒子-連続場ハイブリッド法に関するセミナー

(講演題目 Polymer interphases: A case for multiscale modelling)

2) マルチスケールモデリングに関する技術討論

(5) 参加者

13名

講師:

Florian Mueller-Plathe

東北大学理学研究科:

川勝年洋、村島隆浩、佐久間由香、Petch Khunpetch、  
山下啓介、守屋隼人、宮本拓実、

東北大学流体研:

菊川豪太、松原裕樹、Donatas Surblys、川越吉晃

東北大学工学研究科(化学バイオ系): 庄司衛太

<資料12>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

第6回サブ課題B全体会議 報告書

- (1) 日時 平成30年11月10日(土) 10:00～18:00
- (2) 場所 東京駅サピアタワー10階 東北大学東京分室
- (3) 概要 サブ課題Bの研究の進捗報告と、今後の連携体制についての議論

(4) 議題

- 1) これまでの活動報告
- 2) プラットフォームとマイクロシミュレータ開発の進捗状況
- 3) サブ課題間連携について (B-A連携, B-D連携)
- 4) 今後の検証研究について
- 5) 次回のサブ課題会議について
- 6) その他

(5) 参加者

17名

村島隆浩 (東北大理)、森井洋平 (東北大理)、川勝年洋 (東北大理)、  
野口博司 (東大物性研)、渡辺宙志 (東大物性研)、浅野優太 (東大物性研)、  
樋口祐次 (東大物性研)、川島直輝 (東大物性研)、玉井敬一 (東大物性研)、  
小屋口剛博 (東大地震研)、今田正俊 (東大工)、飯高敏晃 (理研)、  
本田隆 (日本ゼオン)、大西領 (JAMSTEC)、谷口貴志 (京大工)、  
津田伸一 (九大工)、國嶋雄一 (九大工)

<資料13>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第7回サブ課題B全体会議 報告書

- (1) 日時 平成31年2月22日(金) 10:00～18:00
- (2) 場所 理化学研究所 計算科学研究センター 会議室
- (3) 概要 サブ課題Bの研究の進捗報告および今後の活動について
- (4) 議題
  - 1) これまでの活動報告
  - 2) ポスト「京」の萌芽的課題終了後の将来展望についての議論
- (5) 参加者  
9名  
村島隆浩(東北大理)、森井洋平(東北大理)、川勝年洋(東北大理)、  
浅野優太(東大物性研)、玉井敬一(東大物性研)、大西領(JAMSTEC)、  
村瀬洋介(理研)、津田伸一(九大工)、國嶋雄一(九大工)

<資料14>

ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

サブ課題7F「次世代機能性化学品」

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

サブ課題A「破壊とカタストロフィ」、サブ課題B「相転移と流動」

合同研究会 報告書

- (1) 日時 平成31年3月28日(木) 9:55~17:45
- (2) 場所 大阪大学基礎工学研究科 G棟 G508室
- (3) 概要 「原子・分子レベルから連続体レベルに至るマルチスケールの理論構築と実際運用」に関する研究会
- (4) 議題
- |             |  |                   |
|-------------|--|-------------------|
| 9:55~10:00  | 開催挨拶   | 松林 伸幸 (阪大)        |
| 10:00~11:00 | 複雑流体のマルチスケールシミュレーション   | 森井 洋平・川勝 年洋 (東北大) |
| 11:00~11:45 | 電子スケールから原子スケールまでの有機無機界面の動力学シミュレーション  | 尾形 修司 (名工大)       |
| 11:45~12:25 | 第一原理分子動力学法による有機分子-金属表面の反応シミュレーション: $\text{Fe}_3\text{O}_4$ (111)表面上の TCP 分子の分解反応 | 上村 直樹 (名工大)       |
| 12:25~13:30 | 昼食   |                   |
| 13:30~14:15 | 金属表面における応力腐食割れプロセスの超大規模反応分子動力学シミュレーション   | 宮崎 成正 (東北大)       |
| 14:15~15:00 | せん断粉体のレオロジー  | 大槻 道夫 (阪大)        |
| 15:00~15:45 | 適切な自由エネルギー地形を与える反応座標の探索: 遷移経路サンプリングと機械学習による解決方法                                  | 金 鋼 (阪大)          |
| 15:45~16:15 | 休憩   |                   |

