

令和元年度 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）

令和元年度

「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2年5月29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令和元年度「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. 令和元年度（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） .....	1
4-3. 活動（研究会等） .....	1
4-4. 実施体制 .....	2

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 (53 歳)	
		氏名	久保 百司	月日	※2020 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、国立大学法人東京大学、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. 令和元年度（報告年度）の実施内容

### 4-1. 実施計画

平成31年度（2019年度）は、本格実施フェーズの終了年度として、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、国立大学法人東京大学、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31年度(2019年度)末の各サブ課題の目標を実施する。

各サブ課題における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。

国立大学法人東京大学は、サブ課題B、D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28～30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、腐食、変形が扱えるように拡充するとともに、「京」上で1億原子以上の計算を可能にした。平成31年度(2019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、10億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、腐食、変形の解析を可能とする。さらに、金属材料について亀裂先端の化学反応、亀裂生成、腐食、変形に関する10億原子以上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30年度までに脆化効果評価を実施した。平成31年度(2019年度)はその他の脆化元素による脆化現象の対象範囲を拡大し評価を実施する。

ii) 断層破壊ダイナミクス of 物理シミュレーション

(再委託先：国立大学法人大阪大学)

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解明する。断層は一般に自己アフィン性を持つ非平面的構造であることが知られているが、そのような複雑な構造を直接シミュレーションすることは計算コストの観点から従前のシミュレータでは実行が困難であった。そこで平成30年度までに開発済みの断層破壊シミュレータを用いて、非平面的断層における地震発生過程を直接シミュレーションし、断層の非平面構造が地震発生過程に及ぼす影響を解明する。その際、特定の地域・断層をモデル化するのではなく、統計性を考慮して、地域によらず普遍的に成立する性質に注目する。また潮汐など弱い周期的な応力摂動が加わった場合の断層運動についてもシミュレーションを実行し、地震発生の潮汐応答性や季節依存性の物理メカニズム解明へ向けて数値的な知見を集積する。

#### 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)

平成30年度に実施した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、解析モデルの規模を2倍以上に拡大して実施し、これまで以上に長距離にわたるせん断亀裂進展のシミュレーション可能にして、亀裂進展に伴う材料中の温度上昇や局所原子構造の変化を解析する。さらにこれまでに得られた知見に基づいて、せん断亀裂進展時の材料のすべり変形の物理と摩擦の物理との関連性を調べ、両物理を統一的に記述するモデルの構築を行う。

#### 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した。平成31年度(2019年度)は、様々な組織の材料に現れる「複数の非弾性変形モード」、「亀裂進展」、「弱化・回復を伴うせん断帯」の形成と伝播に対する時空間の相間や統計性を調査し、材料と地震の類似性と相違性を探究する。

## 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30年度まで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)を拡張して、弾塑性体の亀裂進展現象や、高分子流動および気泡・液滴を含む流動等のマイクロシミュレータ(MicS)との連携を進める。亀裂進展に関しては、ミクロな分子動力学シミュレーションとの連携シミュレーションを実現し、実際の状況でのシミュレーションを実施する。

### 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)

流れの下で障害物上に起こる障害物でのキャビテーションの大規模分子動力学計算を行い、カルマン渦への影響を明らかにする。また、このキャビテーションのコードを多成分系に適用できるように拡張し、キャビテーションでの不純物の効果も調べる。分子動力学計算とMSSPの結果の比較、検証を行う。

### 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)

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、本現象に特有の素過程をモデル化するとともに、その素過程モデルを用いた大規模計算手法を構築した。また、構築した手法を用いて、管路内を対象としたキャビテーションの流動計算を実施した。平成31年度(2019年度)は、平成30年度に構築した大規模計算手法を用いて、流体機械で重要となる翼素周りのキャビテーション流れを詳細にシミュレートする。また、同様の物体周りの分子動力学計算との比較を通じて、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)の更なる改良に協力する。

### 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)

平成30年度までに各種アンサンブルにおける標準第一原理分子動力学法あるいはオーダー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、固体鉄等の構造と物性およびその不純物効果を研究してきた。また、経験的ポテンシャルによる大規模分子動力学により得られた珪酸塩融体等の軌道データをもとに構造解析を行い、多階層構造およびナノ不均一性と物性の関係を明らかにしてきた。平成31年度(2019年度)はそれらに加えてとくに珪酸塩融体の物性における階層構造とナノ不均一性の役割を明らかにするための大規模第一原理分子動力学法シミュレーションを実施し、その結果をもとに多階層構造解析を行う。ネットワーク性ガラス・液体のトポロジカルな構造解析も発展させる。

#### 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30年度は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の高効率化を行なった。さらに拡張ラグランジアン断熱近似分子動力学手法等において、局在軌道の最適化を同時に行うことを可能とする手法、プログラムの開発を進めた。平成31年度(2019年度)は今までに開発してきたプログラムの安定性を高め、様々な系に適用できるようにプログラム整備を行う。プログラムの高速化も進め、より大規模系、複雑系における実証計算を行う。

### 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として前年度までに確立された、テンソルネットワーク法計算プログラムを高度並列化のためにさらにチューニングし、物質科学の基礎的な問題に応用する。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コードを開発し、履歴依存現象に応用する。さらに、行列ベクトル積に帰着される計算科学的手法の並列化プログラムのさらなる高度化を行い、これを用いて量子通信素子開発のための実証計算を行う。

#### 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・計算機科学的な高度化開発

(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30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った。平成31年度(2019年度)は大規模並列計算の汎用化と多機能化に取り組み、具体的なアプリケーションを用いた大規模計算を実現する。

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30年度は、平成29年度まで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った。また、TOMBO を用いて超微細相互作用を解析し、世界初の自己無撞着  $GW\Gamma$  計算を励起状態に拡張した。平成31年度(2019年度)は、ハミルトニアン機械学習手法の開発をさらに進めるとともに、TOMBO を用いて NV 中心の GW 計算を実施し、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。

#### 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、サブ課題ごとにサブ課題会議または研究会を実施する。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。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。課題最終年度となる令和元年度(平成 31 年度)においてはサブ課題 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、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。東京大学地震研究所は協力機関として継続参画することとした(図 1)。また、平成 30 年度に明確化した連携体制(図 2~図 5)を継続し、サブ課題研究における連携を進めると共に、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。

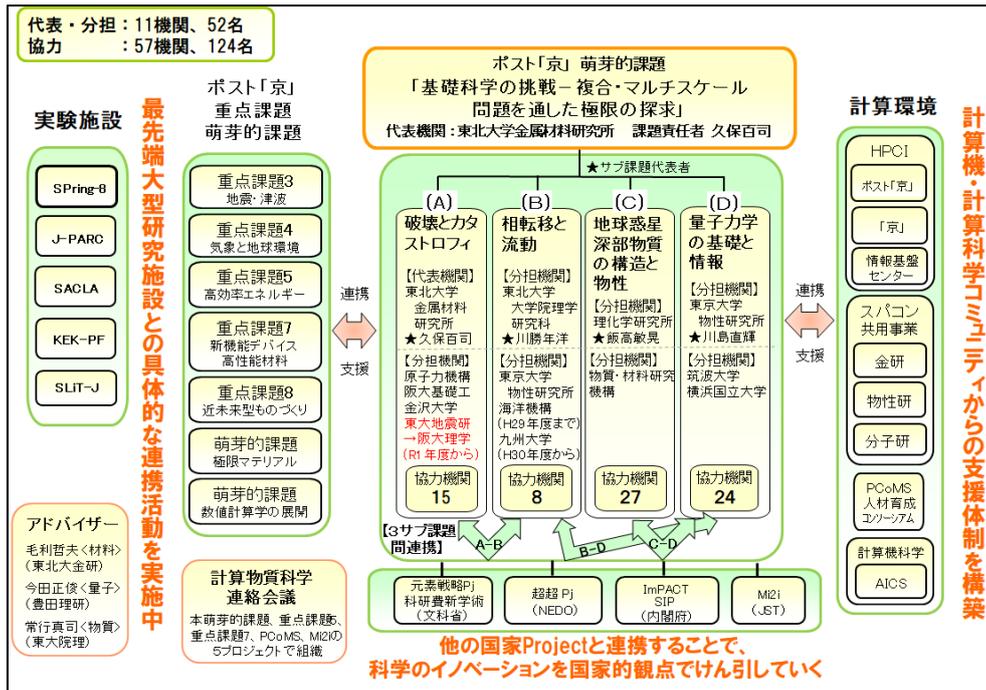


図1 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の実施体制(令和2年3月時点)

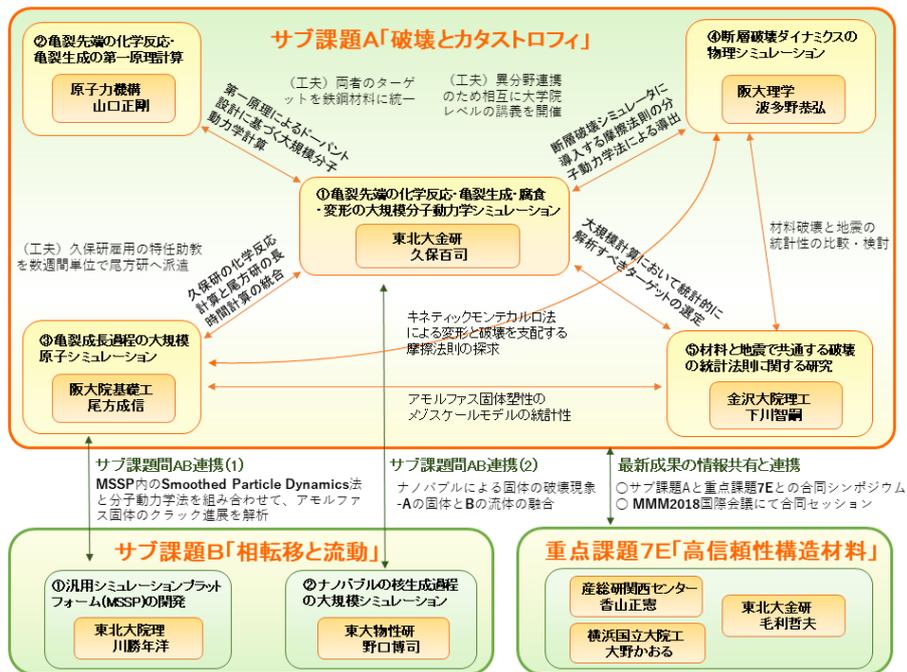


図2 サブ課題Aの連携体制(令和2年3月時点)

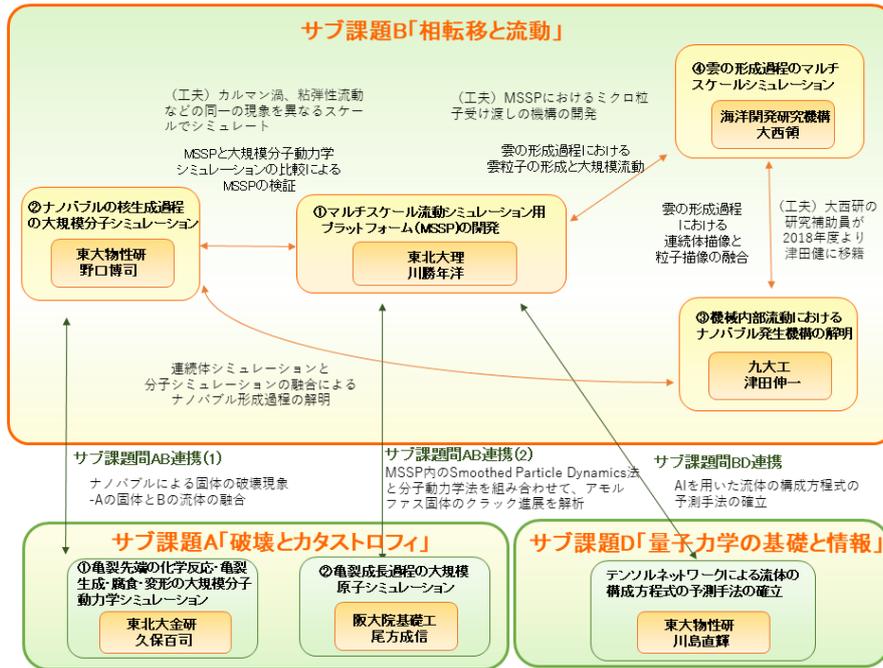


図3 サブ課題Bの連携体制(令和2年3月時点)

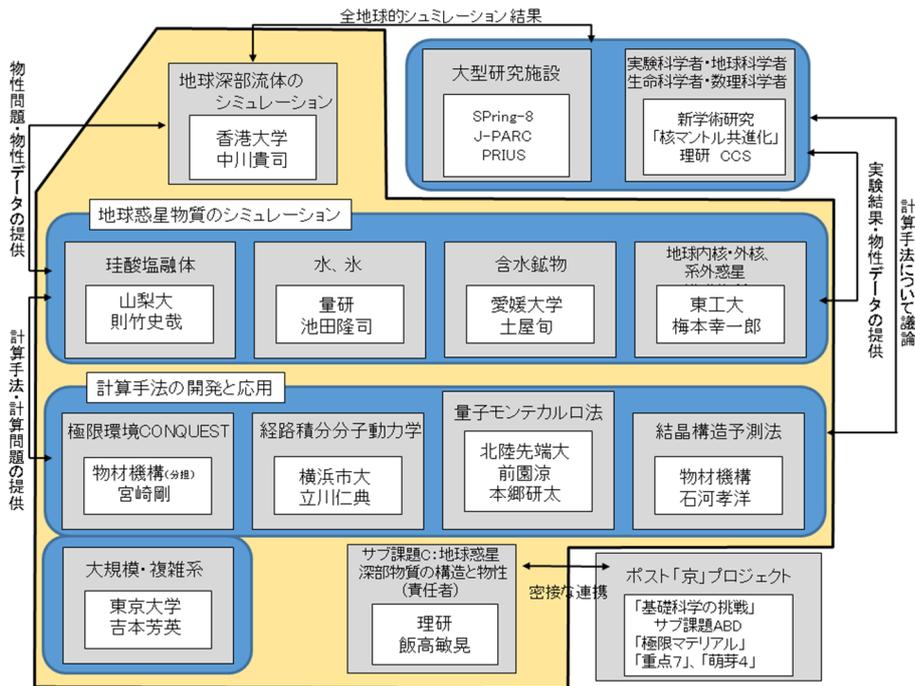


図4 サブ課題Cの連携体制(令和2年3月時点)

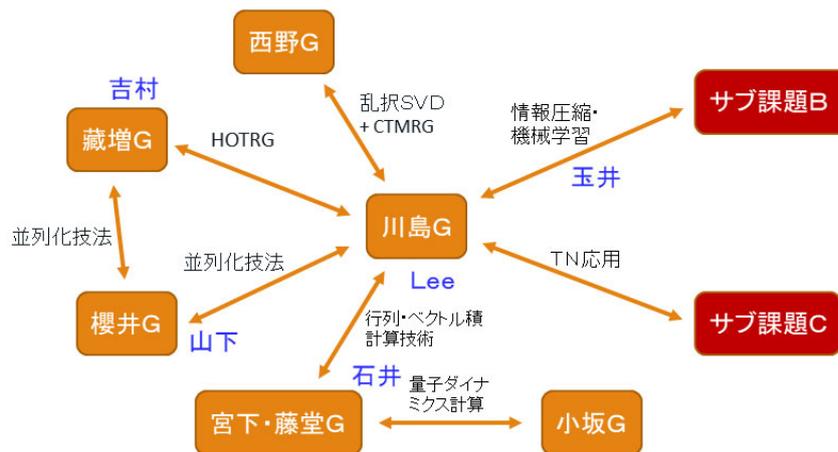


図5 サブ課題Dの連携体制(令和2年3月時点)

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、令和元年8月1日に第3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と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、昨年度に引き続き、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、デンソーの伊藤みほ氏、京セラの田中政博氏、マツダの高見明秀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。また、平成30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MI<sup>2</sup>I、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MI<sup>2</sup>I、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平成30年度に引き続き運営し、令和元年7月31日に東北大学東京分室、令和元年9月6日に名古屋大学東京オフィス、令和2年1月14日にステーションコンファレンス東京にて、計3回の会議を開催し、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。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。

令和元年度は、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6回運営委員会は、令和元年8月1日に開催した第3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2名である。報告事項としては、平成30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および公開予定について報告した。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、平成30年度から本格的にスタートしたサブ課題間連携課題についての状況の説明を行った。

### 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7回サブ課題代表者会議を平成31年4月2日に東京大学物性研究所にて開催した。主な検討事項は、下記の通りである。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。

第8回サブ課題代表者会議を令和元年5月30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。最終年度となる平成31年度の研究計画について第7回サブ課題代表者会議に引き続き議論を行った。さらに、8月1日開催の第3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プログラム内容について検討を行った。

第9回サブ課題代表者会議を令和元年6月21日に東北大学東京分室にて開催し、ポスト「京」重点課題5および7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について打合せを行った。

### 4) 最終報告会の開催

課題最終年度の最後となる令和2年2月17日(月)～2月18日(火)に、重点課題7、萌芽的課題「極限マテリアル」と合同で最終報告会を開催し、3年8ヶ月のプロジェクト期間全体の成果の報告を行った。課題代表者による成果総括の口頭発表と、分担機関からアプリケーションや研究開発の成果のポスター発表を行った。最終報告会は公開で行われ、大学関係者だけではなく、公的研究機関、民間企業から2日間で延べ339名が参加し、成果について外部研究者と意見交換を行った。

#### 【広報・広聴活動】

##### 1) 第3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[令和元年8月1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件の発表が実施された。「極限マテリアル」からは、計4件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15名を含む99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名の民間企業の技術者幹部からコメントを頂き、3名の本課題アドバイザーから講評を頂いた。

##### 2) 萌芽的課題と重点課題の合同最終報告会(第9回材料系ワークショップ～「富岳」で飛躍へ! 計算データの価値～)[令和2年2月17日～令和2年2月18日、秋葉原コンベンションホール]

ポスト「京」プロジェクトの最終年度にあたり、重点課題7「次世代の産業を支える新デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」と「極限マテリアル」と合同で最終報告会を開催し、プロジェクト期間全体の成果の報告を行った。重点7、「基礎科学の挑戦」、「極限マテリアル」それぞれの課題代表者からの口頭報告と、重点7から20件、「基礎科学の挑戦」から14件、「極限マテリアル」

ル」から4件のポスターによる報告が行われた。最終報告会は公開で行われ、大学関係者だけではなく、公的研究機関、民間企業からの参加を含む、2日間で延べ計339名の参加があり、成果について外部研究者との意見交換がなされた。

3) ポスト「京」重点課題(7)サブ課題E「高信頼性構造材料」・萌芽的課題 基礎科学の挑戦A「破壊とカタストロフィ」第三回合同研究会[令和元年7月31日、TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター]

ポスト「京」重点課題7E「高信頼性構造材料」とポスト「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」の合同で研究会を開催した。双方の研究内容・研究成果について説明を行うことで、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。11名の発表者の他、多数の研究者の参加があった。

4) 第8回極限物質科学研究会[令和元年7月17日、TKP スター貸会議室]

サブ課題Cが主催となり、“地球惑星深部物質の構造と物性：成果と展望”をテーマに極限物質科学研究会を開催した。最新の研究について発表し、議論を展開した。参加者は8名であった。

5) 第9回極限物質科学研究会[令和元年9月30日、TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター]

サブ課題Cが主催となり、“動力的回折理論による結晶構造解析”をテーマに極限物質科学研究会を開催した。最新の研究について発表し、動力的回折理論のための数値解析法、動力的回折理論を用いた局所的結晶構造解析・表面構造解析などへの応用と手法開発について議論を展開した。参加者は12名であった。

6) 第10回極限物質科学研究会[令和元年11月30日、理化学研究所]

サブ課題Cが主催となり、“Silicate Melts and Glass”をテーマに極限物質科学研究会を開催した。最新の研究について発表し、議論を展開した。参加者は4名であった。

7) 第11回極限物質科学研究会[令和元年12月19日、TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター]

サブ課題Cが主催となり、“地球惑星物質の流動と破壊”をテーマに極限物質科学研究会を開催した。地球惑星物質の流動と破壊に関する計算科学とAIの融合に関する最新の研究について発表し、議論を展開した。参加者は4名であった。

8) 第12回極限物質科学研究会[令和2年2月6日、TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター]

サブ課題Cが主催となり極限物質科学研究会を開催した。地球惑星物質の流動と破壊に関する計算科学とAIの融合に関する最新の研究について発表し、議論を展開した。参加者は5名であった。

9) 研究会「無水・含水環境におけるオリビンの高圧相転移とイプシロン相の形成」[令和2年3月9日～3月10日、海洋研究開発機構]

科研費基盤研究A「高強度中性子散乱と高分解能電顕によるマントル鉱物の水素配置と水素輸送の統合解析」とサブ課題Cの共催で、「無水・含水環境におけるオリビンの高圧相転移とイプシロン相の形成」をテーマに研究会を開催した。関連諸分野の研究者が集い今後のさらなる研究方針の議論を行った。参加者は11名であった。

10) 滞在型国際ワークショップ「Computational Approaches to Quantum Many-body Problems(CAQMP 2019)」[令和元年7月16日～8月8日、東京大学物性研究所(柏市)]

重点課題7およびサブ課題Dの共催で滞在型ワークショップを開催し、テンソルネットワーク法をはじめとする数値計算手法に関する研究発表と討論を行った。「基礎科学の挑戦」の分担機関、協力機関か

ら 6 名、研究協力機関以外からも多数参加があった。

## 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。

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。

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。令和元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、令和元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、抜本的にメモリアクセスの最適化を行うことで、10億原子以上の大規模系において亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱えるように発展させた。約10億原子の大規模多結晶チタンに対して引張り計算を行い、サブマイクロメートルスケールでの引っ張り過程に伴う結晶構造の変化を明らかにした。また、10億モノマー以上の大規模系で、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、平成30年度に引き続き、鉄に対する液体金属元素、水素、酸素の溶解エネルギー、及び鉄の結晶粒界と表面における吸着エネルギーを第一原理計算により求めた。その結果、鉄に強い脆化をもたらす水素、亜鉛は粒界と格子における安定化エネルギーはゼロ付近であり、鉄に弱い脆化をもたらす鉛、ビスマスは安定度があまり高くないが、鉄に脆化をもたらさない元素はさらに安定度が低く、これらエネルギーが脆化の指標となることを示した。

第二に、平成30年度までに高速化した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を活用し、非平面的断層における地震過程をシミュレーションした。その結果、断層の凹凸を特徴付けるハースト指数を含む一般的な形で、地震発生の前兆現象とも言える断層滑りの加速過程の規模を統一的に表せることを発見した。さらに、地震発生時の潮汐応答性の解明に向けた研究を行い、複数の周波数からなる応力接道に対して、地震発生率がクーロン応力変化に対して、指数関数的に応答することを数値的に確認した。

第三に、平成30年度までの金属ガラスの大規模原子シミュレーションの結果を踏まえ、地震と材料の破壊現象に共通するすべり弱体化予測モデルを構築した。構築した構成式から求められた流動応力のひずみ速度微分が負になるひずみ速度、温度領域を計算することで、すべり弱体化が起きる温度、ひずみ速度領域を予測できることを示した。さらに、活性化エネルギーの時間緩和の形を変更することで、様々な材料における亀裂成長から地震現象に至るまで、そのすべり弱体化を予測することが可能であることを示した。

第四に、結晶から非結晶までの多様な原子構造を連続的に表現したモデルに引っ張り変形解析を行うことで、応力ひずみ曲線から機械的性質の流動応力を、応力降下量の確率密度から統計的性質(ベキ指数  $a$  と最大イベントサイズに関連するカットオフサイズ)を評価した。その結果、従来までは普遍性が強い

と考えられていた間欠塑性に関する統計的性質には、材料の機械的性質の情報が含まれている可能性を初めて明らかにし、地震と材料の変形・破壊の類似性や相違性を検討できる新しい評価基軸を提案した。

### 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： 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 28~30 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」の高速化と最適化を行い、「京」上で 1 億原子以上の大規模系で原子論的に亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形の解析が可能なシミュレータを開発した。また、開発したシミュレータを活用して 1 億原子多結晶モデルの破壊シミュレーションを行い、実験的に合成が可能な 50nm サイズの結晶粒を含む多結晶金属の破壊現象を、化学反応を考慮した原子スケールのシミュレーションから明らかにした。令和元年度は、より複雑な構造をもつ材料の破壊プロセスの解明に向けて 10 億原子系の大規模シミュレーションが可能なシミュレータを開発し、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形メカニズムの解明に取り組んだ。さらに、開発したシミュレータを活用して、より複雑な構造を持つ超合金の破壊プロセスの解析をも行なった。

#### [研究成果]

①10 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

破壊は原子スケールの現象がマクロスケールの現象に影響を与えるマルチスケール現象であり、その詳細なメカニズムの解明には実スケールと同じスケールのモデルを用いたシミュレーションを行い、実験とダイレクトに比較することが求められる。本研究で研究対象とする多結晶金属の粒径は小さいものでも数十 nm あり[1]、既存のシミュレータでは化学反応を考慮しながら、その破壊現象を解析することは困難であった。そこで平成 30 年度までに、1 億原子系モデルで化学反応を考慮したシミュレーションが可能なシミュレータを開発し、50 nm の結晶粒で構成される多結晶金属の破壊シミュレーションを行なった。その結果、実際と同じスケールのすべりステップの生成現象を、化学反応を考慮しつつ、原子レベルで明らかにした。しかし多くの実用金属材料において金属多結晶はさらに大きい粒径で構成され、複雑な構造を持つ。このような実用金属材料のシミュレーションのマルチスケールな破壊現象の解明にはさ

らに大規模なシミュレーションが必須であることから、令和元年度は LASKYO のさらなる大規模化に取り組み、10 億原子以上の大規模計算が可能なシミュレータを開発した。平成 30 年度まではメモリ律速であるサブルーチンに対してメモリアクセスを見直すことで大規模化を達成したのに対し、令和元年度はコードの全体において抜本的にメモリアクセスの最適化を行うことで、10 億原子系のシミュレーションを実現した。

### ②10 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

開発したシミュレータを活用することで、10 億原子で構成されるサブマイクロメートルスケールの多結晶チタンモデルの破壊シミュレーションに成功した。チタンは高温高压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ることから、化学反応を考慮した破壊プロセスの解明が求められている。図 6 に、本研究で構築した約 10 億原子で構成される多結晶チタンの引っ張りシミュレーションのスナップショットを示す。水中での応力腐食割れを解析するために、表面には水を配置している。モデルの大きさは  $810 \times 161 \times 134 \text{ nm}^3$  であり、サブマイクロスケールの領域に達している。図 6 下には、HCP 構造のチタンに対して、引っ張りシミュレーションを行った時の結晶構造の変化を示す。このように、本研究により、サブマイクロメートルスケールの大規模系において、化学反応を考慮した亀裂生成・腐食・変形現象のシミュレーションを実現した。

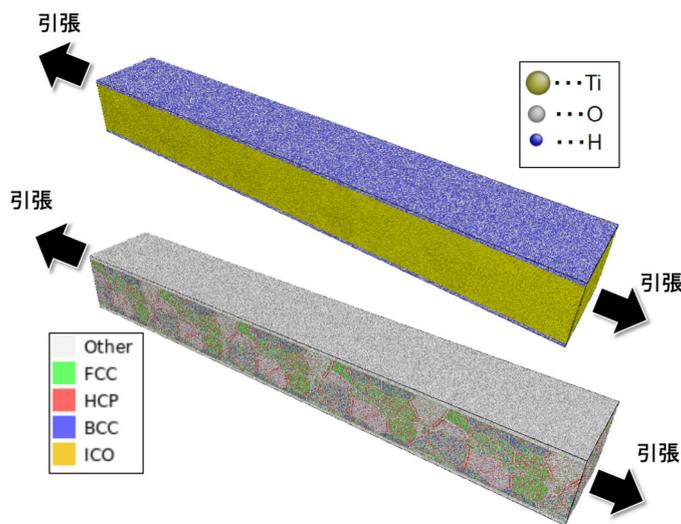


図 6 水環境における 10 億原子系の多結晶チタンの引っ張り時のスナップショット

### ③高耐久性金属材料の設計に向けた Ni 基超合金の応力腐食割れメカニズムの解明

開発したシミュレータを、より複雑な構造を持つ超合金へと適用し、応力腐食割れメカニズムの解析を行なった。先進超々臨界圧火力発電(A-USC)蒸気タービンの高温・高压部材に使用される Ni 基超合金は、母相である Ni 固溶体相 ( $\gamma$  相) に  $\text{Ni}_3\text{Al}$  を基本組成とする金属間化合物相 ( $\gamma'$  相) が立方体状に析出することによるミスフィット転位を有する。このミスフィット転位を適切に制御することによって、優れた高温強度と耐食性を実現しているが、蒸気タービンのような高温・高压水環境では、Ni 基超合金の応力腐食割れによる耐久性の低下が問題となっている。そこで本研究では Ni 基超合金と高温高压水の接触面で起こる応力腐食割れ現象の進行過程を、力学的および化学的側面から解析した。

高温高压水環境において、母相 $\gamma$ 相中に8つの立方体 $\gamma'$ 相を3次的に含有する原子数約200万の大規模Ni基超合金モデルを作成し、表面に予亀裂を入れた状態(図7)から引張シミュレーションを行った。表面に高温高压水が接するときの原子的挙動を解析したところ、水分子の解離により、酸化膜の形成および水素原子の侵入が起こることがわかった。予亀裂周辺部の結晶構造解析からは、積層欠陥の生成に伴ってミラー指数{111}面ですべり変形が生じた際、亀裂先端で塑性変形が生じることを明らかにした。これらの結果から、亀裂進展プロセスの詳細を考察した。固溶水素を含む水環境では、合金中の固溶水素により転位の易動度が増加し、合金全体において引張応力によって生じるすべり変形が促進される。同時に、亀裂先端部で応力が集中し、酸化が促進されることで金属原子間の結合力が低下する。ここで、特に亀裂先端ですべり変形が生じた際、亀裂先端で新生面が現れる。この新生面においてアノード溶解が発生することで、亀裂が進展すると考えられる。以上のように、本研究では高温高压水環境におけるNi基超合金では、固溶水素およびアノード溶解が応力腐食割れによる亀裂進展を促進することを明らかにした。

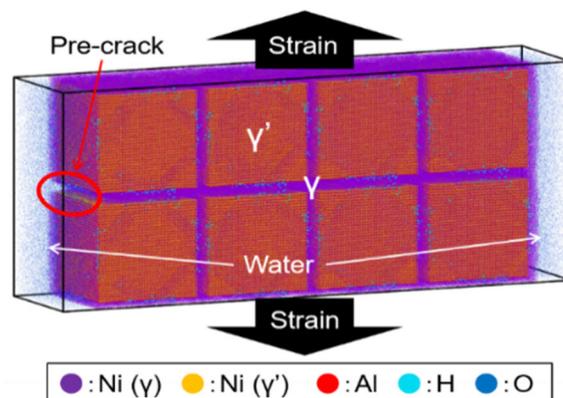


図7 高温高压水中における大規模Ni基超合金モデル

#### ④10億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30年度は1500万~1億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、空孔の成長過程を解明した。次世代のスーパーコンピュータを利用した、結晶性高分子の階層構造の解明と、その破壊現象の解明のためには、さらなる大規模計算が必須となる。そこで令和元年度は、10億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。高分子の計算においては、通し番号の情報を保持する必要がある。このため、平成30年度から粒子数が大幅に増加した10億モノマーの計算では、データ型の範囲を大きくする必要があり、コード全体の修正を行った。さらに、結果の出力データが膨大であるため、ディスクの負荷軽減のために、粗視化した結果を出力する改良も行った。合わせて出力結果の解析プログラムも改良した。図8に開発したシミュレーションコードで計算した10億モノマーから構成された結晶性高分子のラメラ構造を示す。サイズは1辺300nm程度にもなる。これは、当初の計画には無い研究成果である。

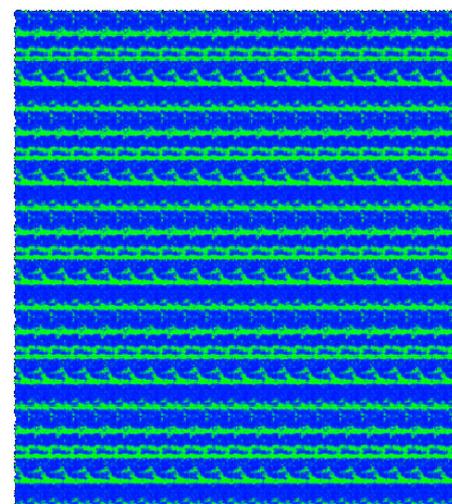


図8 10億モノマーから構成される結晶性高分子—青：結晶層、緑：アモルファス層

⑤10 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、結晶性高分子の破壊プロセスの解明に成功しており [2, 3]、令和元年度は引き続き結晶性高分子の研究を実施した。これまでは伸長プロセスにおける機械的特性を解明してきた一方で、圧縮プロセスに関しては未解明であった。そこで、10 億モノマーから構成されるラメラ構造を結晶方向に圧縮し、大規模破壊シミュレーションを実施した。伸長と同様に、圧縮プロセスにおいても応力の上昇を確認するなど、10 億モノマーから構成される結晶性高分子の大規模変形シミュレーションに成功した。

破壊プロセスにおける局所的な加熱による融解や、融点付近での破壊現象を理解するためには、融解プロセスを正しく理解する必要がある。しかし、結晶性高分子は有限の温度変化では結晶化が起こるため、実験で正確な測定は困難であり、その分子論的な理解が不足している。そこで大規模粗視化分子動力学法を用いて、結晶性高分子の融解プロセスを分子論的立場から検討した。2500 万モ

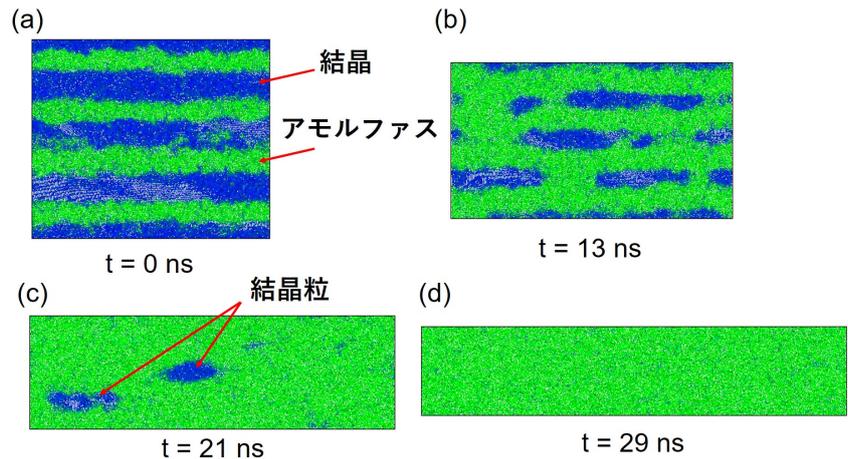


図9 2500 万モノマーから構成される結晶性高分子の融解プロセス

ノマーから構成されるラメラ構造の温度を 300 K から 390 K へと上昇すると (図 9)、アモルファス層から融解が始まり、一部のアモルファス層が繋がった (図 9b)。その後、その周りから融解が加速した。一方で、結晶粒として融解しない個所が残る様子も観察された (図 9c)。一般的な融解現象では、固液界面から均一に融解が進む。一方で、結晶性高分子の融解では、結晶粒が残るなど、界面から均一に溶けていくプロセスとは異なることが示唆された。このプロセスは結晶粒が観察できる大規模かつ融解を十分に観察できる長時間計算でのみ解明可能なプロセスであり、本研究課題で開発してきたシミュレーションコードの有効性を示す結果である。これも、当初の計画には無い研究成果である。

⑥材料破壊と地震との連携研究のためのシリカのせん断破壊過程の検討

材料破壊と地震の研究の連携を進めるために、断層を構成する岩石をモデル化したシリカ ( $\text{SiO}_2$ ) のせん断シミュレーションを行なった。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し、滑りやすくなることが報告されているが、そのメカニズムは明らかになっていない。平成 30 年度までの研究から、 $\text{SiO}_2$  の摩擦界面では水と  $\text{SiO}_2$  の化学反応によって潤滑膜が形成され、滑りやすくなることが明らかになっている [4, 5]。また、岩石を構成する多結晶体の粒界にあたるアモルファスシリカはせん断下において水と反応し、Si-O 結合が切断されるため強度が低下することが明らかになっている。令和元年度はこれまでの研究を発展させ、岩石を構成する多結晶  $\text{SiO}_2$  のせん断破壊シミュレーションを

行なった。図 10 に多結晶  $\text{SiO}_2$  のせん断破壊シミュレーションモデルを示す。岩石は粒界中に水を含むことから、粒界に設けた空隙に水を充填し、水を含む岩石をモデル化した(湿潤モデル)。また、水の影響を調べるために水を含まないモデル(乾燥モデル)を用いたシミュレーションも行なった。せん断破壊シミュレーションの結果、湿潤モデル、乾燥モデルいずれの場合も粒界において破壊が進行し、粒内の破壊は見られなかった。破壊が進行すると、せん断による回転モーメントが結晶粒を回転させながら破壊が進行する様子が観察された。また、乾燥モデルよりも湿潤モデルの方が降伏応力が低く、水が多結晶  $\text{SiO}_2$  の強度を低下させていることがわかった。化学反応の解析から、 $\text{Si-O}$  結合の加水分解反応  $\text{Si-O-Si} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Si-OH} + \text{Si-OH}$  が起こり、 $\text{Si-O}$  結合が切断されていることがわかった。以上の結果から、岩石を構成する多結晶  $\text{SiO}_2$  は結晶粒の回転を伴いながら破壊が進行すること、結晶粒界中の水は  $\text{Si-O}$  結合の加水分解反応を引き起こすことで多結晶  $\text{SiO}_2$  の強度を低下させることが明らかになった。これも当初の計画には無い研究成果である。

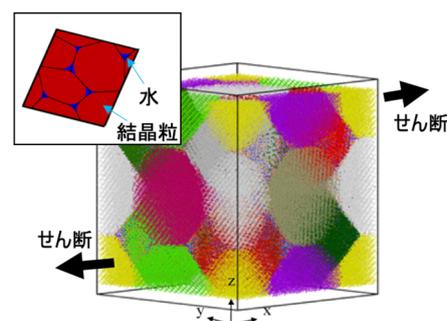


図 10 多結晶  $\text{SiO}_2$  モデル。青い粒子は水分子を表し、その他の粒子は  $\text{SiO}_2$  結晶粒を表す。挿入図は粒界に水を含む岩石の構造の模式図

#### [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] Y. Higuchi and M. Kubo, *Macromolecules* 50, 3690 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.6b02613>
- [3] Y. Higuchi, *Macromolecules* 52, 6201 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.9b00636>
- [4] Y. Ootani, J. Xu, T. Hatano, M. Kubo, *J. Phys. Chem. C* 122, 10459-10467 (2018). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b01953>
- [5] Y. Ootani, J. Xu, N. Takahashi, K. Akagami, S. Sakaki, Y. Wang, N. Ozawa, T. Hatano, K. Adachi, M. Kubo, *J. Phys. Chem. C* 124, 8295-8303 (2020). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c02068>

#### 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が、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。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、鉄鋼材料などの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]

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、鉄の結晶粒界と表面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表 1 に示す。すべての元素が表面エネルギーを安定化させることが知られているが、鉄に強い脆化をもたらすことが実験的に知られている水素、亜鉛[1]などは粒界と格子における安定化エネルギーがゼロ付近であり類似していることが分かった。鉄に弱い脆化をもたらすことが実験的に知られている鉛、ビスマス等[1]は安定度があまり高くないが、脆化をもたらさない元素よりは安定度が高いことがわかり、これらのエネルギーが脆化の指標となりうることが分かった。

#### [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 (阪大理学)

参加者： 田中宏樹 (阪大理学)

表 1 液体金属元素及び水素、酸素等の粒界、格子、表面における安定化エネルギー(負値が安定)

	粒界	格子	表面
0	-2.1	-0.7	-3.3
Ga	-1.4	-0.4	-1.8
Se	-1.0	0.1	-3.0
Sn	-0.7	0.6	-1.7
<b>Te</b>	<b>-0.5</b>	<b>0.7</b>	<b>-2.7</b>
<b>Zn</b>	<b>-0.3</b>	<b>0.3</b>	<b>-0.8</b>
<i>H</i>	<i>-0.2</i>	<i>0.3</i>	<i>-0.5</i>
<b>In</b>	<b>-0.1</b>	<b>1.2</b>	<b>-1.2</b>
<b>Li</b>	<b>0.5</b>	<b>1.0</b>	<b>-1.0</b>
<b>Cd</b>	<b>0.5</b>	<b>1.8</b>	<b>-0.7</b>
<i>Bi</i>	<i>0.5</i>	<i>2.0</i>	<i>-1.9</i>
<i>Hg</i>	<i>0.7</i>	<i>2.0</i>	<i>-0.7</i>
<i>Pb</i>	<i>0.7</i>	<i>2.2</i>	<i>-1.4</i>
Tl	0.9	2.3	-0.9
Na	2.3	3.6	-1.0
Rb	5.6	7.6	-1.3

## [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]

①については、平成30年度までに開発し高速化したコードを用いて、非平面的断層における地震発生過程を直接シミュレーションし、断層の自己アフィンの非平面構造が地震発生過程に及ぼす影響を解析した。特定の地域・断層をモデル化するのではなく、統計性を考慮して、地域によらず普遍的に成立する性質を抜き出すことを目指した。その結果、凹凸構造を特徴付ける「ハースト指数」と呼ばれる量を含む一般的な形で、地震発生の前兆現象とも言える断層滑りの加速過程の規模を統一的に表せることを発見した。加えて、潮汐など弱い周期的な応力摂動が加わった場合の断層滑りについてもシミュレーションを実行し、地震発生の潮汐応答性や季節依存性の物理メカニズム解明へ向けた研究を行った[1]。その結果、複数の周波数からなる一般的な応力摂動に対して、地震発生率がクーロン応力変化に対して指数関数的に応答することを数値的に確認し、この結果を解析的計算からも裏付けた。

②については計算材料科学分野との連携研究を行い、摩擦の原子論的過程に対する一種の粗視化モデルを構築した。その結果、従来知られている原子論的機構(真接触面積の時間発展に伴うゆっくりとした増大)とは全く異なる機構によって速度弱化型摩擦が実現することを発見した。モデルの一般性から、この結果は摩擦に限定されず、アモルファス系のレオロジーなどについても成立することが期待される。加えて、このモデルを空間を含む形に拡張し、空間均一な変形が進むにつれて自発的に亀裂が形成され、その前後における微小破壊について地震と同様の統計的法則が成立することを確かめた。

## [参考文献]

- [1] Chanard, K., Nicolas, A., Hatano, T., Petrelis, F., Latour, S., Vinciguerra, S., & Schubnel, A. (2019) Sensitivity of acoustic emission triggering to small pore pressure cycling perturbations during brittle creep. *Geophysical Research Letters* 46 7414-7423.