16:15～17:00 界面活性剤や高分子の添加による乱流の変調現象

後藤 晋 (阪大)

17:00～17:45 分子集合系における物質分配機能の溶媒和理論による全原子解析

松林 伸幸 (阪大)

(5) 参加者

9名 (他阪大の院生多数)

松林伸幸 (阪大基礎工)、大槻道夫 (阪大基礎工)、金鋼 (阪大基礎工)、  
後藤晋 (阪大基礎工)、尾形修司 (名工大工)、上村直樹 (名工大工)、森井洋平 (東北大理)、  
川勝年洋 (東北大理)、宮崎成正 (東北大金研)

<資料15>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」  
サブ課題B連絡会議 報告書

- (1) 日時 平成31年3月30日(土) 15:00~20:00
- (2) 場所 研究発表会 JR博多シティ会議室 A・B会議室(福岡県福岡市)  
情報交換会 プレジデントホテル博多(福岡県福岡市)
- (3) 概要 サブ課題Bの研究の進捗報告および平成32年度以降の活動について
- (4) 議題
- 1) 研究発表会  
津田・國嶋 機械内部流動におけるマルチスケールシミュレーション手法  
についての提案  
川勝 MSSPを用いたマルチスケールシミュレーションの現状
  - 2) 情報交換会
    - ・マルチスケールシミュレーションの実現方法に関する討論これまでの活動報告
    - ・ポスト「京」の萌芽的課題終了後の将来展望についての議論
- (5) 参加者  
3名  
津田伸一(九大工)、國嶋雄一(九大工)、川勝年洋(東北大理)

<資料16>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第5回「地球惑星深部物質の構造と物性」 報告書

- (1) 日時 平成31年11月25日(日) 16:00~18:00
- (2) 場所 岡山貸会議室  
<https://ki-kashikaigishitsu.com/room/okayama-ekimae-rental-conference-room-rental-space-hire-tenant/>
- (3) 概要 京プロジェクトの運営について、平成30年度前期の研究成果と財政状況を報告しそれを踏まえて平成30年度後期および平成31年度の計算資源の割り当てを議論した。さらにプロジェクトが主導したイベントについての報告を行った。
- (4) 議題
- 1) 平成30年度の研究成果、財政状況等ご報告(飯高)  
サブ課題内連携、サブ課題間連携、外部連携のまとめ
  - 2) 参加メンバーによる研究紹介(10分程度~)  
これまでの成果、最終年の計画、計算資源利用計画、出張計画など
  - 3) 平成30年度後期および平成31年度の計算資源の割当(全員討議)  
平成30年度後期:「京」計算資源の割当  
平成31年度:HPCI計算資源(Oakforest-PACS)の割当  
申請値:500,000(ノード時間)=11,890,983(「京」相当ノード時間)
  - 4) 平成31年度旅費(全員討議)
  - 5) サブ課題C推薦アプリの選定(全員討議)  
各サブ課題から代表アプリ候補を1件推薦する。  
サブ課題CからはCONQUESTを推薦する。
  - 6) ポスト「京」の使い方(Le The Anh)  
11月5日~7日(神戸)のHackathonの報告  
コンパイル方法、エミュレータの利用方法、チューニング方法
- (5) 参加者  
6名  
池田隆司(量研)、石河孝洋(物材機構)、梅本幸一郎(ELSI)、Le The Anh(RIKEN)、河津励(RIKEN)、飯高敏晃(RIKEN)

<資料17>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

第6回極限物質科学研究会

The 6th Workshop for Extreme Materials Science

“Water and Ice”