## 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 紅献（阪大院基礎工）

### [研究の背景と目的]

材料中のせん断亀裂の成長過程は、材料の破壊を支配する重要なステージであり、そのメカニズムを根本的に理解することは破壊の抑制、制御の鍵である、一方、地殻における断層のすべり過程は、地震現象を支配するプロセスであり、そのメカニズムを明らかにすることは、減災・防災の鍵である。亀裂の成長と断層のすべり現象はそれぞれ、材料、岩石間のせん断すべりによって引き起こされる。よってスケールこそ異なるが、二つの現象には共通の物理が存在する。すなわち、摩擦の物理である。摩擦の物理により、スケールや対象とする材料を超えて、これらの現象を統一的に記述することができる。なかでも、十分に理解が進んでおらず、また重要な現象に摩擦におけるすべり弱化現象がある。すべり弱化はカタストロフィックな破壊や地震の原因となる現象であり、具体的にはすべり速度の上昇とともに摩擦抵抗が低下する動的不安定現象を言う。このような摩擦挙動は破壊や地震が示す動的不安定の要因であり、そのメカニズムの解明が破壊や地震の予防や予知につながると考えられている。すべり弱化にはすべり面間の接触部の物質構造の励起と緩和の機構が深く関わっていると考えられているが未だ不明な点が多い[1]。

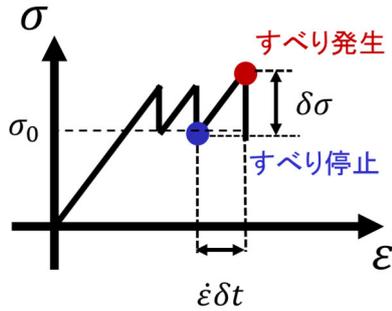
平成30年度までに、金属アモルファス材料を題材として、「京」による大規模亀裂成長分子動力学シミュレーションを用いて金属アモルファス中のせん断亀裂成長過程を解析した。特にせん断亀裂進展中(すべり変形中)における原子構造の励起・緩和に注目することで、実際にstick and slip現象といった摩擦現象を確認するとともに、そのメカニズムを明らかにすることに成功した。令和元年度はこれによって得られた結果、及び明らかになったメカニズムに基づいてすべり弱化の根本的な理解・解析に資するモデルの構築を行った。

### [研究成果]

平成30年度に実施した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、解析モデルの規模を2倍以上に拡大して実施した大規模原子シミュレーションの結果を踏まえ、地震と材料の破壊現象に共通する構造の励起・緩和機構に注目して、双方に適用できるすべり弱化予測モデルを構築した。本モデルではこれまでシミュレーションにて得られた流動応力のstick and slip現象を再現するように、すべりの素過程を熱活性化過程とし、その活性化エネルギー( $\Delta Q$ )が構造の励起・緩和によって時間的に変化する効果を導入し、流動応力 $\sigma_{flow}$ とひずみ速度 $\dot{\epsilon}$ の関係を表す構成式を導出した(図11)。 $\sigma_0$ は図11のとおり流動応力(応力の時間平均)の基準値である。流動応力のひずみ速度依存性が負であればすべり弱化が発生していることになる。つまり、構築した構成式から求められた流動応力のひずみ速度微分が負になるひずみ速度、温度領域を計算することにより、すべり弱化が起きる温度、ひずみ速度領域を予測することができる。弱化・緩和の挙動は材料の種類や地震現象で異なるが、本モデルでは活性化エネルギーの時間緩和の形を変更することにより、様々な材料における亀裂成長から地震現象に至るまでそのすべり弱化を予測することが可能である。

構築したモデルを用いて金属アモルファスのすべり弱化を予測した結果を図12に示す。金属アモルファスにおいては時間経過( $\tau$ )に対して指数関数( $1 - \exp(-\tau)^\beta$ )の形ですべりが発生しにくくなるような構造緩和が存在し[2]、この効果をモデルの活性化エネルギーの項に取り込んだ。ここで $\beta$ は金属アモルファスの組成によって変化する定数である。図12(a)は温度500Kにおいて金属アモルファスの定数 $\beta$ を変化させてひずみ速度ごとに流動応力の値を計算した結果である。また図12(b)は温度とひずみ速度ご

との流動応力のひずみ速度依存性を計算した結果であり、値が負になっている箇所がすべり弱化が発生する温度・ひずみ速度領域と予測できる。図12(a) (b)からすべり弱化は定数 $\beta > 1$ の場合のみ発生していることが確認できた。これは本研究によってはじめて明らかにされた金属アモルファスの緩和特性とすべり破壊の関係である。また得られた特定の温度やすべり速度における流動応力のすべり速度依存性は実験で観測されたものと定性的に一致し、金属アモルファスの破壊時のすべり弱化を首尾良く予測することに成功した。緩和挙動を岩石のすべり現象をモデル化した形、すなわち経過時間の対数依存の形に変更することにより、本モデルを用いて地震現象におけるすべり弱化も予測することができる。



$$\sigma_{\text{flow}}(\dot{\epsilon}_{\text{ext}}) = \sigma_0(\dot{\epsilon}_{\text{ext}}) + \frac{1}{2}\delta\sigma(\dot{\epsilon}_{\text{ext}}) \quad \delta\sigma(\dot{\epsilon}_{\text{ext}}) = C\dot{\epsilon}_{\text{ext}}\delta t$$

$$\delta t = \frac{\int_0^{\tau_c} \tau k(\tau, \dot{\epsilon}_{\text{ext}}, T) \exp\left(-\int_0^{\tau} k(\tau', \dot{\epsilon}_{\text{ext}}, T) d\tau'\right) d\tau}{\int_0^{\tau_c} k(\tau, \dot{\epsilon}_{\text{ext}}, T) \exp\left(-\int_0^{\tau} k(\tau', \dot{\epsilon}_{\text{ext}}, T) d\tau'\right) d\tau}$$

$$k(\tau, \dot{\epsilon}_{\text{ext}}, T) = k_0 \exp\left(-\frac{Q_0 + \Delta Q(\tau) - (C\dot{\epsilon}_{\text{ext}}\tau + \sigma_0)\Omega}{k_B T}\right)$$

図11 すべり弱化予測モデルの概要

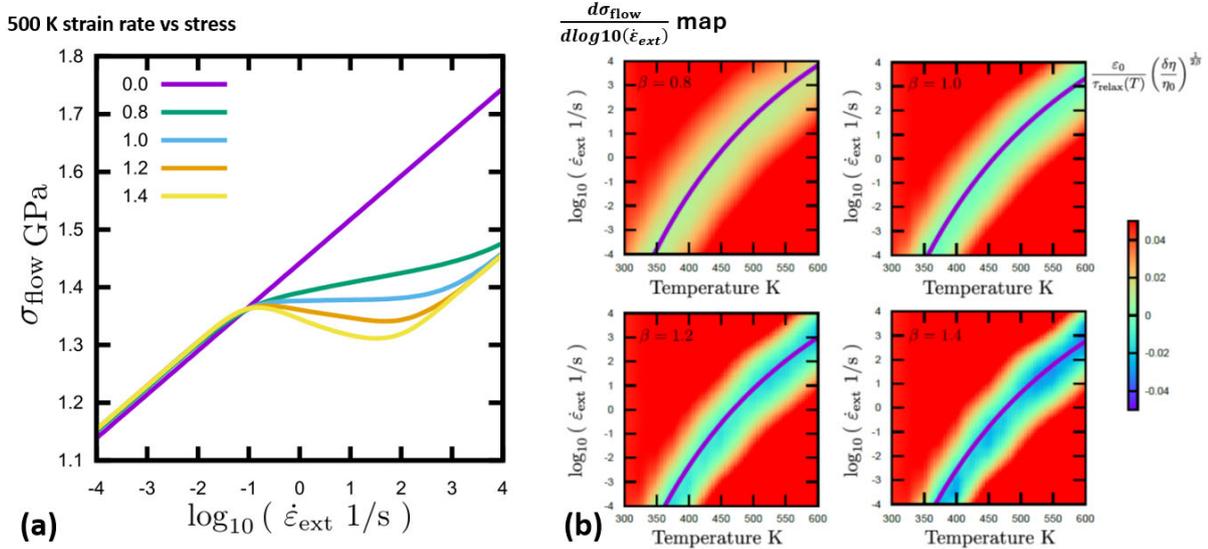


図12 金属アモルファスのすべり弱化の予測結果。(a) 温度500Kにおけるひずみ速度vs流動応力、(b) 温度・ひずみ速度条件ごとの流動応力のひずみ速度依存性。

[参考文献]

[1] 松川宏, 摩擦の物理, 岩波オンデマンドブックス (2015)  
 [2] R. Busch, E. Bakke and W. L. Johnson, Acta Materialia, 1998, 46, 4725

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]

材料内の間欠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  $x$  と発生頻度  $P(x)$  の関係がベキ分布 ( $P(x) \propto x^{-a}$ ;  $a$  はベキ指数) 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  $a$ 」と「最大イベントサイズ  $x_{\max}$ 」の2つのパラメーターで特徴づけることができるため、これらのパラメーター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。しかしながらこれまで、主に非平衡物理の観点からこの普遍的な統計的性質の物理的な解釈は行われてきた。そこでは、結晶塑性が示す統計的性質は、転位間の長距離弾性場を介した連鎖現象(転位雪崩)により生じる自己組織化臨界現象として分類され、「傾き  $a$ 」は固体塑性に不変な固有値を持つと考えられている。そのため、統計的性質と機械的性質の関係については、ほとんど関心が示されていない現状である。一方で、固体力学・材料科学の観点から材料の個別特性を考慮して「傾き  $a$ 」を考えると、大きなせん断帯が発生する脆性的な材料は、加工硬化能力の大きい延性的な材料に比べて、大規模な集団運動の発生頻度が高いと推測できるため、統計的性質は小さな  $a$  を示す可能性がある。しかし一方で、我々のこれまでの研究では原子シミュレーションを用いて、材料組成や組織により統計的性質は影響を受けることを見出している[1][2][3]。つまり、統計的性質を特徴づける2つのパラメーター( $a$  と  $x_{\max}$ )は、固体塑性に不変な固有値ではなく、個々の材料の機械的性質を反映している可能性がある。上記の観点の違いから生じる矛盾を明らかにするには、既報の様々な材料の実験や数値シミュレーションの結果を寄せ集めて比較・検討すれば良いが、一方で、既報の実験やシミュレーションの各種条件(変形条件や観測量)が統一されていないことや、実験試験片のばらつきや測定誤差が、統計的性質と機械的性質の精緻な比較・検討を行うことの障害となっている。最終年度となる令和元年度では、これまでに確立した様々な構造や組織(結晶、非晶質)を有する固体材料の原子モデリングを用いて、分子動力学解析を通じて各材料内で生じる集団運動を反映する普遍的な統計的性質と機械的性質の関係を系統的に調査し、機械的性質と統計的性質の関係を検討した。

## [研究成果]

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ために、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、さらに異種原子間の結合力を変化させる。そして熱処理することで様々な組織を有する固体材料を作製した。これらを構造判定をすることにより結晶モデル、非晶質モデル、結晶・非晶質混在モデルに分類することができた。各モデルに全方向周期境界条件を適用し引張変形解析することで、応力ひずみ曲線が得られ、ここから機械的性質の流動応力を求め、そして応力降下量の確率密度を取ることで各モデルの統計的性質(「ベキ指数  $a$ 」と最大イベントサイズに関連する「カットオフサイズ」)を評価した。また、自由表面を有するナノサイズの試験片を作成し、引張変形解析を実施することで延性特性の評価を行った。延性特性を評価は、同じ組成に対するナノ試験片の10ケースの結果の平均値とした。

図13に機械的性質と統計的性質の関係を示す。図13左が、ナノ試験片の延性特性とベキ指数  $a$  の関係を、図13右が流動応力とカットオフサイズの関係を示す。これより、両者の関係には相関が確認できる。つまり、ベキ指数  $a$  が大きくなると局所変形は抑制されることから、ベキ指数  $a$  には加工硬化特性

に関連する情報が含まれている可能性があり、また、カットオフサイズが大きくなると流動応力も大きくなることから、カットオフサイズには材料の強度に関連する情報が含まれている可能性があることを見出した。以上のことから、様々な組織の材料に対する統一条件における系統的な変形解析と統計解析を通じて、従来までは普遍性が強いと考えられていた間欠塑性に関する統計的性質には、材料の機械的性質の情報が含まれている可能性を初めて明らかにし、地震と材料の変形・破壊の類似性や相違性を検討できる新しい評価基軸を提案することができた。今後、これらの関係を活用することで材料から地震まで統一的に取り扱うことができるマルチスケールな破壊力学の構築が期待できる。

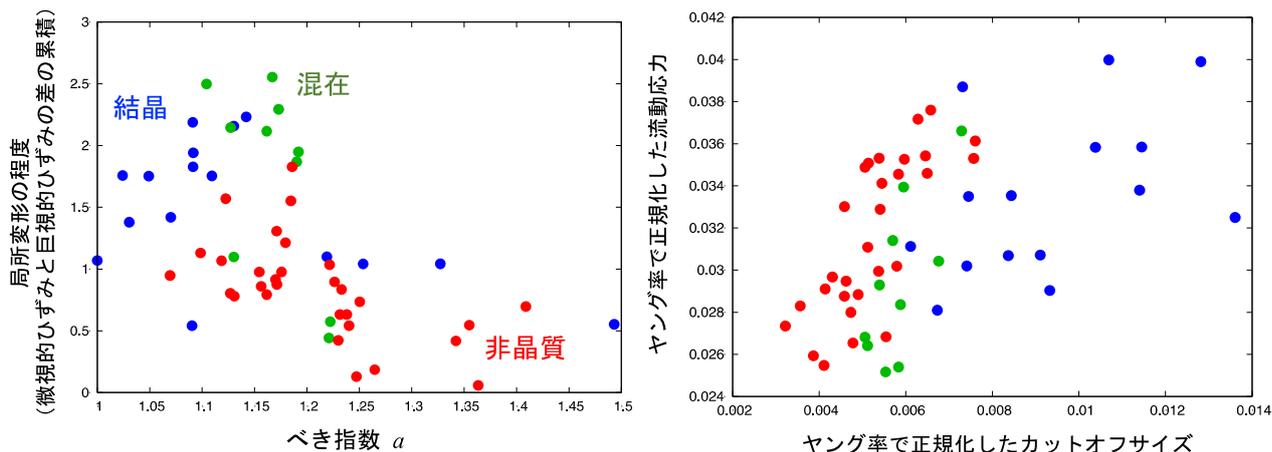


図 13 機械的性質と統計的性質の関係

[参考文献]

- [1] T. Niiyama, T. Shimokawa, “Atomistic mechanisms of intermittent plasticity in metals: Dislocation avalanches and defect cluster pinning”, Phys. Rev. E, 91(2015), 022401.
- [2] T. Niiyama, T. Shimokawa, “Barrier effect of grain boundaries on the avalanche propagation of polycrystalline plasticity”, Phys. Rev. B, 94(2016), 140102.
- [3] T. Niiyama, M. Wakeda, T. Shimokawa and S. Ogata, “Structural relaxation affecting shear-transformation avalanches in metallic glasses”, Phys. Rev. E, 100(2019), 043002.

## 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の研究テーマは、相転移と流動がカップルする複雑な混相流動現象を解明することであり、その目的のために、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行ってきた。令和元年度のサブ課題Bの研究成果は以下のとおりである。

代表機関である東北大院理のグループでは、平成30年度までの開発に引き続き、マクロな流動とミ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・プラットフォームであ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)とマルチスケールシミュレーション技法の開発を続けてきた。令和元年度は、「京」コンピュータ及びHPCI計算資源により東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピュータを活用し、10億粒子を超える規模の超大規模系を用いた複雑流動のシミュレーションを行った。対象としては、高分子鎖をモデル化した多数のダンベル粒子を内包する線形/非線形の粘弾性流体および、破壊現象を伴う弾塑性体である。令和元年度は、平成30年度までに定性的に比較を行っていた実験との対応について、固体表面での境界条件の厳密化などの対処と移動境界への対応を行うことで、障害物周りの流れの詳細な様相についても実験と定量的に一致する結果を得ることができた。また、マイクロシミュレータの設計に関しては、マクロスケールで求めた任意の変形(ひずみテンソル)を行列による変換を施してマイクロシミュレータに渡す方法を開発し、高分子材料の一軸伸長変形へと応用し検証した。

サブ課題Bの分担機関である東大物性研のグループは、3次元の超並列分子動力学シミュレーションにより、気液相転移を生じる臨界点近傍の流体が、等間隔で並んだ障害物で形成されたゲートを過ぎるときにふるまいを調べた。ここでは、障害物の後方で流体の温度を調節することで気泡(キャビテーション)の生成を制御し、その結果流れがどのように影響を受けるかについて解析した。障害物によって生成されるカルマン渦列は隣り合うものが逆位相で同期し、かつ臨界温度を超える降温による気泡の生成のためにカルマン渦の位相に乱れが生じ、気泡発生による密度変化が流動に大きな影響を与えていることが分子スケールから確認できた。また、相転移に伴う異常性のために、障害物に働く揚力の温度変化にも非単調な異常性が認められた。

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、平成30年度に引き続き、流体機械内部などで発生する気液相変化を伴うキャビテーション流れを対象とし、この問題を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)計算で解析した。令和元年度の成果としては、(1)実験的に観察されているキャビテーション乱流場の全体様相を、オープンソースアプリケーションであるFrontFlow/Blueのコードに独自の改良を行うことで再現できたこと、(2)独自に開発したキャビテーション流の多重プロセス型モデルを使うことで、これまでは困難とされていたキャビテーション初生の再現に定性的に成功したこと、などがあげられる。

このようにサブ課題Bでは、種々のマルチスケール手法を用いて、様々な複雑流動の解析に成功するとともに、その解析に用いることのできるシミュレーション技術およびシミュレータの開発に目覚ましい成果を上げることができた。

## 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 (理研)、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、独自開発のソフトウェアとして、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)の各流体粒子にミクロな分子スケールのモデルであるマイクロシミュレータ(Micro Simulator; MicS)を埋め込むという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(図14) [5-9]。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に計算を実施することができるため、ユーザが用意したマイクロシミュレータをMSSPに導入することで、高効率での並列計算が可能となるような設計になっている。また、東北大院理のグループでは、このMSSPにマイクロシミュレータを導入する際に障害となるマイクロシミュレータの境界条件の問題についても解決策を追求した[1-4]。

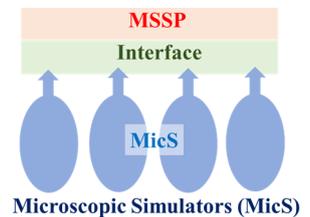


図14 MSSPの構造

### [研究成果]

平成30年度までの研究開発を引き継ぎ、SPH法を用いたマクロ流動シミュレーションとミクロなモデル(分子シミュレーションや歪応力特性のモデルなど)を組み合わせたマルチスケールシミュレーションの手法の開発および、その手法に立脚した汎用プラットフォームMSSPの開発を行い、さらにこの方法論を各種の複雑流動・破壊現象へと応用した。また、MSSPのミクロなパートを受け持つマイクロシミュレータに適用すべき各種の方法論も開発し、「京」を用いた最大約10億粒子系でのマルチスケールシミュレーションの実行に成功した[5-9]。

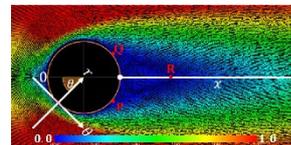


図15 障害物を通るニュートン流体のMSSPによるシミュレーション

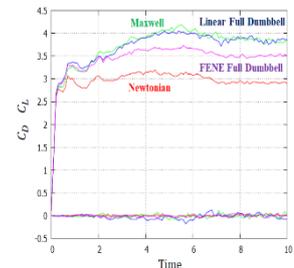


図16 ニュートン流体、マクスウェル流体、線形ダンベル流体、非線形ダンベル流体の4種類の流体に対するMSSPシミュレーションで得られた障害物に働く抵抗力と揚力の時間変化

また、マルチスケール手法の開発の一環として、外力によって分子動力学法の計算セルが一軸伸長変形する場合に、その変形の効果を考慮した周期的境界条件の実装も行い、有効性を確認した[1-4]。

具体的な成果は以下の通りである。

- (1) 円筒形状の障害物に対して、ニュートン流体およびマクスウェル流体(希薄高分子溶液に相当)の一樣流が通過する現象のシミュレーションを行った(図 15)。今回は特に障害物表面での境界条件を改善し、障害物に作用する粘性抵抗力や揚力の値が、実際の実験の結果と定量的に一致することを確認することができた(図 16) [5-9]。
- (2) 亀裂進展に関しては、円筒による弾塑性体の引き裂きとクラックの進展の現象について、ミクロな分子動力学シミュレーションから計算された応力ひずみ特性のモデル系を MicS シミュレータとして埋め込んだ MSSP を用いることで、ミクロな分子動力学と対応する現実的な状況でのマルチスケールシミュレーションを実行することに成功した。
- (3) MSSP に埋め込むミクロシミュレータとして分子動力学法を直接用いる場合に対応できるマクロスケールの流動は、従来は単純なせん断流れに限られていたが、分子動力学法の境界条件として新しい境界条件を導入することでこの問題を解決し、高分子メルトに対する伸長流れの動的粘弾性の計算に成功した(図 17) [1-4]。

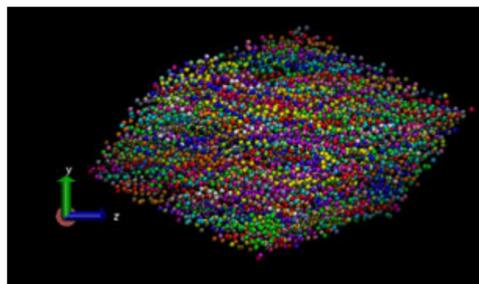


図 17 一軸伸長に対応する境界条件を設定された分子動力学シミュレーションのセル

## [参考文献]

### 論文発表

- [1] T. Murashima, S. Urata, S. Li, “Coupling Finite Element Method with Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) for Hierarchical Multiscale Simulations”, *European Physical Journal B*, 92, 211 (2019).
- [2] 村島隆浩, “ミクロスケールとマクロスケールのシミュレーション連成による高分子材料系のマルチスケールシミュレーション”, *日本化学会情報化学部会誌*, 37, 87 (2019).
- [3] S. Li, S. Urata, T. Murashima, “Multiscale Modeling of Plasticity in Amorphous & Polymeric Materials”, *IACM Expressions*, 46, 10 (2020).