報告書

- (1) 日時 平成31年1月18日(金) 13:30~17:10
- (2) 場所 Small Meeting Room 1(west), Welfare and Conference Bldg. (C61), Riken, Wako.  
理研和光 統合支援施設小会議室1(西) 建物番号C61
- (3) 概要 Water is one of the most important components to discuss the evaluation of the Earth and planetary systems. The water can be gas (vapor), liquid, and solid (ice) on the ground surface of current Earth, and the eighteen ice phases are reported under various pressure-temperatures. In this meeting four distinguished researchers will talk about their recent experimental and theoretical study on water and ice.
- (4) 議題
- 1) 13:30-13:40 Toshiaki IITAKA: Opening
  - 2) 13:40-14:40 Chang Qing SUN (孙长庆) (Nanyang Tech.) 【INVITED】  
O:H-O bond transition by aqueous charge injection  
[http://research.ntu.edu.sg/expertise/academicprofile/Pages/StaffProfile.aspx?ST\\_EMAILID=ECQSUN](http://research.ntu.edu.sg/expertise/academicprofile/Pages/StaffProfile.aspx?ST_EMAILID=ECQSUN)  
<https://scholar.google.com.hk/citations?user=M6d5ZQsAAAAJ&hl=en>
  - 3) 14:50-15:30 Ryo YAMANE (山根峻) (Univ. of Tokyo) 【INVITED】  
High-pressure dielectric measurements of ice VII using a newly developed high-pressure cell  
<http://www.eqchem.s.u-tokyo.ac.jp/laboratories/kagi/Homepage/member.html>  
<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4980154>
  - 4) 15:50-16:30 Hiroshi FUKUI (福井宏之) (Univ. of Hyogo) 【INVITED】  
X-ray Induced molecular dissociation of H<sub>2</sub>O in dense ice  
[https://www.researchgate.net/profile/Hiroshi\\_Fukui2](https://www.researchgate.net/profile/Hiroshi_Fukui2)  
<https://www.nature.com/articles/srep26641>
  - 5) 16:30-17:10 Tsutomu KAWATSU (河津励) (RIKEN) 【INVITED】  
A computational study of the protonic quantum fluctuations on the high-pressured

hydrogen bond of the ice and hydrous alumina

<http://orcid.org/0000-0002-8926-2917>

[https://www.researchgate.net/scientific-contributions/2082167612\\_Tsutomu\\_Kawatsu](https://www.researchgate.net/scientific-contributions/2082167612_Tsutomu_Kawatsu)

(5) 参加者

6名

Chang Qing SUN (孙长庆、南洋理工大)、山根峻 (東大地殻化学)、福井宏之 (兵庫県立大)、  
河津励 (理研)、飯高敏晃 (理研)、Le The Anh (理研)

<資料18>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

第7回極限物質科学研究会

The 7th Workshop for Extreme Materials Science

“Silicate Melts and Glasses”

報告書

- (1) 日時 平成31年2月4日(月) 13:30~17:10
- (2) 場所 Small Meeting Room 1(west), Welfare and Conference Bldg. (C61), Riken, Wako.  
理研和光 統合支援施設2階小会議室1(西) 建物番号C61  
[http://www.riken.jp/en/access/wako-map/#campus\\_map](http://www.riken.jp/en/access/wako-map/#campus_map)
- (3) 概要 Silicate melt and glass are one of the most important materials for understanding the formation and dynamics of the Earth and earth-like planets and also for industrial applications. In this meeting distinguished researchers in this field will talk about their recent experimental and theoretical studies on silicate melt and glass.
- (4) 議題
- 1) 13:30-13:50 Le The Anh (RIKEN)  
The magma ocean in the early Earth
  - 2) 14:00-15:00 Yoshio KONO (河野義生) (Ehime Univ.) 【INVITED】  
<http://www.grc.ehime-u.ac.jp/archives/member/yoshio-kono>  
[https://scholar.google.com/citations?user=t\\_cyB6AAAAAJ&hl=en](https://scholar.google.com/citations?user=t_cyB6AAAAAJ&hl=en)  
Experimental study of structure of oxide glasses under ultrahigh pressure conditions of >100 GPa, and discovery of ultrahigh pressure polyamorphism in GeO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> glasses with coordination number >6  
<https://doi.org/10.1073/pnas.1524304113>
  - 3) 15:00-16:00 Tomoko SATO (佐藤友子) (Hiroshima Univ.) 【INVITED】  
<http://seeds.office.hiroshima-u.ac.jp/profile/ja.333f9b81991948d1520e17560c007669.html>  
[https://www.researchgate.net/profile/Tomoko\\_Sato](https://www.researchgate.net/profile/Tomoko_Sato)  
Intermediate state of SiO<sub>2</sub> glass during pressure-induced phase transformation  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.144111>
  - 4) 16:00-17:00 Nguyen Van Hong (HUST) 【INVITED】  
<https://sites.google.com/site/nguyenvanhongdnhbk/nguyenvanhong>

Structural transformation under densification and polyamorphism of silic  
<https://doi.org/10.1063/1.4807134>

5) 17:00-17:10 Miyuki ARAI (新井幸) (Ochanomizu W. Univ.)