### 学会発表

- [4] 村島隆浩, 森井洋平, 川勝年洋, ”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の開発”, *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*, 2019/10/25.
- [5] 川勝年洋, “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”, 第9回材料系ワークショップ ~「富岳」で飛躍へ! 計算データの価値, 秋葉原コンベンションホール, 2020/2/17.
- [6] 森井洋平, 川勝年洋, “複雑流動のマルチスケールシミュレーション”, セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル No. 24」, 東北大学金属材料研究所, 2019/10/29.
- [7] 森井洋平, 川勝年洋, “高分子を含む複雑流動のマルチスケールシミュレーション”, 第68回高分子討論会, 福井大学 文京キャンパス, 2019/9/25.
- [8] 森井洋平, 村島隆浩, 川勝年洋, 芝隼人, 寺田弥生, 谷口貴志, 山本量一, 國嶋雄一, 松田景吾, 大西領, 浅野優太, 渡辺宙志, 野口博司, 小屋口剛博, 伊藤伸泰, 本田隆, “混相流のマルチスケールシミュレーション”

ール解析に関するサブ課題Bでの連携研究”，第3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，2018/8/1.

[9] Youhei Morii, Toshihiro Kawakatsu, “Multiscale Simulation Methods in Complex Fluids”, 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10), City University of Hong Kong, 2019/7/24.

## 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（慶大）、浅野優太（東大物性研）

### [研究の背景と目的]

キャビテーションは、高流速の液体中の局所的な圧力変化によって生じる、気泡の生成・成長・消滅を伴う流動現象である。キャビテーションが発生すると、タービンなどの流体機械に対して、性能低下、騒音や振動、エロージョンなど、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。キャビテーションの発生メカニズムについては、液体中に気泡核が存在し、それが飽和蒸気圧以下の領域に成長に十分な時間滞在することで発生すると考えられている[1]。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は極めて困難なため、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。特に、油圧機械などで発生するキャビテーションのように、気泡核の存在を仮定することが困難な場合、流動場中の相転移現象を直接的に議論しなければならないため、解析はさらに困難になる。

本研究では、分子動力学(MD)計算によって、周期的に並んだ円柱周りのキャビテーションの解析を行い、気泡の生成・成長過程、及びそれらが周囲の流れに与える影響をMD計算によって調べた[2]。

### [研究成果]

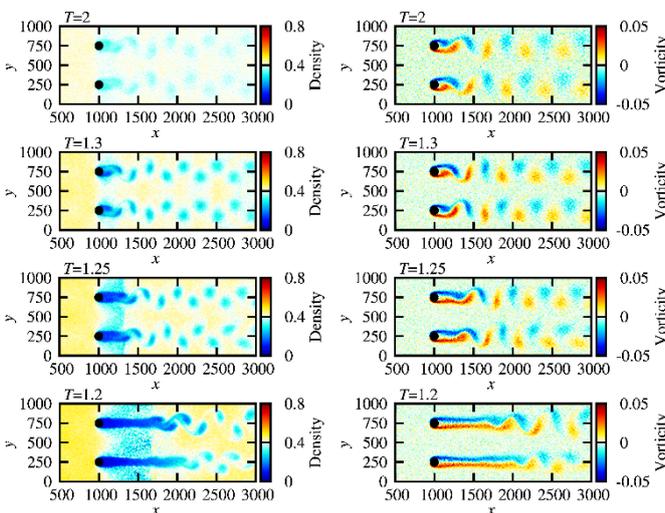


図 18 LJ 流体の密度場(左)と渦度場(右)のスナップショット。図中の黒丸は円柱である。

3次元のMDシミュレーションを行い、周期的に並んだ円柱周りの流れの解析を行った。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、2つの円柱を流れに垂直方向に配置することで無限に並んだ円柱列を表現した。こうすることで、上下のカルマン渦列が非対称な構造を取り得るようになる。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。超臨界領域において、臨界点近傍に降温していくことでキャビテーションを発生させた。

図 18 は密度場(左)と渦度場(右)のスナップショットである。まず、高温(温度  $T = 2$ ) では気泡の発生は認められず、非キャビテーション流れが得られた。円柱の後方に逆位相同期したカルマン渦列が発生した。この同期によって、円柱に働く振動が増幅されることも分かった。降温していくと、 $T = 1.3$  で気泡

が発生した。この温度ではカルマン渦の放出サイクルに連動して気泡が発生した。また、上下のカルマン渦列は非キャビテーション流れと同様に逆位相同期したままである。 $T = 1.25$ になると、円柱背後に気相領域が形成され、カルマン渦が形成されるまでの距離が増加した。また、僅かではあるが、上下のカルマン渦の位相に乱れが生じた。さらに温度を下げ、 $T = 1.2$ になると、円柱背後の気相領域がさらに拡大し、上下のカルマン渦が非対称な構造になった。この非対称構造は長周期で入れ替わることもわかった。相転移が起こらないニュートン流体では、温度変化によってこのような変化は起こらない。したがって、気泡発生による密度揺らぎが流動場に大きな影響を与えることがわかった。

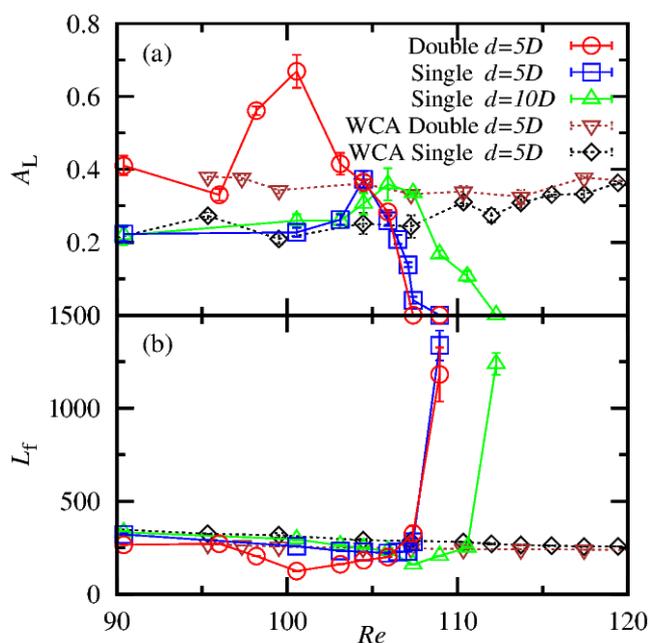


図 19 揚力係数の振幅 $A_L$ と渦形成長さ $L_f$ のレイノルズ数 $Re$ 依存性。Double : 2 円柱系、Single : 1 円柱系、WCA : ニュートン流体。 $d$ は円柱間距離であり、 $D$ は円柱直径である。

このような渦構造の変化によって、渦により励起される振動の特性も変化するはずである。そこで、円柱に働く揚力の振動振幅 $A_L$ 、渦形成長さ $L_f$ がどのように変化するかを調べた(図 19)。ニュートン流体の場合、温度変化による粘性の変化だけが流動場に影響するため、 $A_L$ と $L_f$ は単調な振る舞いを示す。ところが、LJ 流体の場合は、粘性の変化に加えて相転移も影響するため、両者の競合によって非単調な変化となることがわかった。気泡発生後、 $1.25 \leq T \leq 1.3$ の範囲で、降温と共に $A_L$ は減少し、最終的に消失した。 $A_L$ の消失と同時に、 $L_f$ が急激に増加することもわかった。したがって、揚力の振動消失は、 $L_f$ の増加によるものではなく、円柱近傍で発生した気泡が渦放出に伴う振動の伝搬を阻害したためと考えられる。

位相の影響を調べるために、1つの円柱のみを配置した1円柱系との比較を行った。1円柱系の場合

は、常に同位相同期したカルマン渦が現れる。非キャビテーション流れでは、2円柱系の場合は1円柱系に比べて、位相の引き込みにより渦の放出に伴う振動が増幅することがわかった。降温していき、気泡が発生する温度に近くなると、両者の $A_L$ と $L_f$ は異なる振る舞いを示すことがわかった。これは非常に微細な気泡の発生、或いは、臨界点近傍であることに起因する密度揺らぎの現れ方が異なるためであると考えられる。しかしながら、気泡発生後は、カルマン渦列間の干渉が弱まるため、位相の違いによらず $A_L$ と $L_f$ は同じ振る舞いとなった。以上のように、円柱近傍で発生した気泡が揚力や流動場の特性を大きく変えることを分子スケールから明らかにした。また、不純物として、引力強度の異なるLJ粒子を混合したが、顕著な効果は得られなかった。

高分子添加によるカルマン渦のぼやけについては、分子動力学計算とMSSPで計算結果によい一致が見られた。

#### [参考文献]

- [1] 加藤洋治, キャビテーション, 槇書店 (2000).
- [2] Y. Asano, H. Watanabe, and H. Noguchi, J. Chem. Phys. 152, 034501 (2020).

### 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、気泡の初生の正確な予測は依然として困難な状況にある。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 1nm から 100  $\mu\text{m}$  オーダー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]

令和元年度の研究成果は次の2点に集約される。すなわち、(1)実験的に観察されているキャビテーション乱流場の全体様相を再現できたこと、(2)独自に開発した多重プロセス型モデル[1]の適用によりこれまで困難とされていたキャビテーション初生の再現に定性的に成功したこと、である。まず成果(1)は、流体機械の内部流れなどの大規模乱流解析で実績を誇るオープンソースソルバー (Front Flow/Blue) における混相流れ専用の有限要素スキームを抜本的に見直したことで、実験結果を適切に再現するキャビテーション乱流場が得られるようになったことである。図 20 は、2次元縮小拡大流路におけるキャビテーションの発生領域を白色で表示した例であるが、実験でも観察されるキャビテーションを伴う特徴的な渦構造が再現できている。一方、成果(2)は代表者らが独自に開発してきた多重プロセス型モデル[1]の適用により、キャビテーションの初生位置を少なくとも定性的に再現できるようになったことである。既往の典型的な計算手法では、キャビテーションの初生を実際よりも早く見積もるという欠点があったが、この欠点を大きく改善することに成功している。図 21 は、単独翼まわりのキャビテーションについて、代表的な既往モデル[2]による計算結果と多重プロセス型モデルによる結果を比較した例である。図において、白色で表示されている部分がキャビテーションの発生領域であるが、多重プロセス型モデルではキャビテーション発生領域の前縁が流れの下流側(右側が下流側)にシフトしていることがわかる。

さらに本モデルと分子動力学計算との比較を行うことで、マルチスケール流動シミュレーション用ブ

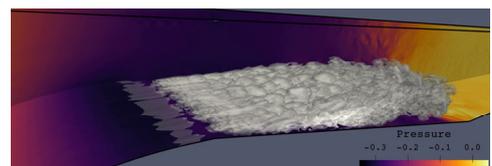


図 20 2次元縮小拡大流路内におけるキャビテーションの発生様相

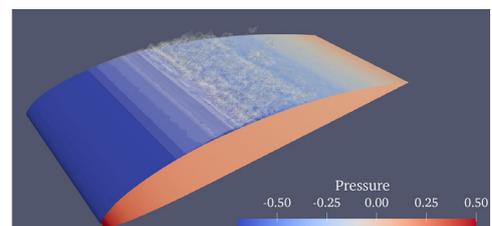
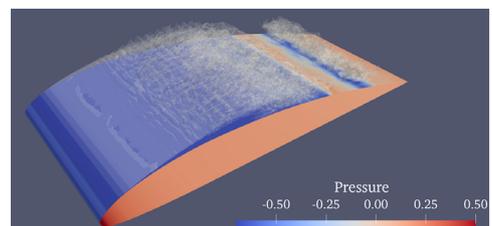


図 21 単独翼まわりのキャビテーションの発生様相(上: 既往モデル[2], 下: 多重プロセス型モデル[1])

ラットフォーム (MSSP) にキャビテーションの効果を取り入れるためには、場所ごとの気泡のサイズ分布関数の情報を取り入れることが重要であるという今後の改良指針を明示することができた。

**[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] 沖田 浩平・梶島 岳夫, 翼まわりの非定常キャビテーション流れの数値シミュレーション, 日本機械学会論文集 B 編, 68, 667, pp. 637-644, (2002).

## 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( $H_2$ , He)、氷( $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $CO_2$ )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31年度には、高温高压下の岩塩中の水素の存在形態を第一原理計算と高压実験の連携により解明した。含水鉱物 H 相の相境界を第一原理計算により確定した。第一原理計算と高压実験の連携により含水鉱物の  $MgSiO_4H_2$ ,  $AlOOH$ , および  $FeOOH$  からなる多成分系の固溶関係および圧縮挙動を明らかにした。遺伝アルゴリズムと遺伝プログラミングの連携により高压下の水素化物の結晶構造を予言した。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。

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31年度は、開発した極限環境 CONQUEST のソースコードを CONQUEST 本体の一部として公開した。また、擬ポテンシャルと PAO 基底関数の生成プログラムの改善と整備を行なった。膨大なトラ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  $T_c=203K$  の高温超伝導の実験的発見へと至った。こ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31年度は、準調和近似による熱力学関数計算の Python パッケージを開発して鉱物の相図計算に適用した。第一原理計算に基づいた高温高压下の鉱物の相図計算により地球型系外惑星の内部構造とマントルダイナミクスを解明した。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、fcc 水素化鉄の安定領域を解明した。 $MgSiO_3$  ポストペロブスカイト (PPV) 相の低压アナログ物質候補である  $Mg_2GeO_4$  について、新奇の相転移である、陽イオン副格子における高温での秩序無秩序転移を提案した。

## 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： 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）、福井宏之（兵庫県立大院理、理研）、John Sak Tse（USASK）

#### [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、地球深部における物質の構造と物性の知識が不可欠である。本研究項目では、実物実験では困難な高温高压下の物質の安定性や性質を第一原理計算により決定することを目的とする[1]。

とくに、水の地球深部へ輸送に関わる含水鉱物は重要である。含水鉱物に含まれる水素の原子核量子効果は準調和振動子近似で扱われるが、それ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。

また、地球や系外惑星深部に相当する超高压条件下における物質の構造と物性を、各種第一原理計算を用いて解明する。巨大なスーパーセルが必要になる不純物系や、非調和効果が重要になると期待される高温系を計算することにより、系外惑星内部の構造理解や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。極限環境下での密度汎関数法の弱点を克服する方法の一つとして量子モンテカルロ法の適用研究を行う。

さらに、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を開発・適用する。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極めて重要であるが、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・適用を進める。

#### [研究成果]

高温高压下の岩塩中の水素の存在形態[2]を第一原理計算と高压実験の連携により解明した。含水鉱物H相の相境界を第一原理計算により確定した[3]。第一原理計算と高压実験の連携により含水鉱物のMgSiO<sub>4</sub>H<sub>2</sub>、AlOOH、およびFeOOHからなる多成分系の固溶関係および圧縮挙動を明らかにした[4]。遺伝アルゴリズムと遺伝プログラミングの連携により高压下の水素化物の結晶構造を予言した[5]。また、定

温定圧経路積分型分子動力学法を用いて高压氷[6]、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。

準調和近似による熱力学関数計算の Python パッケージを開発[7]して鉱物の相図計算に適用した。第一原理計算に基づいた高温高压下の鉱物の相図計算により地球型系外惑星の内部構造とマントルダイナミクスを解明した。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[8]とともに、fcc 水素化鉄の安定領域を解明した。MgSiO<sub>3</sub> ポストペロブスカイト (PPV) 相の定圧アナログ物質候補である Mg<sub>2</sub>GeO<sub>4</sub> について、新奇の相転移である、陽イオン副格子における高温での秩序無秩序転移を提案した[9]。

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。また、Si-O-Si 架橋の化学結合を第一原理計算することによって、高压下の珪酸塩の構造と物性の詳細を明らかにした[10]。経験的ポテンシャルによる大規模分子動力学により得られたシリカの軌道データをもとにトポロジカル構造解析を行い、同種の原子が固まった微小領域と強い Si-O 結合が固まった微少領域が存在するナノヘテロジェナイティイーが物質輸送に重要な役割を果たしていることを明らかにした[11, 12]。第一原理分子動力学計算により、初期地球に存在したマグマオーシャンの寿命やスーパープルームの屈曲の手がかりになるかもしれない玄武岩融体の特異な物性を発見した[13]。また、Soret 効果と珪酸塩融体の局所構造との関係を明らかにした[14]。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[15]、第一原理分子動力学法と SPring-8 を活用した高压実験により固体酸素高压相 ( $\epsilon$  相) の電子状態をはじめて解明した[16]。

なお、上記のうち参考文献[2-16]は令和元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，高压力の科学と技術 27 (2017).
- [2] T. Matsuoka et al., *The Journal of Physical Chemistry C* 123, 25074 (2019).
- [3] J. Tsuchiya, and K. Umemoto, *Geophys. Res. Lett.* 46, 7333 (2019).
- [4] M. Nishi et al., *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 124, 10231 (2019).
- [5] T. Ishikawa, T. Miyake, and K. Shimizu, *Phys. Rev. B* 100, 174506 (2019).
- [6] T. Ikeda, *Chem. Phys. Lett.* 717, 141 (2019).
- [7] T. Qin et al., *Computer Physics Communications* 237, 199 (2019).
- [8] A. P. van den Berg et al., *Icarus* 317, 412 (2019).
- [9] K. Umemoto, and R. M. Wentzcovitch, *Physical Review Materials* 3, 123601 (2019).
- [10] F. Noritake, *Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition* 5, 2018 (2019).
- [11] P. K. Hung et al., *Materials Research Express* 6, 085201 (2019).
- [12] N. V. Hong et al., *Mater. Chem. Phys.* 236, 121839 (2019).
- [13] A. Majumdar et al., *Nature Communications* 11, 4815 (2020).
- [14] F. Noritake, T. Kishi, and T. Yano, *J. Non-Cryst. Solids* 525, 119672 (2019).
- [15] L. T. Anh et al., *Sci. Rep.* 9, 8731 (2019).
- [16] H. Fukui et al., *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 201905771 (2019).