The relation between bond distance of  $\text{MgSiO}_3$  and pressure

(5) 参加者

7名

河野義生 (愛媛大)、佐藤友子 (広島大)、Nguyen Van Hong (HUST)、Le The Anh (理研)、  
新井幸 (お茶大)、河津励 (理研)、飯高敏晃 (理研)

<資料19>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」  
第1回代表者会議 報告書

- (1) 日時 平成30年10月19日(金) 9:40～10:40
- (2) 場所 柏の葉オープンイノベーションラボ (KOIL) A2 会議室
- (3) 概要 「京」の利用状況を確認し、計算資源の配分について相談した。  
ポスト京に対する「ターゲットアプリ」的なものとして、  
サブ課題Dとして提案する具体的内容について議論した。
- (4) 議題
  - 1) 「京」利用状況の確認
  - 2) 今後のプロジェクト運営方針
- (5) 参加者  
6名  
川島直輝(東大物性研)、蔵増嘉伸(筑波大)、櫻井鉄也(筑波大)、藤堂眞治(東大)、  
西野友年(神戸大)、宮下精二(東大)

<資料20>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

ポスト「京」萌芽的課題サブ課題Dワークショップ 報告書

- (1) 日時 平成30年10月19日(金) 11:00~18:30
- (2) 場所 柏の葉オープンイノベーションラボ6階 KOIL サロン
- (3) 概要 サブ課題Dとしてワークショップを開催した。  
以下のプログラムの内容について発表及び討論を行い、研究や連携の推進を図った。
- (4) 議題
- 1) テンソルネットワーク法のアルゴリズム開発, 大規模並列化
  - 2) テンソルネットワーク法の応用
  - 3) 量子ダイナミクス, 量子もつれネットワーク
  - 4) 他のサブ課題との連携
- (5) プログラム
- 11:00 川島直輝 はじめに
- 11:00 森田悟史 Higher-order tensor renormalization group with entanglement filterling
- 11:30 Hyun-yong Lee S=1 Bilinear-Biquadratic model on a star lattice
- 11:50 原田健自 Entanglement branching and its application
- 12:10 玉井敬一 分子動力学法と連続体シミュレーションの融合のための基礎技術開発
- 12:30 昼食
- 13:15 西野友年 フラクタル系の臨海現象解析
- 13:35 上田宏 ElgenExa を利用した CTMRG の大規模並列化とその応用
- 13:55 奥西巧一 エンタングルメントハミルトニアンによる有限温度形式を用いた基底状態のシミュレーション
- 14:15 坂井涼 テンソルくりこみ群による2次元 $\Phi^4$ 理論の臨海結合定数の計算
- 14:45 吉村友佑 テンソルくりこみ群による3次元有限温度 $Z_2$ ゲージ理論の解析
- 15:15 山下巧 高次テンソル繰り込み群計算に対する保守性と拡張性を考慮した並列計算コードの開発
- 15:45 休憩
- 16:05 藤堂眞治 藤堂Gサマリ
- 16:10 足立大樹 Anisotropic Tensor Renormalization Group
- 16:30 白井達彦 微視的な共振器モデルでの光双安定領域で起こるヒステリシス曲線の特徴付け

- 16 : 50 山地洋平 Finite-temperature excitation spectrum of quantum magnets  
17 : 10 小坂英男 量子クラウドメモリーへの量子テレポーテーションによる量子状態転写  
17 : 40 倉見谷航平 量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーのハミルトニアンラ  
ーニング

(5) 参加者

29名

川島直輝、金子隆威、森田悟史、白井達彦、玉井敬一、Lee Hyunyong (東大物性研)、  
藤堂眞治、大久保毅、大堀建城、萩野卓啓 (東大理学部)、今田正俊、山地洋平 (東大工)、  
蔵増嘉伸、櫻井鉄也、吉村友佑、山下巧 (筑波大)、原田健自 (京大)、西野友年 (神大)、  
中野博生 (兵庫県大) 遠山貴巳 (東京理大)、小坂英男、倉見谷航洋 (横国大)、飯高敏晃、  
上田宏 (理研)、奥西巧一 (新潟大)、坂井涼 (金沢大)

<資料 2 1 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」

Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA2018-2019) 報告書

- (1) 日時 平成 30 年 12 月 3 日 (月) ~平成 30 年 12 月 6 日 (木)
- (2) 場所 理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)
- (3) 概要 近年、多体系に内在するエンタングルメント (多体系に現れる相関効果を定量化する 1 つの指標) の構造に焦点を当てた「テンソルネットワーク」と呼ばれる表現を導入することで、原子核物理から宇宙物理の幅広い物理的現象を自然に理解できることが分かってきた。実験的に観測されうる物理現象を説明するのに有用な多体系の解析にテンソルネットワークを適用する際には、ネットワークの構成手続きや数値的最適化・大規模並列化の技術の向上が重要であり、現在も精力的に研究が進められている。本国際ワークショップでは、当該分野の最先端で研究を進めている若手の研究者を一堂に集めて、テンソルネットワークの高度化のみならず当該研究課題に資する情報交換を通じて、将来取り組むべき挑戦的課題について議論を展開することを目的とする。

(4) 開催主体

主催：理化学研究所計算科学研究センター

共催：

- ・ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題D：量子力学の基礎と情報 (東京大学物性研究所, CCMS)
- ・数理・データサイエンスセンター (神戸大学)

(5) プログラム

3 December

- 9:00-10:00 Ching-Yu Huang: Holographic encoding of universality in corner spectra
- 10:30-11:30 Naoki Kawashima: Efficient Tensor Decomposition and Its Application
- 11:30-12:00 Haruka Yamada: Time-efficient tensor reordering procedures for HOTRG in distributed parallel environment
- 13:10-14:10 Yoshinobu Kuramashi: Application of Tensor Network Scheme to Particle Physics
- 14:40-15:40 Lei Wang: Tensor Networks for Generative Modeling -- from Boltzmann Machines to Born Machines, and back
- 15:50-16:50 Yusuke Nomura: Solving quantum many-body Hamiltonians with artificial

neural networks

4 December

- 9:00–10:00 Frederic Mila: Floating phase versus chiral transition in a 1D constrained model of quantum dimers, quantum loops and hard-bosons
- 10:30–11:30 Andreas Weichselbaum: Exponential Thermal Tensor Network Approach for Quantum Lattice Models
- 11:30–12:00 Guang-Ming Zhang: Tensor network state approach to topological quantum phase transitions in both 1D and 2D
- 13:10–14:10 Jens Eisert: A tensor network approach to realizing topological phases of matter
- 14:40–15:40 Frank Verstraete: Statistical physics with tensor networks: from residual entropies to conformal field theory
- 15:50–16:50 Ashley Milsted: Tensor Networks, Conformal Transformations, and Path Integral Geometry

5 December

- 9:00–10:00 Tao Xiang: Deconfined quantum criticality in one dimensional spin systems
- 10:30–11:30 Kenji Harada: Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation
- 11:30–12:00 Daisuke Yamamoto: Synthetic triangular antiferromagnets with ultracold fermions in optical lattices
- 13:10–14:10 Yu-Cheng Lin: Tensor network approaches to disordered quantum systems
- 14:40–15:40 Satoshi Morita: Improvement and enhancement of the higher-order tensor renormalization group method
- 15:50–16:50 Ian McCulloch: Hybrid TEBD algorithm and dynamical phases in the 2-dimensional Ising model

6 December

- 8:50– 9:50 Roman Orus: News on tensor network algorithms: 2d phases, arbitrary lattices, open systems and  $SU(2)$  symmetry
- 10:10–11:10 Chia-Min Chung: Stripes and superconductivity in two-dimensional Hubbard model
- 11:10–12:10 Aaron Szasz: Chiral spin liquid phase of the triangular lattice Hubbard model: evidence from iDMRG in mixed real- and momentum-space

(6) 参加者

61名

内訳：	東京大学	7名	RIKEN R-CCS	9名
	神戸大学	3名		
	その他大学	42名		

<資料 2 2 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
グループリーダー会議 報告書

- (1) 日時 平成 31 年 2 月 22 日 (金) 9 : 00 ~ 12 : 00
- (2) 場所 柏の葉キャンパス駅前サテライト 205 号室
- (3) 概要 情報縮約を推し進め、微視的なダイナミクスのシミュレーションから巨視的シミュレーションに必要な情報を抽出する手法の開発に注力すべきことなどを議論した。
- (4) 議題
  - 1) 新しく取り組むべき課題について
- (5) 参加者
  - 6 名
  - 川島直輝 (東大物性研)、蔵増嘉伸 (筑波大)、櫻井鉄也 (筑波大)、藤堂眞治 (東大)、西野友年 (神戸大)、小坂英男 (横国大)