## 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、通常的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 を開発してきた。本研究ではプログラム CONQUEST を使い、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。本課題終了時に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可能と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。開発されたプログラムは課題終了時まで一般公開する。

### [研究成果]

令和元年度は、様々な元素、系に対してプログラム CONQUEST を適用できるように擬ポテンシャルと PAO 基底関数の生成プログラムの

表 2 CONQUEST に付属する PAO 基底生成プログラムで作られた PAO 基底を用いて計算された氷 XI 構造の格子定数 (左) と  $\text{MgSiO}_3$  立方体ペロブスカイト構造の最適体積と体積弾性率 (右)。同じ擬ポテンシャルを用いた平面波計算 (PW, Quantum Espresso) の結果も示されている。括弧の R は s, p, d で同じ半径を用いた場合。E はエネルギーシフトによって決められる、s, p, d で異なる半径を用いた場合の基底関数。

改善と整備を最初に行なっ

た。この際に、PAO 基底作成プログラムは一般に公開されている ONCVSP[2]によって作成される擬ポテンシャルに対応して作られる。

Basis	$a$ (Bohr)	$b$ (Bohr)	$c$ (Bohr)	$\text{MgSiO}_3$	
				$V_0(\text{\AA}^3)$	$B_0(\text{GPa})$
PW	8.20	14.41	13.36	167.4	235.7
SZP(R)	7.84	13.62	12.75	170.5	198.2
DZP(R)	7.85	13.87	13.02	168.0	223.7
TZTP(R)	8.30	14.28	13.38	165.0	253.2
SZP(E)	7.76	13.43	12.69	175.4	192.7
DZP(E)	7.82	13.79	12.74	172.8	217.5
TZTP(E)	8.29	14.29	13.44	169.7	246.1

我々は、ONCVSP を用いて用意された擬ポテンシャルデータベース PseudoDojo[3]に対応する複数の PAO 基底 (SZP, DZP, TZTP) を作成し、平面波 (PW) 計算との比較を行うことにより、様々な物質群 ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{MgSiO}_3$ , ice XI 構造等) について計算精度の調査を行なった。表 2 に氷 XI 構造と  $\text{MgSiO}_3$  に対する計算結果を示す。様々な系に対するテスト計算の結果、TZTP という高精度基底を用いれば、平面波精度の計算が可能であること、DZP 基底でもほとんどの場合、十分な精度を持つこと等が示された[4]。

また、本研究課題で新規に作成した部分において、計算精度や正常動作の確認のために行っていた計算部分やファイル出力箇所を取り除き、プログラムの高速化を進めた。さらに、分子動力学や構造最適化を用いた応用計算において時間がかかっていた前ステップの電子状態を用いるためのファイル入出力部分

の改善を行い、応用計算における計算速度の向上を実現した。

上記で得られた基底 (DZP) を、氷表面におけるステップ構造の安定性に対する理論研究に適用した。氷表面の構造は微粒子表面における触媒作用や融解の際の前駆現象等、基礎科学としても応用科学としても重要な問題である。氷表面ではプロトンの配向がバルク中よりも重要であることが指摘されているが、様々な配向を考慮したステップ構造の理論研究には大規模第一原理計算が必要となる。本研究では高精度基底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[5]を用いることにより図 22 に示すような 4320 原子系の大規模系に適用し、第一原理計算による構造最適化を行なった。その結果、異なるステップ構造の安定性を明らかにすることができた。さらに、このステップ構造が成長することを考慮し、水分子の吸着、そして脱離する際のエネルギーを計算した。

開発に用いられたプログラム CONQUEST は、上記の PAO 基底生成プログラムと共に 2020 年 1 月に MIT ライセンスによる一般公開が行われた(図 23)。チュートリアルの整備が少し遅れているが、すべての研究者が自由に使えるようになっている[6]。また、計算物質科学関連のフリーのソフトが集められている「MateriAppsLive」[7]の最新版(v2.6, v3.0)に CONQUEST は導入された。公開に際して、CONQUEST 全般に対するレビュー記事[8]の発表も行なった。

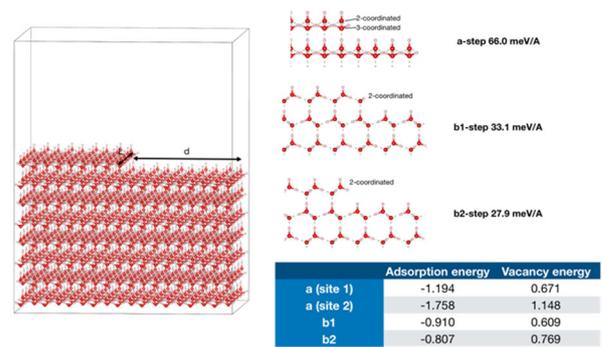


図 22 マルチサイト法を用いて第一原理計算による構造最適化を行なった氷 XI 表面のステップ構造の一つ(左図:4320 原子系)。3つの異なるステップ構造に対するエネルギー(右上図)とステップ構造から水分子を吸着、脱離させる時のエネルギー(右下図、BSSE 補正前)。



図 23 CONQUEST 公開に対する web page

## 【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.mat-simresearch.com>
- [3] <http://www.pseudo-dojjo.org>
- [4] D. R. Bowler, J. S. Baker, J. T. L. Poulton, S. Y. Mujahed, J. Lin, S. Yadav, Z. Raza, T. Miyazaki: JJAP, 58, 100503 (2019).  
<https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab45af>
- [5] A. Nakata, D. R. Bowler and T. Miyazaki: Phys. Chem. Chem. Phys. 17, (2015).  
<http://dx.doi.org/10.1039/c5cp00934k>
- [6] <https://github.com/OrderN/CONQUEST-release>
- [7] <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>

- [8] Ayako Nakata, Jack S. Baker, Shereif Y. Mujahed, Jack T. L. Poulton, Sergiu Arapan, Jianbo Lin, Zamaan Raza, Sushma Yadav, Lionel Truflandier, Tsuyoshi Miyazaki and D. R. Bowler: *J. Phys. Chem.* 152, 164112 (2020).  
<https://doi.org/10.1063/5.0005074>

## 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、従来の計算手法では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。この制約なく、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。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、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、機械学習的手法、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きた。令和元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30年度までに開発したテンソルネットワーク表現による繰り込み群コードを更に高度化し応用した。具体的には、アルゴリズムの収束性を改善し、高次元に適用した際の計算量を低減した。これを応用して、表面臨界現象、動的臨界現象、キタエフモデルに代表されるトポロジカルスピン液体相の解明を行った。とくに、現実の物質を念頭においた計算により、トポロジカル量子液体相を含む期待される相図を明らかにした。

第2に、非可換ゲージ理論へ向けた拡張として、2次元の $\theta$ 項(トポロジカル項)入り  $U(1)$ ゲージ理論をTRG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、解析的に予言されている $\theta=\pi$ での一次相転移を実証した。また、有限密度の物理システム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法による相転移(Bose凝縮)の解析を行った。特に、Silver Blaze現象(極低温では、物理量がある臨界点まで化学ポテンシャル依存性を示さない)の実証に成功した。

第3に、量子ダイナミクスの新しい計算手法を応用した計算を行った。スピン・フォトン共振器系において、レーザー強度が周期的に変調する場合、その周期を変えると、ヒステリシスループが一つから二つに分裂する動的な相転移現象が現れることを明らかにした。さらに、フロケ演算子の固有値分布から、非平衡定常状態への緩和時間がスピノール分解と同じ有限サイズスケリング則に従うことを発見した。

第4に、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が、とくに、ダイヤモンド中の窒素空孔(NV)中心近傍の同位体炭素( $^{13}\text{C}$ )核子の転写実験や、炭素核子選択的な量子テレポーテーション転写に成功した。また、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。また、さらに、TOMBOによりNV中心の準粒子スペクトル計算や光吸収スペクトル計算にも成功した。

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、テンソルネットワーク法を応用した手法開発を行った。空間1次元の結合写像格子において、転送作用素が行列積演算子(MPO)を短時間シミュレーションから推定した。非平衡臨界現象を示す結合写像格子において比較を行った結果、MPOモデルが元のモデルの臨界現象と同じスケリング則を再現することを発見した。

## 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、石井隆志、玉井敬一（東大物性研）

#### [研究の背景と目的]

物理学において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、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、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。これを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。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]

令和元年度は、TN 表現に基づくアルゴリズムの更なる高度化とその応用を行った。参考文献 [1] においては高階の情報量の大きいテンソルを多数の 3 階テンソルからなる環状ネットワークによって高効率に表現するためのアルゴリズムを提案した。この種の操作は、TN 表現に基づく実空間繰り込み群の計算や画像認識などのデータ科学分野でも現れる問題であり、重要性の高い要素技術である。ベンチマーク計算の結果、臨界現象に対する有効性が立証された。参考文献 [2、3] では、境界をもった統計力学系に対する TN 表現実空間繰り込み群の手法を開発した。これによって、表面臨界現象の研究が可能となる。2次元古典スピン系に適用した結果、イジング、3重臨界イジング、3状態ポッツモデルなどの表面臨界現象に一致する境界共形スペクトルを得ることに成功した。参考文献 [4] では、TN 表現を動的臨界現象において標準的である 1+1 次元向き付きパーコレーション問題に応用した。従来のモンテカルロ法などによる研究では、平均量の時間依存性に関する議論しかできず、確率分布関数の詳細に立ち入った議論ができなかったが、TN 表現による方法ではそれが可能である。我々は、従来法では計算が困難である レニーエントロピーを計算し、その緩和が転移点において普遍的な性質を持つことを明らかにした。参考文献 [5] では、TN 表現に基づく変分法によって、キタエフモデルの研究を行った。キタエフモデルは、厳密解があり、トポロジカルに非自明な構造を持つ量子スピン液体状態が基底状態であることが分かっているモデルとして、非常に重要である。この研究を通じて、我々は、簡単な TN 表現を持つ量子状態で、キタエフスピン液体状態と多くの共通点を持つものを発見した。2つの量子状態は互いに断熱的に変形可能である。我々の発見した量子状態は古典ループガスモデルと等価な数学的構造を持っており、変分法の出発点としても有用であることが示された。そこで我々はループガス量子状態を他の物理系に対しても応用し、S=1 キタエフモデル [6]、キタエフ・ガンマモデル [7、8] などの物性も解明した。特に、参考文献 [8] では、キタエフモデルと同様の物性を示すことが期待されている、 $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> などの物質に磁場をかけたときに生じる量子液体相の研究を行った。 $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> は、熱的ホール伝導において半量子化が観測されており、キタエフスピン液体状態の候補として注目されている物質である。我々の計算は、ジグザグ磁気秩序相と磁場による完全分極相との間にスピン液体相が出現することを示唆するものである。参考

文献 [9、10] では、実空間繰り込み群の計算量を減らす新手法を提案した。3次元以上の高次元系で標準的に用いられる HOTRG は、 $d$ 次元系に対する計算コストが  $\chi^{4d-1}$  に比例 ( $\chi$  はボンド次元) するという問題点があった。我々が開発した Anisotropic Tensor Renormalization Group (ATRG) では、テンソルのくりこみを非等方的に行うことで、高次元における計算量を HOTRG の  $\chi^{4d-1}$  から  $\chi^{2d+1}$  に削減することに成功した。系の次元  $d$  が大きくなるほどその優位性は増す [9]。一方、2次元古典スピン系に対するテンソルくりこみ群法として、ボンド重みを取り入れたテンソルくりこみ群法 (Bond-weighted Tensor Renormalization Group (BTRG)) も開発した。この方法では、従来の Tensor Renormalization Group (TRG) と同じオーダーの計算コストでより精度の高い計算が可能となっている [10]。今後、ATRG と BTRG を組み合わせることで、高次元においてもより高精度なシミュレーションが可能になると期待される。

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、行列ベクトル積に帰着される計算科学的手法であるが、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、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法についてプログラムの並列化を行った。これを用いて量子通信素子開発のための実証計算としては、共振器系での動的な協力現象についての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が閉じ込められた共振器系への応用を行った。具体的には、共振器中のフォトン数が双安定な状態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。令和元年度は、レーザー強度が周期的に変調する場合について、その周期を変えると、ヒステリシスループが一つから二つに分裂する動的な相転移現象が現れることを明らかにした。さらに、量子マスター方程式の下での周期毎のストロボ的な時間発展を記述するフロケ演算子の固有値分布 (図 24) から、非平衡定常状態への緩和時間を定量的に調べ、この動的な相転移現象がスピノダル分解と同じ有限サイズスケール則に従うことを見出した [11]。

#### [参考文献]

- [1] Hyun-Yong Lee and Naoki Kawashima: J. Phys. Soc. Jpn. 89, 054003 (2020)
- [2] Shumpei Iino, Satoshi Morita, and Naoki Kawashima: Phys. Rev. B 101, 155418 (2020)
- [3] Shumpei Iino, Satoshi Morita, and Naoki Kawashima: Phys. Rev. B 100, 035449 (2019)
- [4] Kenji Harada and Naoki Kawashima: Phys. Rev. Lett. 123, 090601 (2019)
- [5] Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Tsuyoshi Okubo, and Naoki Kawashima: Phys. Rev. Lett. 123, 087203 (2019)
- [6] Hyun-Yong Lee, Naoki Kawashima, and Yong Baek Kim: arXiv:1911.07714
- [7] Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Tsuyoshi Okubo, Naoki Kawashima: Phys. Rev. B 101, 035140 (2020)
- [8] Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Li Ern Chern, Tsuyoshi Okubo, Youhei Yamaji, Naoki Kawashima

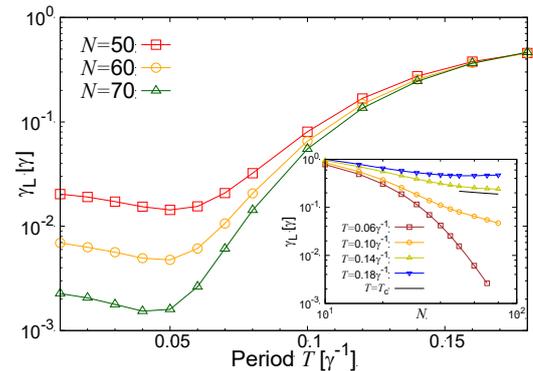


図 24 フロケ演算子の固有値から計算されたヒステリシスループの緩和時間  $\gamma_L$  の変調周期  $T$  依存性。転移点 ( $T_c \sim 0.13$ ) の前後で定性的に異なったシステムサイズ依存性が見られる [3]。

and Yong Baek Kim: Nature Communications 11, 1639 (2020)

[9] Daiki Adachi, Tsuyoshi Okubo, Synge Todo, preprint: arXiv:1906.02007

[10] Daiki Adachi, Tsuyoshi Okubo, Synge Todo, in preparation.

[11] Tatsuhiko Shirai, Synge Todo, Seiji Miyashita, Phys. Rev. A 101, 013809 (2020).

## 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、鶴見正樹、富岡 稔（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。令和元年度における課題(i)～(iv)の研究開発状況は以下の通りである。

課題(i)、(iv) : 2次元の $\theta$ 項(トポロジカル項)入り U(1)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、U(1)ゲージ理論における連続変数の積分に対して Gauss 求積法を適用し、 $\theta=\pi$ における一次相転移の解析に成功した。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かった。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と磁化を計算し、その温度・体積依存性を詳細に調べることによって、相転移の次数が従来予想されていた 2次ではなく 1次であることを見出した[4]。

数理的・計算機科学的高度化開発においては、TN 法の高速並列計算アルゴリズムの開発並びに実際の物理モデルへの適用、及び、「極限マテリアル」サブ課題 A グループと共同で CCSD(Coupled-cluster singles-and-doubles)法の高速並列計算アルゴリズムの理論開発を行った。具体的には、以下の 2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高速並列計算法の開発

高次テンソル繰り込み群の計算過程の中で計算される諸量には、テンソル要素の一部からそれぞれが独立に求められるものがある。この性質を利用して、各プロセスがテンソル要素の一部のみを持つ高速並列計算アルゴリズムを開発・実装した。実装したコードを用いて 4次元単純格子 Ising モデルに対する計算を行った[4]。

(2) 計算対象が独立に求められることを利用した CCSD 法の高速並列計算法の開発

高次テンソル繰り込み群と同様のアイデアにより、CCSD 法についても高速並列計算法の理論開発を行った[5]。現在、開発したアルゴリズムの実装が進められている。

## [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] “Tensor renormalization group study of two-dimensional U(1) lattice gauge theory with a  $\theta$  term”, Y. Kuramashi and Y. Yoshimura, arXiv:1911.06480 [hep-lat].
- [4] “Phase transition of four-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group”, S. Akiyama, Y. Kuramashi, Y. Yamashita, and Y. Yoshimura, Physical Review D100 (2019) 054510. DOI: 10.1103/PhysRevD.100.054510.

- [5] “A Parallel Computing Method for the Coupled-Cluster Singles and Doubles”, T. Yamashita, T. Kosugi, Y.-i. Matsushita, and T. Sakurai, arXiv:1911.00242 [cond-mat.str-el].

### 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]

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[1-6]。最初に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が[2]、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(図25)[6]。さらに、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26)。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つの核子の中から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78%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[6]。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[3]、ホロノミック量子ゲート操作の忠実度を最大化を行えるという多くの利点をもつ[5]。また、TOMBOにより世界初の自己無撞着 GW 計算を励起状態に拡張した他、超微細相互作用とスピン軌道相互作用の高精度計算が可能であることを示し、NV 中心の GW 準粒子スペクトル計算(図 27)および GW + Bethe-Salpeter 光吸収スペクトル計算(図 28)にも成功した[7]。

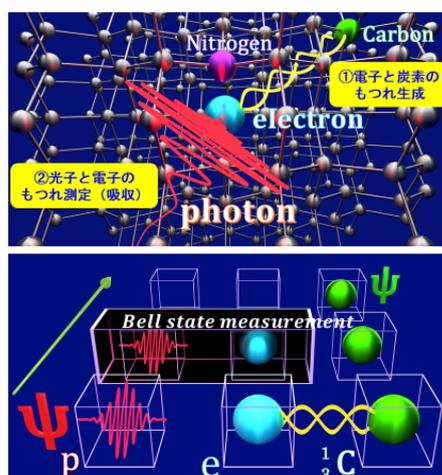


図 25 実験で行った光子から炭素同位体( $^{13}\text{C}$ )核スピンへの量子テレポーテーションの原理による量子状態転写の原理

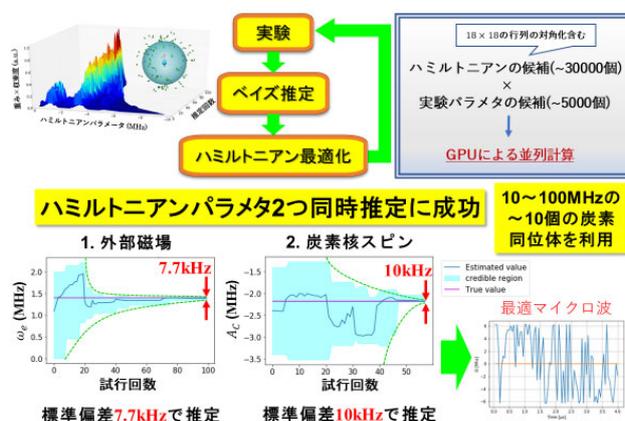


図 26 ハミルトニアン機械学習の原理とリアルタイム機械学習の実験結果

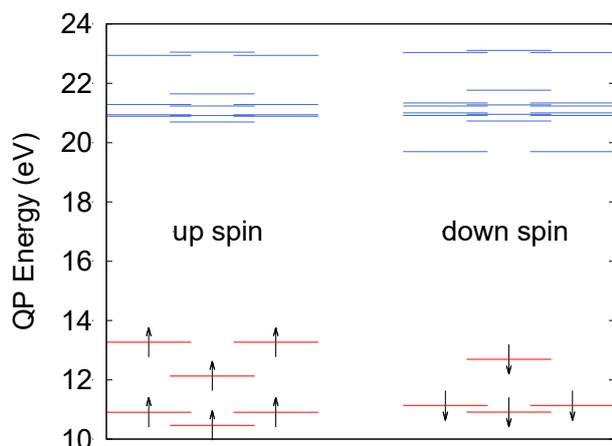


図 27 NV 中心の準粒子スペクトル(TOMBO の GW 計算)

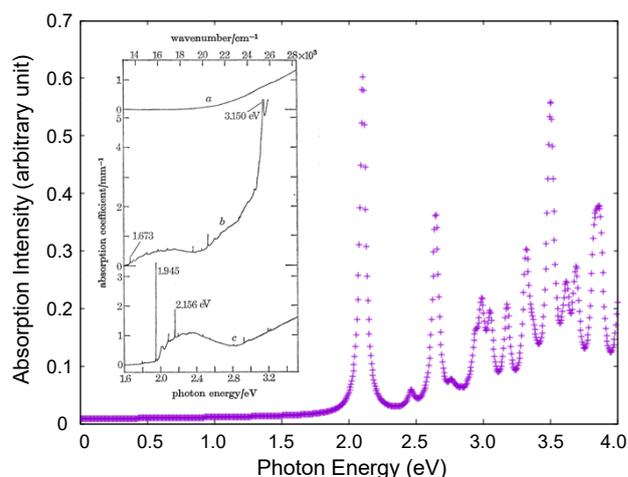


図 28 NV 中心の光吸収スペクトル。TOMBO の GW + Bethe-Salpeter 方程式と実験 (小窓)

[参考文献]

- [1] Hideo Kosaka\*, Naeko Niikura, “Entangled Absorption of a Single Photon with a Single Spin in Diamond” , Physical Review Letters, 114, 053603 (2015).
- [2] 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).
- [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] Kodai Nagata, Hideo Kosaka\*, et.al., “Universal holonomic quantum gates over geometric spin qubits with polarised microwaves” , Nature Communications, 9, 3227 (2018).
- [6] Kazuya Tsurumoto, Hideo Kosaka\*, et.al., “Quantum teleportation-based state transfer of photon polarization into a carbon spin in diamond”, Communications Physics (Nature publishing), 2, 74 (2019).
- [7] 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]

本連携課題は、サブ課題Aとサブ課題Bの連携により、アモルファス固体の破壊現象をマルチスケールの手法を用いて解析するものである。この現象においては、亀裂先端部分での原子スケールでのボンドの切断現象というマイクロな現象と、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いうマクロ現象がカップルしたマルチスケールの共同現象である。サブ課題Aの阪大・尾方グループによるマイクロな分子動力学(MD)シミュレーションは系のサイズの影響を大きく受けており、サブ課題Bの開発するMSSPとの連成によって長距離の弾性場の効果を取り入れることで、問題を回避できると期待される。

### [研究成果]

弾塑性体のモデルとしては MD シミュレーションから計算された構成方程式のモデルを用いて(図 29)、MSSP によるマルチスケールシミュレーションを実施した[1-4]。MSSP と MD とで、パラメタをそろえて同様の条件でのシミュレーションを行った結果の比較が図 30 に示されている。障害物の前方(図の右側)で応力の集中が生じ、MSSP では破壊が進行した。MD シミュレーションの系は、アモルファス固体に相当しており、障害物によるボンドの破断後も再結合が可能であるのに対して、MSSP ではいったん切れたボンドは再結合しないとしているため、障害物後方のふるまい(図の左側)に MSSP と MD で差がみられている[1-4]。

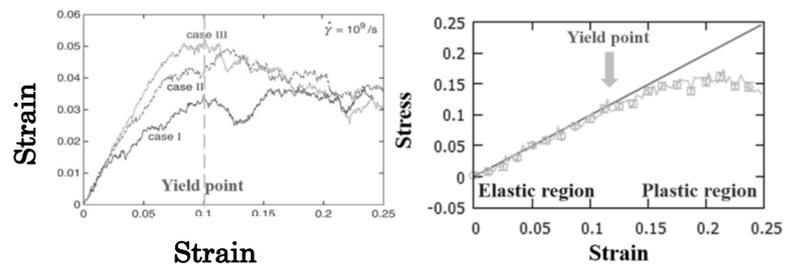


図 29 弾塑性体の応力-ひずみ関係の(a)MD シミュレーションの結果と(b)マイクロシミュレータとしてダンベルモデルを用いたMSSPによるMDの結果のデータ同化。

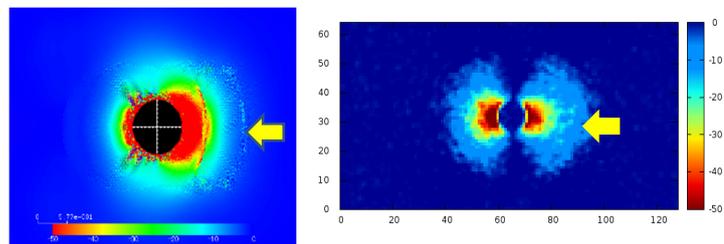


図 30 障害物を過ぎる弾塑性体の破壊現象のシミュレーションの応力分布の結果の比較。(a)MSSPによるマルチスケールシミュレーションの結果と(b)MDシミュレーションによる結果。矢印の方向に弾塑性体は移動している。

### [参考文献]

- [1] 川勝年洋, 第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値, 秋葉原コンベンションホール, 2020/2/17.
- [2] 森井洋平, 川勝年洋, セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル No. 24」, 東北大学金属材料研究所, 2019/10/29.
- [3] 森井洋平, 川勝年洋, 第68回高分子討論会, 福井大学 文京キャンパス, 2019/9/25.
- [4] Youhei Morii, Toshihiro Kawakatsu, 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10), City University of Hong Kong, 2019/7/24.

## 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。サブ課題Bでは、微視的スケールの分子動力学シミュレーションを用いて評価さ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)で活用するマルチスケールシミュレーションプラットフォーム(MSSP)の開発が進められており、「富岳」における活用が期待されている。

マルチスケールシミュレーションを効率化し、MSSP が現実的に適用可能な対象を拡げていくには、効果的な粗視化手法の開発が不可欠である。そこで本連携課題では、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法に基づく情報圧縮の手法が、粗視化手法開発にどう活用できるかをMSSP完成に先駆けて調査すべく、非平衡大自由度系を記述するより簡単なモデルを舞台に研究を展開した。

### [研究成果]

微視的変数の時間発展から巨視的変数の振る舞いへの粗視化について考察するため、結合写像格子を取り上げた。結合写像格子は、偏微分方程式と並んで空間的な広がりを持つ系を研究する代表的な道具立てであり、空間的に隣接したサイト同士が相互作用しあいながら時間発展する力学系である。時間発展の規則は微視的な力学変数に関して定められるが、物理的に興味を持たれるのは、微視的な力学変数の値自体ではなく、寧ろそれから導き出される系の巨視的な状態にある。粗視化を達成するには、与えられた微視的な時間発展規則を用いて、巨視的な状態配置の確率分布の時間発展を記述する演算子(転送作用素)を構成することが必要となる。しかし、系が取り得る巨視的な状態配置の数はサイト数に関して指数関数的に増大するため、愚直な方法では極めて小さいサイズの系しか扱うことができない。我々は、この状態配置数の指数関数的増大を克服する手段としてテンソルネットワーク法に着目した。すなわち、空間1次元の結合写像格子において、転送作用素が行列積演算子(MPO)で近似し、MPOのコアとなる行列要素を小さいサイズの系の短時間シミュレーションから推定した。これは、TNを利用した機械学習・情報抽出に基づくマルチスケールダイナミクス計算のコードである。さらに、これを一般には履歴依存現象などを示すモデル系として結合写像格子モデルに適用し、得られたMPOを用いて得られる巨視的な状態の時間発展と、モデルを直接時間発展させて得られるそれを比較することができる。非平衡臨界現象を示す結合写像格子において比較を行った結果、近似的に得たMPOモデルは、元のモデルが示す臨界現象のスケールリング則の再現に成功した。このアプローチの長所は、状態配置の分布を直接時間発展させることができることにある。これを生かして、吸収状態転移を示す大自由度確率モデルで、2サイト間の相互情報量やサイト間の情報の流れを定量化する指標として知られる(pairwise) transfer entropyの時間発展を、MPOを用いて計算した。その結果、相互情報量やtransfer entropyの時間変化が、制御変数に依存する特徴時間を境目に振る舞いが定性的に変化することを見出した。これは、「相」形成過程に対する情報の観点からのアプローチの有効性を示唆する。

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： 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]

自然界に秘められた複雑な関係を表す概念として、添え字を持たないスカラー量( $a$ )、添え字を1個持つベクトル量( $a_i$ )、添え字を2個持つ行列( $a_{ij}$ )の上位概念として、任意個の添え字を持つテンソル量( $a_{i_1 j_1 \dots p q r \dots}$ )が定義される。テンソル量は膨大な数の成分により複雑系の記述を可能にするが、成分間の特  
に密な関係に着目することにより、少数個の添え字を持った小さなテンソルたちのネットワークとして近似できる。テンソルネットワーク近似は、量子多体理論、脳科学、機械学習など複雑系を扱う理論や計算で体系的かつ効率的な近似法として注目を集めている。平成30年度には、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新しい研究の芽を育む学際研究会をC-D連携で開催した。その成果は令和元年度にサブ課題Cおよびサブ課題Dそれぞれの「富岳」成果創出加速プログラム申請にも反映された。本連携課題では、サブ課題Cとサブ課題Dの連携により、テンソルネットワークの新計算法、高圧物理学への応用、さらにそれらを越えた新しい学際領域の開拓に挑戦することを目指す。

(1) **カノニカル集団平均**：量子統計力学において観測量  $O$  の逆温度  $\beta$  におけるカノニカル集団平均は

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H} O]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}$$

と計算される。Random Vector 法[1]では状態和の計算を Random Vector  $|\xi\rangle$  [2]を使って

$$\langle O \rangle = \frac{\langle\langle \langle \xi | e^{-\beta H/2} O e^{-\beta H/2} | \xi \rangle \rangle\rangle}{\langle\langle \langle \xi | e^{-\beta H/2} e^{-\beta H/2} | \xi \rangle \rangle\rangle}, \quad |\xi\rangle = [\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_M]^t$$

と確率的・近似的・効率的に評価する。ただし、 $\xi_i$  は平均0分散1の独立同一分布の複素確率変数である。平成30年度にこの手法は Random Tensor Network を導入することにより Tensor Network 形式へ拡張された[3]。

$$\langle O \rangle = \frac{\langle\langle \langle \Xi | e^{-\beta H/2} O e^{-\beta H/2} | \Xi \rangle \rangle\rangle}{\langle\langle \langle \Xi | e^{-\beta H/2} e^{-\beta H/2} | \Xi \rangle \rangle\rangle}, \quad |\Xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d^{N-1}}} \sum_{\sigma} \sum_{\mu_1 \dots \mu_{N-1}} \xi_{\mu_1}^{\sigma_1} \xi_{\mu_2}^{\sigma_2} \dots \xi_{\mu_{N-2} \mu_{N-1}}^{\sigma_{N-1}} \xi_{\mu_{N-1}}^{\sigma_N} |\sigma\rangle$$

上式では1次元スピン系のボンド次元  $d$  の MPS 近似を例として挙げた。ただし、 $\xi_{\mu}^{\sigma}$  は平均0分散1の独立同一分布の複素確率変数である。本課題では、この手法でこれまでにない大規模並列計算を可能にするように Random Tensor Network サンプリングについて MPI 並列化を試みる。

(2) **固体酸素の電子状態**：地球内部には珪酸塩の構成元素として酸素が豊富に存在するが、その基礎として本研究では端物質である固体酸素  $\epsilon$  相の K 殻 XRS スペクトルを第一原理計算により解明する。固体酸素  $\epsilon$  相の磁性を理論的に調べる過程で取りわけスピン偏極計算において GGA+U 法が破綻することが明らかになった[4, 5]。そこで各原子に付随する局在基底をもちいた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[6]を検討した。その結果、3次元系においては計算量の爆発を防ぐ手法の開発が必要であることがわかった。いっぽうスピン偏極した GGA+U 法に関する問題は、より正確な SCAN 密度汎関数[7]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[4]。そこで本課題では、SPring-8 を用いて  $\epsilon$  相の XRS 測定を行い、SCAN 密度汎関数を用いた計算により固体酸素の圧力誘起金属化現象の詳細を明らかにすることを目的とする。

**[研究成果]**

(1) **カノニカル集団平均**：従来法である METTS 法[8]における量子状態の総和を量子並列化することにより、並列性能で凌駕する Random Tensor Network 法を導いた[9]。それを用いて1次元スピン 1/2 反強磁性ハイゼンベルク鎖 ( $N_{\text{spin}}=100$ ) 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た(図 31)。従来法である METTS 法今後テンソルネットワーク法における各種有限温度計算で活用されることが期待される。

(2) **固体酸素の電子状態**：100 万気圧で酸素が金属化することに伴う電子状態の変化を大型放射光施設 SPring-8 における X 線ラマン散乱測定とスーパーコンピュータ「京」における電子状態計算の連携により解明した[4, 10] (図 32)。

なお、上記のうち参考文献[3, 4, 9, 10]は令和元年度の本課題成果を含む。

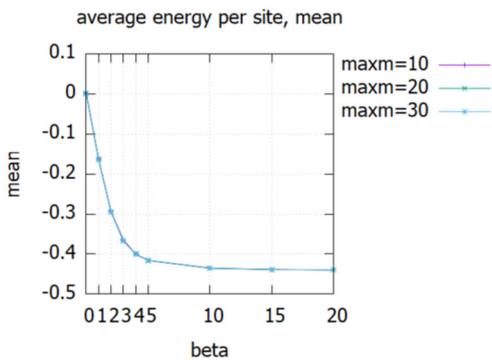


図 31 スピン 1/2 反強磁性ハイゼンベルク鎖 ( $N=100$ ) のサイト当たりの平均エネルギーの温度依存性。最大ボンド次元が 10, 20, 30 の場合

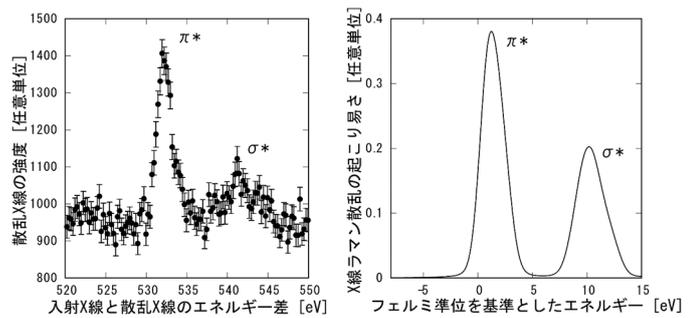


図 32 金属酸素の X 線ラマン散乱スペクトル。左：実験、右：計算

**[参考文献]**

[1] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. Lett. 90, 047203 (2003).  
 [2] T. Iitaka, and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. E 69, 057701 (2004).  
 [3] 飯高敏晃, in 日本物理学会 2019 年秋季大会岐阜, (2019), pp. 11aK25.  
 [4] L. T. Anh et al., Sci. Rep. 9, 8731 (2019).  
 [5] E. B. Linscott et al., Phys. Rev. B 98, 235157 (2018).  
 [6] S. Szalay et al., Int. J. Quantum Chem. Quantum Biol. Symp. 115, 1342 (2015).  
 [7] J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 115, 036402 (2015).  
 [8] S. R. White, Phys. Rev. Lett. 102, 190601 (2009).  
 [9] T. Iitaka, arXiv:2006.14459 (2020).  
 [10] H. Fukui et al., Proceedings of the National Academy of Sciences, 201905771 (2019).

#### 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
	国立大学法人大阪大学	大学院理学研究科 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	理工研究域機械工学系 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 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
Supercomputer Post-K Project "Challenge of Basic Science" in Japan and It's Recent Outcomes of Tribo-Wear Dynamics Induced by Chemical Reactions (招待講演)	Momoji Kubo	2019 Materials Research Society Spring Meeting (Phoenix/USA)	H31.4	国外
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」(招待講演)	久保百司	ナノ学会第17回大会(かごしま県民交流センター/鹿児島)	R1.5	国内
マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーション技術(招待講演)	久保百司	シーエムシーリサーチセミナー(ちよだプラットフォームスクウェア/東京)	R1.5	国内
ケイ素系セラミックスが水中で発現する超低摩擦メカニズム: 機械におけるなじみ現象の理解に向けた計算と実験の連携(口頭発表)	大谷優介	第22回 理論化学討論会(北海道大学/北海道)	R1.5	国内

マテリアルズインフォマテイクスの主幹となる計算科学シミュレーション技術 (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)	R1.6	国内
スーパーコンピュータを活用した超大規模トライボケミカル反応シミュレーション (招待講演)	久保百司	東北大学先端自動車トライボロジー材料研究講座 研究見学会 (東北大学青葉山キャンパス/仙台)	R1.7	国内
量子分子動力学法を活用した半導体プロセスシミュレーション (招待講演)	久保百司	日本学術振興会第69委員会7月期研究会 (東北大学多元物質科学研究所/仙台)	R1.7	国内
Introduction of New Supercomputer “MASAMUNE-IMR” and Its Application to Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulation on Material Fracture and Wear (招待講演)	Momoji Kubo	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Multiscale Simulation Methods in Complex Fluids (招待講演)	Youhei Morii, Toshihiro Kawakatsu	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
マテリアルズインフォマテイクスの基盤となる「計算科学シミュレーション技術」 (招待講演)	久保百司	サイエンス&テクノロジーセミナー (大田区産業プラザ/東京)	R1.7	国内
サブ課題A「破壊とカストロフィ」の進捗と体制 (口頭発表)	久保百司	第3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)	R1.8	国内

亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱える大規模シミュレーションコードの開発（口頭発表）	久保百司	第3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）	R1.8	国内
Investigation on Stress Corrosion Cracking Process of Polycrystalline（招待講演）	Narumasa Miyazaki, Chang Liu, Qian Chen, Momoji Kubo	ICPAC Yangon 2019 (Yangon/Myanmar)	R1.8	国外
マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーション技術（招待講演）	久保百司	シーエムシーリサーチセミナー（ちよだプラットフォームスクウェア/東京）	R1.8	国内
Reactive Molecular Dynamics Simulation of Crack Propagation Process of High Entropy Alloy under Pressurized High Temperature Water（口頭発表）	Narumasa Miyazaki, Chang Liu, Qian Chen, Honami Yanagisawa, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo	PRICM10 (Xi'an/China)	R1.8	国外
1億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型応力腐食割れ過程の検討（口頭発表）	宮崎成正、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司	金属学会2019年秋季大会（岡山大学津島キャンパス/岡山）	R1.9	国内
Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulations on Chemical-Reactions -Induced Wear and Destruction Processes of Materials（口頭発表）	Momoji Kubo	Tribochemistry Hakodate 2019 (Hokkaido/Japan)	R1.9	国外

Molecular Dynamics Simulations on Friction and Wear Mechanism of Polymer Brush (口頭発表)	Momoji Kubo	International Tribology Conference Sendai 2019 (Sendai/Japan)	R1.9	国外
Molecular Dynamics and Friction Experiment Study on Super-Low Friction Mechanism of Silicon-Based Ceramics in Water Lubrication (口頭発表)	Yusuke Ootani	International Tribology Conference Sendai 2019 (Sendai/Japan)	R1.9	国外
高温水環境におけるチタン多結晶の表面酸化反応と粒界型応力腐食割れ過程の分子動力学解析 (口頭発表)	宮崎成正、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司	第124回触媒討論会 (長崎大学文教キャンパス/長崎)	R1.9	国内
粗視化分子動力学法を用いた持続応力による結晶性高分子の変形と破壊 (口頭発表)	樋口祐次	日本物理学会 2019年秋季大会 (岐阜大学/岐阜)	R1.9	国内
大規模粗視化シミュレーションによる結晶性高分子の物性測定 (口頭発表)	樋口祐次	第68回高分子討論会 (福井大学文京キャンパス/福井)	R1.9	国内
高分子を含む複雑流動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68回高分子討論会 (福井大学文京キャンパス/福井)	R1.9	国内
化学反応が誘起する材料劣化・摩耗・破壊の大規模分子動力学シミュレーション (招待講演)	久保百司	触媒・電池元素戦略研究拠点第15回公開シンポジウム (京都大学桂キャンパス/京都)	R1.10	国内
Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Wear Processes (招待講演)	Momoji Kubo	Tohoku University and Shanghai University Jointed Symposium on Materials Research (Shanghai/China)	R1.10	国外

Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulations on Stress Corrosion Cracking (招待講演)	Momoji Kubo	International Conference on Materials Service Performance in Nuclear Powerplant (Shanghai/China)	R1.10	国外
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の開発 (招待講演)	村島隆浩、森井洋平、川勝年洋	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019 (東北大学金属材料研究所/仙台)	R1.10	国内
複雑流動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	セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル No. 24」 (東北大学金属材料研究所/仙台)	R1.10	国内
トライボロジープロセスのマルチフィジックス・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	第48回薄膜・表面基礎講座 (2019) (京都大学桂キャンパス/京都)	R1.11	国内
Superlarge-Scale Molecular Dynamics Simulations on Fracture and Degradation Process of Materials (招待講演)	Momoji Kubo	The 5th EMN Meeting on Computation and Theory (Port Louis/Mauritius)	R1.11	国外
Reactive Molecular Dynamics Simulation of Intergranular Stress Corrosion Cracking Process of FeNiCr based High Entropy Alloy (口頭発表)	Narumasa Miyazaki, Chang Liu, Qian Chen, Momoji Kubo	Materials Research Meeting 2019 (MRM2019) (Yokohama/Japan)	R1.12	国外

Large-Scale Molecular Dynamics Simulations on Friction and Wear Processes of Diamond-like Carbon Materials (招待講演)	Momoji Kubo	EMN Fall Hong Kong Meeting (Chengdu/China)	R1.12	国外
シリコン系セラミックスの摩擦界面で自己形成する潤滑膜の分子動力学シミュレーション解析 (口頭発表)	大谷優介	第33回 分子シミュレーション討論会 (名古屋市公会堂/名古屋)	R1.12	国内
Mechanical Properties of Semicrystalline Polymers at the Molecular Level by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation (招待講演)	Yuji Higuchi	The Second International Conference of Polymeric and Organic Materials in Yamagata University (Yamagata/Japan)	R1.12	国外
マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーション技術 (招待講演)	久保百司	シーエムシーリサーチセミナー (ちよだプラットフォームスクウェア/東京)	R2.1	国内
マテリアルズインフォマティクスの基盤となる「計算科学シミュレーション技術」 (招待講演)	久保百司	サイエンス&テクノロジーセミナー (きゅりあん/東京)	R2.1	国内
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」 (口頭発表)	久保百司	第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～ (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	国内
化学反応を考慮可能な超大規模分子動力学シミュレーションによる応力腐食割れ現象・破壊ダイナミクスの解明 (ポスター発表)	久保百司	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会 (第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～) (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	国内

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 (ポスター発表)	川勝年洋	ポスト「京」重点課題 (7)・萌芽的課題成果報告会 (第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ! 計算データの価値～) (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	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材料設計事例 (招待講演)	久保百司	情報機構セミナー (きゅりあん/東京)	R2.3	国内
酸化膜を有するナノ多結晶チタンにおける引張変形挙動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、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司	2020年度精密工学会春季大会学術講演会 (東京農工大学小金井キャンパス/東京)	R2.3	国内
マテリアルズインフォマティクスの主軸を担う計算科学シミュレーション技術の基礎と材料設計への応用 (招待講演)	久保百司	R&D支援センターセミナー (江東区産業会館/東京)	R2.3	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
Graphitization Dynamics of DLC under Water Lubrication Revealed by Molecular Dynamics Simulation	J. Zhang, Y. Wang, Q. Chen, Y. Su, J. Xu, Y. Ootani, N. Ozawa, K. Adachi, and M. Kubo	J. Comput. Chem., Jpn., 18(2), 103-104 (2019).	R1.7	国内

Development of Coarse-Grained Molecular Dynamics Friction Simulator and Its Application to Bottlebrush Polymer	S. Uehara, Z. Liu, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa, and M. Kubo	J. Comput. Chem., Jpn., 18(2), 105-107 (2019).	R1.7	国内
Cesium Desorption Mechanism in Cs <sub>0.33</sub> WO <sub>3</sub> by First-Principles Molecular Dynamics Calculations	S. Yoshio, K. Adachi, and M. Kubo	J. Appl. Phys., 126(7), 073101 (2019).	R1.8	国外
Stress Transmitters at the Molecular Level in the Deformation and Fracture Processes of the Lamellar Structure of Polyethylene via Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations	Y. Higuchi	Macromolecules, 52(16), 6201-6212 (2019).	R1.8	国外
Prediction of Macroscopic Properties of Diamond-like Carbon from Atomic-Scale Structure	J. Xu, Y. Wang, Y. Cen, B. Xing, X. Zheng, Y. Ootani, and M. Kubo	Journal of Physical Chemistry C, 123(40), 24609-24614 (2019).	R1.9	国外
Coupling Finite Element Method with Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) for Hierarchical Multiscale Simulations	T. Murashima, S. Urata, S. Li	European Physical Journal B, 92(7), 211/1-8 (2019).	R1.9	国外