<資料 2 3 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」

第 4 回サブ課題 A—B 間連携研究会 報告書

- (1) 日時 平成 30 年 6 月 20 日 (水) 14 : 00 ~ 18 : 00
- (2) 場所 東京大学地震研究所 2 号館 2 階 第 3 会議室
- (3) 概要 サブ課題 A 「破壊とカタストロフィ」とサブ課題 B 「相転移と流動」のサブ課題間連携課題について議論を行った。あわせて、サブ課題 A 「破壊とカタストロフィ」内の各研究機関の連携についても議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) サブ課題 A—B 連携に関する発表
  - 2) サブ課題 A 内の連携に関する発表
  - 3) 第 2 回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウムにおける連携の表現についての検討
  - 4) 平成 30 年 11 月 26 日 ~ 11 月 28 日開催の高圧討論会への招待講演対応検討
  - 5) MMM2018 シンポジウム対応検討
- (5) 参加者  
13 名  
久保百司、鈴木通人、大谷優介、宮崎成正、川勝年洋、森井洋平 (東北大学)、  
波多野恭弘、齋藤拓也 (東京大学)、尾方成信、石井明男 (大阪大学)、新山友暁 (金沢大学)、  
山口正剛 (原子力機構)  
オブザーバー参加 : 高橋昭 (東北大学)

<資料 2 4 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
サブ課題A B連携連絡会議 報告書

- (1) 日時 平成 30 年 11 月 9 日 (金) 9 : 00 ~ 13 : 00
- (2) 場所 大阪大学大学院基礎工学研究科 尾方研究室
- (3) 概要 アモルファス金属の亀裂進展に関するサブ課題A B連携研究の進捗報告と今後の連携体制についての議論

(4) 議題

- 1) これまでの活動報告
- 2) アモルファス固体中のクラックの進展の分子動力学シミュレーション (LAMMPS) と、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム (MSSP) の連携方法の議論

(5) 参加者

4名

森井洋平 (東北大理)、川勝年洋 (東北大理)、  
尾方成信 (阪大基礎工)、石井明男 (阪大基礎工)

<資料25>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」

第5回サブ課題A－B間連携研究会 報告書

- (1) 日時 平成30年12月9日(日) 14:00～18:00
- (2) 場所 東京大学地震研究所2号館2階 第二会議室
- (3) 概要 サブ課題A「破壊とカタストロフィ」とサブ課題B「相転移と流動」のサブ課題間連携課題について議論を行った。あわせて、サブ課題A「破壊とカタストロフィ」内の各連携研究についても議論を行った。また、理研シミュレータを活用して実行性能を評価するアプリの選定について検討を行った。最後に今後の研究について検討を行った。
- (4) 議題
  - 1) サブ課題A-B連携に関する発表
  - 2) サブ課題A内の連携に関する発表
  - 3) 理研シミュレータを活用して実行性能を評価するアプリの選定について
  - 4) 今後の研究について
- (5) 参加者  
12名  
久保百司、鈴木通人、大谷優介、宮崎成正、川勝年洋、森井洋平(東北大学)、  
波多野恭弘、齋藤拓也(東京大学)、尾方成信、石井明男(大阪大学)、新山友暁(金沢大学)  
オブザーバー参加：高橋昭(東北大学)

<資料 26 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
サブ課題A B連携連絡会議 報告書

- (1) 日時 平成 30 年 12 月 14 日 (金) 13 : 00 ~ 18 : 00
- (2) 場所 東北大学大学院理学研究科 合同 B 棟 7 階 738 セミナー室
- (3) 概要 サブ課題 A B 連携のための LAMMPS と MSSP の連成実行に関する技術討論
- (4) 議題
  - 1) これまでの活動報告
  - 2) アモルファス固体中のクラックの進展の分子動力学シミュレーション (LAMMPS) と、マルチスケール流動シミュレーション用プラットフォーム (MSSP) の具体的な連携方法の議論
- (5) 参加者
  - 3 名
  - 石井明男 (阪大基礎工)、森井洋平 (東北大理)、川勝年洋 (東北大理)

<資料27>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」  
サブ課題B-D連携研究会 報告書

- (1) 日時 平成30年5月2日(水) 13:00～15:00
- (2) 場所 東京大学物性研究所 会議室
- (3) 概要 B-D連携のための研究方針と共同研究体制についての議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) AIを用いた粘弾性特性の予測手法の議論
  - 2) B-D連携についての研究の方針決定
- (5) 参加者  
7名  
川島直輝(東京大)、野口博司(東京大)、渡辺宙志(東京大)、玉井敬一(東京大)  
川勝年洋(東北大)、村島隆浩(東北大)、森井洋平(東北大)

<資料 28 >

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」  
第1回サブ課題C-D間連携研究会 報告書

- (1) 日時 平成 31 年 10 月 12 日 (金) 10 : 00 ~ 15 : 00
- (2) 場所 Room 311, Ikenohata Research Bldg. (C56), Riken, Wako, Saitama, Japan
- (3) 主催者  
Toshiaki Iitaka (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C)  
<http://www.iitaka.org/~xmat/en/>  
Naoki Kawashima (ISSP, Univ. Tokyo; Post-K Challenging Project 1D)  
<https://kawashima.issp.u-tokyo.ac.jp/members/>  
Jun Igarashi (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 4B)  
<https://brain-hpc.jp/en/members/>
- (4) 概要 Tensor network (TN) is one of the most important concept in understanding complex systems. Recently it is getting more and more popular in the fields of machine learning (ML) and quantum sciences (QM). In this workshop, distinguished researchers from each field give an introductory talk of their field and discuss interdisciplinary questions.
- (5) 議題
- 1) 10:00-10:05 Toshiaki IITAKA (CAE, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C)  
Opening
  - 2) 10:05-10:20 Jun IGARASHI (CAE, RIKEN; Post-K Challenging Project 4B)  
“Tensor Network and Brain Science”
  - 3) 10:20-11:20 Qibin ZHAO (AIP, RIKEN)  
Tensor Methods in Machine Learning  
<https://qibinzhao.github.io/>  
[https://scholar.google.com/citations?hl=zh-CN&user=cSQGe3YAAAAJ&view\\_op=list\\_works&sortby=pubdate](https://scholar.google.com/citations?hl=zh-CN&user=cSQGe3YAAAAJ&view_op=list_works&sortby=pubdate)
  - 4) 13:15-13:30 Toshiaki IITAKA (CAE, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C) “Tensor Network and Earth Science”
  - 5) 13:30-14:30 Andrzej CICHOCKI (Skoltech, AIP&CEA, RIKEN)  
Tensor decomposition and tensor networks and their potential applications

<http://www.deeptensor.ml/>

<https://scholar.google.co.uk/citations?user=wpZDx1cAAAAJ>

6) 15:00-16:00 Tsuyoshi OKUBO (Univ Tokyo; Post-K Challenging Project 1D)

“Tensor network quantum states and their application to condensed matter physics”

[https://www.s.u-tokyo.ac.jp/en/people/okubo\\_tsuyoshi/](https://www.s.u-tokyo.ac.jp/en/people/okubo_tsuyoshi/)

<https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja/members/okubo>

## (6) 参加者

18名

Andrzej CICHOCKI (Skoltech, AIP, RIKEN)

Qibin ZHAO (AIP, RIKEN)

Tsuyoshi OKUBO (Univ Tokyo; Post-K Challenging Project 1D)

Toshiaki Iitaka (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C)

Le The Anh (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C)

Jun Igarashi (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 4B)

Zhe Sun (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 4B)

Morteza Heidarinejad (CEA, RIKEN; Post-K Challenging Project 4B)

Koji Maruyama (Osaka City Univ; Wolfram Research)

Seiji Yunoki (CPR, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C1D)

Franco Nori (CPR, RIKEN; Post-K Challenging Project 1C)

Neill Lambert (CPR, RIKEN),

Daniel Herr (CPR, RIKEN)

Nathan Shammah (CPR, RIKEN),

Tao Liu (CPR, RIKEN)

Tonghua Yu (CPR, RIKEN),

Zhipeng Yang (CPR, RIKEN)

Clemens Karl Gneiting (CPR, RIKEN)