Triboemission of Hydrocarbon Molecules from Diamond-like Carbon Friction Interface Induces Atomic-Scale Wear	Y. Wang, N. Yamada, J. Xu, J. Zhang, Q. Chen, Y. Ootani, Y. Higuchi, N. Ozawa, M. -I. De Barros Bouchet, J. M. Martin, S. Mori, K. Adachi, and M. Kubo	Sci. Adv., 5(11), eaax9301 (2019).	R1.11	国外
Proposal of a New Formation Mechanism for Hydrogenated Diamond-like Carbon Transfer Films: Hydrogen-Emission-Induced Transfer	Y. Wang, J. Xu, Y. Ootani, N. Ozawa, K. Adachi, and M. Kubo	Carbon, 154(-), 7-12 (2019).	R1.12	国外
ミクروسケールとマクروسケールのシミュレーション連成による高分子材料系のマルチスケールシミュレーション	村島隆浩	日本化学会情報化学部会誌, 37(4), 87-93 (2019)	R1.12	国内
Multiscale Modeling of Plasticity in Amorphous & Polymeric Materials	S. Li, S. Urata, T. Murashima	IACM Expressions, 46(10), 10-13 (2020)	R2.1	国外

Self-Formed Double Tribolayers Play Collaborative Roles in Achieving SuperLow Friction in an Aqueous Environment	Y. Ootani, J. Xu, N. Takahashi, K. Akagami, S. Sakaki, Y. Wang, N. Ozawa, T. Hatano, K. Adachi, M. Kubo	Journal of Physical Chemistry C, 124(15), 8295-8303 (2020).	R2.3	国外
A Molecular Dynamics Study on Alumina/Carbon Nanotube Composite: How Does Annealing Affect Mechanical Properties?	Y. Su, J. Zhang, Q. Chen, Y. Wang, N. Miyazaki, Y. Ootani, N. Ozawa, and M. Kubo	J. Comput. Chem., Jpn., 18(5), 259-262 (2020).	R2.4	国内

## その他の実績

### 1. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

名称	日付	説明	備考
プレスリリース	R1.11.16	高耐久性ダイヤモンドライクカーボンの設計指針を提案—スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果	
日本経済新聞（電子版）	R1.11.16	東北大、高耐久性ダイヤモンドライクカーボンの設計指針を提案	<a href="https://www.nikkei.com/article/DGXLRSF523421_U9A111C100000/">https://www.nikkei.com/article/DGXLRSF523421_U9A111C100000/</a>
日経産業新聞	R1.12.2	硬質炭素材の摩耗原因を解明	
日刊工業新聞	R1.12.10	DLC摩耗減らす 東北大スーパーコンピュータで設計指針	

## 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 大学院理学研究科

## 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
Accelerated creep and inverse Omori law: interplay of randomness and instability (ポスター発表)	波多野恭弘	European Geoscience Union General Assembly (Wien/Austria)	H31.4	国外
地震誘発の物理：破壊準備過程における応力擾動効果（招待講演）	波多野恭弘	Japan Geoscience Union Meeting 2019（幕張メッセ/千葉）	R1.5	国内
滑りの不安定化における普遍的加速過程（招待講演）	波多野恭弘	Japan Geoscience Union Meeting 2019（幕張メッセ/千葉）	R1.5	国内
材料科学と地震学の連携研究で解明する断層摩擦法則（口頭発表）	波多野恭弘	第3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）	R1.8	国内
Can network theory quantify seismicity? : From tremors to fast earthquakes (口頭発表)	田中宏樹	International Joint Workshop on Slow Earthquakes 2019 (Sendai/Japan)	R1.9	国外

Role of rheological heterogeneity on depth-dependent modes of slow earthquakes (口頭発表)	安藤亮輔	International Joint Workshop on Slow Earthquakes 2019 (Sendai/Japan)	R1.9	国外
Effects of 3-D fault geometry on rupture dynamics: Simulation of the 2019 Ridgecrest, CA, earthquakes	安藤亮輔	American Geophysical Union Fall meeting 2019 (San Francisco/USA)	R1.12	国外
Complexity of earthquake time series as probed by visibility graph (招待講演)	波多野恭弘	FRACMEET2019 (Amaravati/India)	R2.2	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
Sensitivity of Acoustic Emission Triggering to Small Pore Pressure Cycling Perturbations During Brittle Creep	K. Chanard, A. Nicolas, T. Hatano, F. Petrelis, S. Latour, S. Vinciguerra	Geophysical Research Letters, 46(13), 7414-7423 (2019).	R1.7	国外
Universal Relaxation Dynamics of Sphere Packings below Jamming	A. Ikeda, T. Kawasaki, L. Berthier, K. Saitoh, and T. Hatano	Physical Review Letters, 124(5), 58001/1-5 (2019).	R1.9	国内
Stress Relaxation above and below the Jamming Transition	K. Saitoh, T. Hatano, A. Ikeda, and B. P. Tighe	Physical Review Letters, 124(11), 118001/1-5 (2020).	R2.3	国外

Creep failure in a threshold activated dynamics: Role of temperature during a sub-critical loading	Subhadeep Roy, Takahiro Hatano	Physical Review Research, 2(2), 023104 (2020).	R2.3	国外
Dynamic rupture simulation of 2018, Hokkaido Eastern Iburu earthquake: Role of non-planar geometry	Hisakawa, T., R. Ando, T. E. Yano, M. Matsubara	Earth, Planets and Space, 72(-), 36 (2020).	R2.3	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
原子構造の励起・緩和機構とアモルファス金属の変形のひずみ速度弱化メカニズム (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	日本金属学会2019年秋期講演大会 (岡山大学/岡山)	R1. 9	国内
Compressed exponential relaxation originated 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	Materials Research Meeting 2019 (MRS Fall Meeting 2019) (Boston/USA)	R1. 12	国外
材料科学の基づく地震のモデリング (招待講演)	石井明男	日本機械学会特別講演会「材料科学と地震学の融合を目指して」(金沢大学/石川)	R2. 1	国内

材料と岩石のすべり弱化メカニズムの解明に向けて～構造の励起・緩和とすべり弱化～（ポスター発表）	石井明男、新山友暁、波多野恭弘、下川智嗣、尾方成信	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会（第9回材料系ワークショップ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～）（秋葉原コンベンションホール/東京）	R2.2	国内
---	---------------------------	--	------	----

その他の実績

1. 受賞等

名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別
日本機械学会奨励賞（研究）	石井明男	日本機械学会	R2.3	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 国立大学法人金沢大学

## 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
ナノ組織材料の変形と強化機構の解明に向けた原子シミュレーション (招待講演)	下川智嗣	日本鉄鋼協会第3回若手研究グループ「多様な先端観察・測定法を用いた組織の定量と力学特性解析への適用」(能登いこいの村/金沢)	R1.5	国内
材料の機械的性質と塑性現象に潜む地震に類似した統計的性質の関係 (口頭発表)	下川智嗣、新山友暁、尾方成信、石井明男、波多野恭弘	第3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)	R1.8	国内
Deformation mechanism and mechanical properties of a binary system through atomic simulations (口頭発表)	Tomotsugu Shimokawa, Tomoaki Niiyama	ISAM4-2019 The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (Erlangen-Nürnberg/Germany)	R1.8	国外

Atomis simulation of mechanical properties of nanostructured materials -Mechanical properties vs. Statistical properties- (口頭発表)	Tomotsugu Shimokawa, Tomoaki Niiyama	Joint symposium of kanazawa university and Six Russian Universities on Advanced Sci. & Tech. (Kanazawa/Japan)	R1.8	国外
界面を介した塑性現象がナノ組織材料の力学特性に与える影響 (招待講演)	下川智嗣、新山友暁	日本金属学会2019年秋期講演大会 (岡山大学/岡山)	R1.9	国内
固体材料に内在する統計的性質と力学特性の関係 (ポスター発表)	園田郁未、下川智嗣、新山友暁	日本機械学会第32回計算力学講演会 (東洋大学/埼玉)	R1.9	国内
Atomic Simulation of Deformation and Strength of Bimodal Structure Metals (招待講演)	Tomotsugu Shimokawa, Tatsuya Hasegawa	Harmonic 2019 4th International Symposium on Hetero Structure and Advanced Materials (Shiga/Japan)	R1.10	国外
Deformation Mechanism and Mechanical Properties of Mixed Amorphous-Crystalline System through Atomic Simulations (口頭発表)	Tomotsugu Shimokawa, Tomoaki Niiyama	Materials Research Meeting 2019 (MRM2019) (Yokohama/Japan)	R1.12	国外
固体材料における地震現象に類似した塑性変形挙動 (招待講演)	新山友暁	日本材料学会北陸信越支部特別講演会「材料科学と地震学の融合を目指して」 (金沢大学/石川)	R2.1	国内
固体材料の機械的性質と統計的性質の関係 (ポスター発表)	下川智嗣、新山友暁、尾方成信、石井明男、波多野恭弘	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会 (第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～) (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	国内

材料科学と地震学の協奏： 融合分野創出へ向けて（ポ スター発表）	波多野恭弘、 安藤亮輔、小 澤創、石井明 男、尾方成 信、下川智 嗣、新山友暁	ポスト「京」重点課題 (7)・萌芽的課題成果報告 会（第9回材料系ワークシ ョップ～「富岳」で飛躍 へ！計算データの価値 ～）（秋葉原コンベンシ ョンホール/東京）	R2.2	国内
材料と岩石のすべり弱化メ カニズムの解明に向けて～ 構造の励起・緩和とすべり 弱化～（ポスター発表）	石井明男、新 山友暁、波多 野恭弘、下川 智嗣、尾方成 信	ポスト「京」重点課題 (7)・萌芽的課題成果報告 会（第9回材料系ワークシ ョップ～「富岳」で飛躍 へ！計算データの価値 ～）（秋葉原コンベンシ ョンホール/東京）	R2.2	国内
地震現象に類似した固体塑 性挙動に対する原子スケ ール解析（口頭発表）	新山友暁	第9回材料系ワークショッ プ～「富岳」で飛躍へ！ 計算データの価値～（秋 葉原コンベンションホ ール/東京）	R2.2	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
Structural relaxation affecting the shear- transformation avalanches in metallic glasses	Tomoaki Niiyama, Masato Wakeda, Tomotsugu Shimokawa, Shigenobu Ogata	Physical Review E, 100(4), 043002/1-10 (2019).	R1.10	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 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

## 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
液体金属脆化における元素選択性と水素脆化：第一原理計算（口頭発表）	山口正剛	日本鉄鋼協会シンポジウム（岡山大学／岡山）	R1.9	国内
液体金属脆化における元素選択性と水素脆化：第一原理計算（ポスター発表）	山口正剛	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会（第9回材料系ワークショップ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～）（秋葉原コンベンションホール/東京）	R2.2	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
カルマン渦に対するキャビテーションの影響（ポスター発表）	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「計算物質科学の新展開」（東京大学物性研究所/千葉）	H31.4	国内
Searching for the Kitaev spin liquid by the tensor network approach（ポスター発表）	金子隆威、大久保毅、H.-Y. Lee、山地洋平、川島直輝	物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」（東京大学物性研究所/千葉）	H31.4	国内
Kitaev spin liquids in a compact tensor network representation（口頭発表）	Hyun-Yong Lee	Exotic Magnetic Phases in Quantum Many-body Systems (Daejeon/Korea)	H31.4	国外
Tensor Network States for Lattice Systems（口頭発表）	Naoki Kawashima	International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (FCES19) (Tokyo/Japan)	R1.5	国外

Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Quantum Antiferromagnets (口頭発表)	Toru Sakai	International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (FCES19) (Tokyo/Japan)	R1.5	国外
Tensor network approach to the Kitaev spin liquid (ポスター発表)	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (FCES19) (Tokyo/Japan)	R1.5	国外
Gapless Kitaev Spin Liquid to Loop and String Gases through Tensor Networks (口頭発表)	Hyun-Yong Lee	Physics Seminar (Daejeon/Korea)	R1.6	国外
Numerical Diagonalization Study on Frustrated Quantum Spin Systems (招待講演)	Toru Sakai	FRONTIERS OF STATISTICAL PHYSICS (FSP2019) (Tokyo/Japan)	R1.6	国外
Calculation of higher-order moments by higher-order tensor renormalization group (ポスター発表)	Satoshi Morita	FRONTIERS OF STATISTICAL PHYSICS (FSP2019) (Tokyo/Japan)	R1.6	国外
Tensor network study of the Kitaev spin liquid (ポスター発表)	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	FRONTIERS OF STATISTICAL PHYSICS (FSP2019) (Tokyo/Japan)	R1.6	国外
低次元磁性体のスピネマティック相 (口頭発表)	坂井徹	J-Physics 地域研究会 (東京大学/東京)	R1.6	国内
エネルギースケール変形から SSD へ (口頭発表)	西野友年	サイン2乗変形とその周辺 2019 (理化学研究所/和光市)	R1.7	国内

Introduction (口頭発表)	Naoki Kawashima	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Gapless Kitaev Spin Liquid to Loop and String Gases through Tensor Networks (口頭発表)	Hyun-Yong Lee	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Boundary tensor renormalization group (口 頭発表)	Shunpei Iino	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Tensor network technique for stochastic process (招待講演)	Kenji Harada	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Informational aspect of directed percolation problem (口頭発表)	Kenji Harada	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Numerical Diagonalization Study on Frustrated Magnets (口頭発表)	Toru Sakai	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Improvement of higher- order tensor renormalization group method (招待講演)	Satoshi Morita	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外

Critical behavior of the two-dimensional dodecahedron model (口頭発表)	上田宏	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Phase Transition of the Classical Ising Model on the Sierpinski Carpet (招待講演)	西野友年	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Optimization Schemes in TNS (招待講演)	西野友年	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Statistical Description of Spatially Extended Classical Systems: Semi-bottom-up Approach (口頭発表)	Keiichi Tamai	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
カルマン渦に対するキャビテーションの影響 (ポスター発表)	浅野優太、渡辺宙志、野口博司	つくばソフトマター研究会2019 (高エネルギー加速器研究機構/茨城)	R1.8	国内
サブ課題Dの全体概要と体制 (口頭発表)	川島直輝	第3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)	R1.8	国内
テンソルネットワーク法によるデータ圧縮と量子物性の新しい理解 (口頭発表)	川島直輝	第3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)	R1.8	国内

マルチスケールシミュレーション高速化に向けた大自由度力学系における情報圧縮技術の開発（口頭発表）	玉井敬一、川島直輝、川勝年洋、野口博司	第3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）	R1.8	国内
Abelian and Non-Abelian Chiral Spin Liquids in a Compact Tensor Network Representation（口頭発表）	Hyun-Yong Lee	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.8	国外
Probing the numerical accuracy of the tensor-network representation for the Kitaev spin liquid（口頭発表）	R. Kaneko	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.8	国外
大規模並列化角転送行列繰り込み群を用いた古典スピン系の臨界現象解析（招待講演）	上田宏	第4回 HPC-Phys 勉強会（理化学研究所/神戸）	R1.8	国内
カルマン渦に対するキャビテーションの影響II（ポスター発表）	浅野優太、渡辺宙志、野口博司	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
ナビエ・ストークス方程式の離散化時の角運動量保存の喪失について（口頭発表）	野口博司	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
ランダムビット列を高速に生成するアルゴリズムの開発（口頭発表）	渡辺宙志、森田悟史、藤堂眞治、川島直輝	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
境界のある系のテンソルくりこみ群（口頭発表）	飯野隼平	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
自己学習モンテカルロ法によるサイトランダム二重交換モデルの解析（口頭発表）	幸城秀彦	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内

強く非等方的な臨界点における不変性（口頭発表）	原田健自	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
大きいSに対するハルデンギャップの計算科学的研究（口頭発表）	中野博生、轟木義一、坂井徹	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
球体カゴメ系{W72V30}の磁場中比熱に対するDM相互作用の影響（口頭発表）	井上晃来、福元好志、中野博生	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
フラストレーションのあるリープ格子ハイゼンベルグ反強磁性体における基底状態特性II（ポスター発表）	水口龍之介、広瀬悠平、福元好志、中野博生	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
歪んだダイヤモンド型スピン鎖の磁化プラトー（口頭発表）	上野雄熙、岡本清美、坂井徹	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
歪んだダイヤモンド型スピン鎖におけるalmoklyuchevskite型歪みII（口頭発表）	橘祐汰、岡本清美、坂井徹	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
強磁性桁相互作用をもつ異方的 S=1/2本脚梯子の基底状態相図（口頭発表）	利根川孝、岡本清美、鏑木誠、坂井徹	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
異方性のあるS=2反強磁性鎖の磁化プラトー（口頭発表）	坂井徹、岡本清美、利根川孝	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
角転送行列繰り込み群の有限相関長スケーリングによるエンタングルメントスペクトル解析（口頭発表）	上田宏、奥西巧一、柚木清司、西野友年	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
フラクタル格子上のイジング模型（口頭発表）	西野友年、Jozef Genzor、Andrej Gendiar	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内

Kitaev Spin Liquids in a Compact Tensor Network Representation (口頭発表)	H.-Y. Lee, R. Kaneko, T. Okubo, and N. Kawashima	日本物理学会 2019年秋季大会 (岐阜大学/岐阜)	R1.9	国内
テンソルネットワーク手法を用いたKitaev- $\Gamma$ モデルのスピン液体の解析 (口頭発表)	金子隆威、大久保毅、山地洋平、川島直輝	日本物理学会 2019年秋季大会 (岐阜大学/岐阜)	R1.9	国内
Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Magnets (口頭発表)	Toru Sakai	International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019) (Okayama/Japan)	R1.9	国外
Tensor Network Study of the Stability of the Kitaev Spin Liquid (ポスター発表)	R. Kaneko, T. Okubo, H.-Y. Lee, Y. Yamaji, and N. Kawashima	International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019) (Okayama/Japan)	R1.9	国外
PEPS in details (口頭発表)	Hyun-Yong Lee	Tensor Network States (Pohang/Korea)	R1.10	国外
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	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019 (東北大学金属材料研究所/仙台)	R1.10	国内
結合写像格子系における巨視的ダイナミクスのテンソルネットワークを用いた記述 (口頭発表)	玉井敬一、川島直輝	計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ事業報告会 2019 (東北大学金属材料研究所/仙台)	R1.10	国内

テンソル分解 — 物理計算とデータ科学の接点 —	川島直輝	モビリティ基盤数理の研究 (Step2) 合同課題検討会 (京都大学/京都)	R1.11	国内
Oakforest-PACS で実現する大規模疎行列の厳密対角化計算に基づく科学研究の新展開	中野博生	第6回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会 (THE GRAND HALL/東京)	R1.11	国内
テンソルネットワーク法を用いた拡張Kitaev模型の基底状態探索 (ポスター発表)	金子隆威、大久保毅、H. Y. Lee、山地洋平、川島直輝	第13回物性科学領域横断研究会 (東京大学/東京)	R1.11	国内
Symmetry Protected Topological Phase of S=2 Quantum Spin Chain in Magnetic Field (口頭発表)	T. Sakai, K. Okamoto and T. Tonegawa	International Conference on Topological Materials Science (Kyoto/Japan)	R1.12	国外
Understanding Kitaev-Related Models through Tensor Networks (招待講演)	Naoki Kawashima	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei/Taiwan)	R1.12	国外
New numerical approaches for directed percolation (招待講演)	Kenji Harada	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei/Taiwan)	R1.12	国外
Higher-order tensor renormalization group with the corner transfer matrix (招待講演)	Satoshi Morita	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei/Taiwan)	R1.12	国外

Thermodynamics Properties of Discrete Classical Heisenberg Models on Square Lattice (招待講演)	西野友年	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei/Taiwan)	R1.12	国外
Corner Transfer Matrix and Lattice Unruh Effect for the XXZ Chain (招待講演)	奥西巧一	Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (Taipei/Taiwan)	R1.12	国外
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	第33回分子シミュレーション討論会 (名古屋市公会堂/名古屋)	R1.12	国内
テンソルネットワーク法による量子格子系の解法とその周辺 (招待講演)	川島直輝	シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて (QUCS2019) (京都大学/京都)	R1.12	国内
Spin Nematic Liquids of Low-Dimensional Quantum Spin Systems (口頭発表)	坂井徹	J-Physics 多極子伝導系の物理 領域全体会議 (神戸大学/神戸)	R2.1	国内
低次元量子スピン系のスピンネマティック相 (口頭発表)	坂井徹	第14回 量子スピン系研究会 (あきた芸術村温泉ゆぼぼ/秋田)	R2.1	国内
分子動力学計算による渦と気泡生成、高分子レオロジーのカップリング機構の解析 (ポスター発表)	野口博司、浅野優太、渡辺宙志	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会 (第9回材料系ワークショップ ~「富岳」で飛躍へ! 計算データの価値~) (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	国内

テンソルネットワーク計算によるKitaevスピン液体の研究 (ポスター発表)	金子隆威、大久保毅、H.-Y. Lee、山地洋平、川島直輝	ポスト「京」重点課題 (7)・萌芽的課題成果報告会 (第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～) (秋葉原コンベンションホール/東京)	R2.2	国内
Magnetic Field Induced Competing Phases in Spin-Orbital Entangled Kitaev Magnets (口頭発表)	Li Ern Chern, Ryui Kaneko, Hyun-Yong Lee, Yong-Baek Kim	APS March Meeting 2020 (Denver/USA)	R2.3	国外
Numerical evidence for a continuous phase transition between Neel and valence bond solid phases on a spin-ladder system (口頭発表)	Ogino Takuhiro, Ryui Kaneko, Satoshi Morita, Naoki Kawashima	APS March Meeting 2020 (Denver/USA)	R2.3	国外
円柱列周りのカルマン渦キャビテーション (口頭発表)	浅野優太、渡辺宙志、野口博司	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
ポッツ模型におけるBinder比の非単調な振る舞いについて (口頭発表)	渡辺宙志、森田悟史、本山裕一、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
テンソルネットワーク中のエンタングルメント最適化 (口頭発表)	原田健自	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
Tree Tensor Network を用いた量子系の最適表現 I (口頭発表)	西野友年、橋本豊、上田宏、奥西巧一	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
Tree Tensor Network を用いた量子系の最適表現 II (口頭発表)	橋本豊、西野友年、上田宏、奥西巧一	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内

穴空き2次元イジング模型のエンタングルメント（口頭発表）	山本龍人、西野友年、奥西巧一、森勇登	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
吸収状態転移の情報流れダイナミクス（口頭発表）	玉井敬一、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
テンソルネットワーク手法を用いたハニカム格子上のHeisenberg- $\Gamma$ 模型の基底状態探索（口頭発表）	金子隆威、大久保毅、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
スピンラダー系におけるNeel-VBS連続相転移の数値的検証（口頭発表）	荻野卓啓、金子隆威、森田悟史、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
境界のある系のTensor Network Renormalization（口頭発表）	飯野隼平、森田悟史、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
ポッツ模型におけるBinder比の非単調な振る舞いについて（口頭発表）	渡辺宙志、本山裕一、森田悟史、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
変分モンテカルロ法で非対角相関を取り入れる新たな方法（口頭発表）	井戸康太、三澤貴宏	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
Frustration-Induced Supersolid Phases of Extended Bose-Hubbard Model in the Hard-Core Limit（口頭発表）	Wei-Lin Tu, Huan-Kuang Wu, Takafumi Suzuki	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
自己学習交換モンテカルロ法の開発（口頭発表）	幸城秀彦、永井佑紀	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内
スパースモデリング解析接続への虚時間相関情報の導入 II（口頭発表）	本山裕一、吉見一慶、大槻純也、品岡寛	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	国内

角転送行列を用いたテンソルくりこみ群の改良（口頭発表）	森田悟史、川島直輝	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	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
SIMD vectorization for the Lennard-Jones potential with AVX2 and AVX-512 instructions	H. Watanabe and K. M. Nakagawa	Computer Physics Communications, 237(-), 1-7 (2019).	H31.4	国外
Quantized Delta S=2 Excitation Spectra by Confinement in an S=1 Spin Chain	Takafumi Suzuki, and Sei-ichiro Suga	Journal of the Physical Society of Japan, 88(5), 053702/1-3 (2019).	H31.4	国内
Finite-Size Effects on Kármán Vortex in Molecular Dynamics Simulation	Yuta Asano, Hiroshi Watanabe, Hiroshi Noguchi	Journal of the Physical Society of Japan, 88(7), 075003/1-2 (2019).	R1.6	国内
Boundary Tensor Renormalization Group	Shumpei Iino, Satoshi Morita, and Naoki Kawashima	Physical Review B, 100(3), 035449 (2019).	R1.6	国外
量子情報とテンソルネットワーク	西野友年	数理科学, 56(6), 22-28 (2019).	R1.6	国内
Entropy Governed by the Absorbing State of Directed Percolation	Kenji Harada and Naoki Kawashima	Physical Review Letters, 123(9), 090601 (2019).	R1.8	国外

Gapless Kitaev Spin Liquid to Classical String Gas through Tensor Networks	Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Tsuyoshi Okubo, and Naoki Kawashima	Physical Review Letters, 123(8), 087203 (2019).	R1.8	国外
Thermal-transport studies of kagomé antiferromagnets	Minoru Yamashita, Masatoshi Akazawa, Masaaki Shimosawa, Takasada Shibauchi, Yuji Matsuda, Hajime Ishikawa, Takeshi Yajima, Zenji Hiroi, Migaku Oda, Hiroyuki Yoshida, Hyun-Yong Lee, Jung Hoon Han and Naoki Kawashima	Journal of Physics: Condensed Matter, 32(7), 074001/1-11 (2019).	R1.11	国内
Effects of cavitation on Kármán vortexbehind circular-cylinder arrays: A molecular dynamics study	Yuta Asano, Hiroshi Watanabe, Hiroshi Noguchi	Journal of Chemical Physics, 152(3), 34501 (2020).	R2.1	国外

Magnetic field induced competing phases in spin-orbital entangled Kitaev magnets	Li Ern Chern, Ryui Kaneko, Hyun-Yong Lee, and Yong Baek Kim	Physical Review Research, 2(1), 013014/1-9 (2020).	R2.1	国外
Abelian and non-Abelian chiral spin liquids in a compact tensor network representation	Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Tsuyoshi Okubo, and Naoki Kawashima	Physical Review B, 101(3), 035140 (2020).	R2.2	国外
Magnetic field induced quantum phases in a tensor network study of Kitaev magnets	Hyun-Yong Lee, Ryui Kaneko, Li Ern Chern, Tsuyoshi Okubo, Youhei Yamaji, Naoki Kawashima, Yong Baek Kim	Nature Communications, 11(-), 1639 (2020).	R2.4	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
Effect of impurity on post-post-perovskite transition of $MgSiO_3$ by first principles (ポスター発表)	Koichiro Umemoto	Japan Geoscience Union Meeting 2019 (幕張メッセ/千葉)	R1.5	国内
Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions (招待講演)	Ryo Maezono	23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23) (Chiang Mai/Thailand)	R1.6	国外
TOPOTAXIALINTERGROWTHSOF EPSILON-(MG, FE) $_2$ SIO $_4$ IN WADSLEYITE AND RINGWOODITE IN SHOCKED CHONDRITES. (口頭発表)	N. Tomioka, T. Okuchi, M. Miyahara, T. Iitaka, N. Purevjav, R. Tani and Y. Kodama	The 82nd Annual Meeting of The Meteoritical Society 2019 (Sapporo/Japan)	R1.7	国外

Linear-scaling ab initio molecular dynamics study of complex structures of materials with the CONQUEST code (口頭発表)	J. Lin, Z. Raza, D. R. Bowler and T. Miyazaki	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions (招待講演)	Ryo Maezono	XXXI IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2019) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
超高压下における地球惑星構成物質の構造相転移 (口頭発表)	梅本幸一郎	第3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)	R1.8	国内
Electronic structure of dense solid oxygen from insulator to metal (口頭発表)	Hiroshi Fukui, Le The Anh, Masahiro Wada, Nozomu Hiraoka, Toshiaki Iitaka, Naohisa Hirao, Yuichi Akahama, and Tetsuo Irifune	AIRAPT-27 (Rio de Janeiro/Brasil)	R1.8	国外

Machine learning clustering technique applied to X-ray diffraction patterns to distinguish alloy substitutions (招待講演)	Ryo Maezono	European Advanced Materials Congress (27th AMC) IAAM (Stockholm/Sweden)	R1. 8	国外
Materials informatics for polymer crystals with high thermal conductivities (招待講演)	Keishu Utimula, Tom Ichibha, Ryo Maezono, Kenta Hongo	European Advanced Materials Congress (27th AMC) IAAM (Stockholm/Sweden)	R1. 8	国外
A Diffusion Monte Carlo Study on Diffusion Mechanisms of the Point Defects in the Rutile TiO <sub>2</sub> Bulk (招待講演)	Tom Ichibha, Anouar Benali, Kenta Hongo, and Ryo Maezono	European Advanced Materials Congress (27th AMC) IAAM (Stockholm/Sweden)	R1. 8	国外
水素クラスレートハイドレートの第一原理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 2019年秋 季大会 (岐阜大学/岐阜)	R1. 9	国内
形成エネルギー凸包の進化的探索 (口頭発表)	石河孝洋、三宅隆	日本物理学会 2019年秋 季大会 (岐阜大学/岐阜)	R1. 9	国内
Earth & Planetary Materials (to be) Explored by K and Fugaku Computers & Quantum Beamlines (招待講演)	飯高敏晃	R-CCS Café (R-CCS 講堂 /神戸)	R1. 10	国内
進化的アルゴリズムに基づく化学組成・結晶構造同時探索手法の開発と炭素-水素系への適用 (口頭発表)	石河孝洋、三宅隆	第60回高圧討論会 (かでの2・7 北海道立道民活動センター/札幌)	R1. 10	国内
第一原理計算によるMgSiO <sub>3</sub> ポストペロブスカイト分解反応へのアルミニウム不純物の影響 (口頭発表)	梅本幸一郎	第60回高圧討論会 (かでの2・7 北海道立道民活動センター/札幌)	R1. 10	国内

固体酸素の電子状態変化 (口頭発表)	福井宏之、LE The Anh、和田 正弘、平岡 望、飯高敏 晃、平尾直 久、赤浜裕 一、入舩徹男	第60回高圧討論会（か で る2・7 北海道立道民活 動センター/札幌）	R1. 10	国内
First principles calculation of the stability of iron bearing carbonates at high pressure conditions (招待 講演)	Jun Tsuchiya, Risa Nishida, Taku Tsuchiya	Deep Carbon 2019 (Washington, DC/USA)	R1. 10	国外
Search for superconducting ternary hydrides by materials informatics based on evolutionary algorithms (招待講演)	Takahiro Ishikawa, Takashi Miyake	The 22nd Asian Workshop on First- Principles Electronic Structure Calculations (Osaka/Japan)	R1. 10	国外
Effect of impurity on post-post-perovskite transition of MgSiO <sub>3</sub> by first principles (ポスタ ー発表)	Koichiro Umemoto	American Geophysical Union Fall meeting 2019 (San Francisco/USA)	R1. 12	国外
H/D partitioning between forsterite, wadsleyite and ringwoodite : ab initio free energy calculation (ポスター発 表)	Jun Tsuchiya, and Taku Tsuchiya	American Geophysical Union Fall Meeting 2019 (San Francisco/USA)	R1. 12	国外
第一原理計算を用いて物性 量を推定する仕組み（口頭 発表）	Ryo Maezono	2020年年会 公益社団法 人日本セラミックス協会 （明治大学駿河台キャン パス/東京）	R2. 3	国外

新規酸窒化物 $\text{Ca}_{4+x}\text{Y}_{3-x}\text{Si}_7\text{O}_{15+x}\text{N}_{5-x}$ の結晶構造 (口頭発表)	小林亮、安永拓矢、長濱千賀子、加藤英樹、藤井孝太郎、八島正知、本郷研太、前園涼、長田実、垣花真人	2020年年会 公益社団法人日本セラミックス協会 (明治大学駿河台キャンパス/東京)	R2. 3	国外
量子アニーリングを用いた固体中イオン拡散の取扱い (口頭発表)	前園涼、内村慶舟、市場友宏、本郷研太、中野晃佑	第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学四谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外
Ground state determination of $\text{LiVX}_2$ system using Diffusion Monte Carlo (口頭発表)	Genki Imam Prayogo, Aleksey Ushakov, Tom Ichibha, Kenta Hongo, Sergey Streltsov, Ryo Maezono	第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学四谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外
自己符号化器による未知試料のXRD生成 (口頭発表)	内村慶舟、矢野正雄、木本博行、本郷研太、前園涼	第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学四谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外
SHERY: 固溶体モデルのハイスループット生成-Pythonによる実装 (口頭発表)	内村慶舟、中野晃佑、Genki I. Prayogo、本郷研太、前園涼	第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学四谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外
シクロデキストリン包接系の第一原理結合エネルギー評価 (口頭発表)	前園涼、内村慶舟、市場友宏、本郷研太、中野晃佑	第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学四谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外

First principles calculations of superconducting transition temperature of ThCr <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> -type structure (口頭発表)	Gewinner Senderanto Sinaga, Keishu Utimula, Kousuke Nakano, Kenta Hongo, Ryo Maezono	第67回応用物理学会春季 学術講演会 (上智大学四 谷キャンパス/東京)	R2. 3	国外
水素クラスレートハイドレ ートの第一原理分子動力学 シミュレーションIII (口頭 発表)	池田隆司	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内
第一原理量子モンテカルロ 法の最近の進展 I : TurboRVBにおける全電子DFT 計算 (口頭発表)	前園涼、中野 晃佑、Sandro Sorella	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内
ニューラルネットワークを 利用したX線回折データの特 徴量マッピング (口頭発 表)	内村慶舟、本 郷研太、前園 涼	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内
First principles calculations of superconducting transition temperature of ThCr <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> -type structure (口頭発表)	Gewinner Senderanto Sinaga, Keishu Utimula, Kousuke Nakano, Kenta Hongo, Ryo Maezono	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内
シクロデキストリンドッキ ング系の第一原理結合エネ ルギー算定 (口頭発表)	奥村健司、本 郷研太、前園 涼、市場友宏	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内
B-DNAスタッキングにおける 非可算性寄与の第一原理算 定 (口頭発表)	秦肯、市場友 宏、本郷研 太、前園涼	日本物理学会 第75回年 次大会 (2020年) (名古 屋大学/名古屋)	R2. 3	国内

A new ab initio modeling scheme for the ion self-diffusion coefficient applied to the e-Cu <sub>3</sub> Sn phase of the Cu-Sn alloy (口頭発表)	Tom Ichibha, Genki Prayogo, Kenta Hongo, Ryo Maezono	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
第一原理量子モンテカルロ法の最近の進展 II : TurboRVBにおける全電子DMC計算 (口頭発表)	中野晃佑、前園涼、Sandro Sorella	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	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
qha: A Python package for quasiharmonic free energy calculation for multi-configuration systems	T. Qin, Q. Zhang, R. M. Wentzcovitch, and K. Umemoto	Computer Physics Communications, 237(-), 199-207 (2019).	H31.4	国外
Synthesis, optical properties, and band structures of a series of layered mixed-anion compounds	Yuki Iwasa, Hiraku Ogino, Dongjoon Song, Verdad C. Agulto, Kohei Yamanoi, Toshihiko Shimizu, Jumpei Ueda, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Setsuhisa Tanabe & Nobuhiko Sarukura	Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 30(18), 16827-16832 (2019).	H31.4	国外
Topological analysis on structure and dynamics of SiO <sub>2</sub> liquid with the help of Si-particle and O-particle statistics	P K Hung, N V Hong, G T T Trang and Toshiaki Iitaka	Materials Research Express, 6(8), 085201 (2019).	R1.5	国外

Synthesis of $Ba_{1-x}Sr_xYSi_2O_5N$ and Discussion based on Structure Analysis and DFT Calculation	Takuya Yasunaga, Makoto Kobayashi, Kenta Hongo, Kotaro Fujii, Shunsuke Yamamoto, Ryo Maezono, Masatomo Yashima, Masaya Mitsuishi, Hideki Kato, Masato Kakihana	J. Solid State Chem., 276(-), 266-271 (2019).	R1.5	国外
All-Electron Quantum Monte Carlo with Jastrow Single Determinant Ansatz: Application to the Sodium Dimer	Kousuke Nakano, Ryo Maezono, Sandro Sorella	J. Chem. Theory Comput., 15(7), 4044-4055 (2019).	R1.5	国外
Crystal structure analysis and evidence of mixed anion coordination at the $Ce^{3+}$ site in $Y_3Al_2(Al, Si)_3(O, N)_{12}$ oxynitride garnet phosphor	K. Asami, M. Shiraiwa, J. Ueda, K. Fujii, K. Hongo, R. Maezono, M. Brik, M. Yashima, S. Tanabe	J. Mater. Chem. C, 7(5), 1330-1336 (2019).	R1.5	国外
First-principles calculations of the epsilon phase of solid oxygen	Le The Anh, Masahiro Wada, Hiroshi Fukui, Tsutomu Kawatsu and Toshiaki Iitaka	Scientific Reports, 9(-), 8731/1-12 (2019).	R1.6	国外
First-principles determination of the dissociation phase boundary of phase H $MgSiO_4H_2$	Jun Tsuchiya, and Koichiro Umemoto	Geophysical Research Letters, 46(13), 7333-7336 (2019).	R1.6	国外

First-Principles Study of Structural Transition in LiNiO <sub>2</sub> and High Throughput Screening for Long Life Battery	Tomohiro Yoshida, Kenta Hongo, Ryo Maezono	Journal of Physical Chemistry C, 123(23), 14126–14131 (2019).	R1.6	国外
Density functional study of methyl butanoate adsorption and its C-O bonds cleavage on MoS <sub>2</sub> -based catalyst with various loads of Ni promoters	Wahyu Aji Eko Prabowo, Subagjo, Nugraha, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Supriadi Rustad, Ryo Maezono, Wilson Agerico Diño, Hermawan Kresno Dipojono	Journal of Physics: Condensed Matter, 31(36), 365001 (2019).	R1.6	国外
Ab initio search of polymer crystals with high thermal conductivity	Keishu Utimula, Tom Ichibha, Ryo Maezono, Kenta Hongo	Chem. Mater., 31(13), 4649–4656 (2019).	R1.6	国外
Hydrogen-Storing Salt NaCl(H <sub>2</sub> ) Synthesized at High Pressure and High Temperature	Takahiro Matsuoka, Shu Muraoka, Takahiro Ishikawa, Ken Niwa, Kenji Ohta, Naohisa Hirao, Saori Kawaguchi, Yasuo Ohishi, Katsuya Shimizu, and Shigeo Sasaki	Journal of Physical Chemistry C, 123(41), 25074–25080 (2019).	R1.9	国外

Solid solution and compression behavior of hydroxides in the lower mantle	M. Nishi, J. Tsuchiya, Y. Kuwayama, T. Arimoto, Y. Tange, Y. Higo, T. Hatakeyama, T. Irifune	Journal of Geophysical Research -Solid Earth, 124(10), 10231-10239 (2019).	R1.9	国外
Pressure-induced structural change of CaO-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> melt: Insight from molecular dynamics simulation	Nguyen Van Hong, Nguyen Thi ThanhHa, Pham Khac Hung, Toshiaki Iitaka	Materials Chemistry and Physics, 236(-), 121839 (2019).	R1.10	国外
Optical response of the chiral topological semimetal RhSi	Zhi Li, Toshiaki Iitaka, Haibo Zeng, and Haibin Su	Physical Review B, 100(15), 155201/1-6 (2019).	R1.10	国外
Electronic structure of dense solid oxygen from insulator to metal investigated with X-ray Raman scattering	Hiroshi Fukui, Le The Anh, Masahiro Wada, Nozomu Hiraoka, Toshiaki Iitaka, Naohisa Hirao, Yuichi Akahama, and Tetsuo Irifune	National Academy of Sciences, 116(43), 21385-21391 (2019).	R1.10	国外
Relationship between Soret Coefficient and Potential Energy Distribution in Silicate Liquids: a Molecular Dynamics Study	F. Noritake, T. Kishi, T. Yano	Journal of Non-Crystalline Solids, 525(-), 119672 (2019).	R1.10	国外
Method for the Calculation of the Hamakerconstants of Organic Materials by the Lifshitz Macroscopic Approach With DFT	Hideyuki Takagishi, Takashi Masuda, Tatsuya Shimoda, Ryo Maezono, Kenta Hongo	The Journal of Physical Chemistry A, 123(40), 8726-8733 (2019).	R1.10	国外

Inconsistencies in ab initio evaluations of non-additive contributions of DNA stacking energies	Ken Sinkou Qin, Tom Ichibha, Kenta Hongo, and Ryo Maezono	Chemical Physics, 529(-), 110554 (2019).	R1.10	国外
Materials informatics based on evolutionary algorithms: Application to search for superconducting hydrogen compounds	Takahiro Ishikawa, Takashi Miyake, and Katsuya Shimizu	Physical Review B, 100(7), 174506/1-10 (2019).	R1.11	国外
Ab initio exploration of post-PPV transitions in low-pressure analogs of MgSiO <sub>3</sub>	Koichiro Umemoto and Renata M. Wentzcovitch	Physical Review Materials, 3(12), 123601/1-9 (2019).	R1.12	国外
Ti interstitial flows giving rutile TiO <sub>2</sub> reoxidation process enhancement in (001) surface	Tom Ichibha, Anouar Benali, Kenta Hongo, Ryo Maezono	Physical Review Materials, 3(12), 125801 (2019).	R1.12	国外
DFT + U study of H <sub>2</sub> O adsorption and dissociation on stoichiometric and nonstoichiometric CuO(111) surfaces	Faozan Ahmad, Mohammad Kemal Agusta, Ryo Maezono, Hermawan Kresno Dipojono	Journal of Physics: Condensed Matter, 32(45001), 11 (2020).	R2.1	国外
Chemical compositions of the outer core examined by first principles calculations	Koichiro Umemoto and Kei Hirose	Earth Planetary Science Letters, 531(-), 116009/1-8 (2020).	R2.2	国外

3D structured Laser engraves decorated with gold nanoparticle SERS chips for herbicide detection in environments	Raju Botta, Pitak Eiamchai, Mati Horprathum, Saksorn Limwichean, Chanunthorn Chananonnawathorn, Viyapol Patthanasettakul, Ryo Maezono, Apichai Jomphoak, Noppadon Nuntawong	Sensors and Actuators B: Chemical, 304(-), 127327 (2020).	R2. 2	国外
Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead - Vanadium Oxyhalide Apatites $Pb_5(VO_4)_3X$ (X=F, Cl, Br, I)	Masashi Nakamura, Kenji Oqmhula, Keishu Utimula, Miharu Eguchi, Kengo Oka, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Kazuhiko Maeda	Chem Asian J., 15(4), 540-545 (2020).	R2. 2	国外
Two-Dimensional Perovskite Oxynitride $K_2LaTa_2O_6N$ as a Water Tolerant Photocatalyst for $H_2$ Evolution under visible light	Takayoshi Oshima, Tom Ichibha, Kenji Oqmhula, Keisuke Hibino, Shunsuke Yamashita, Kotaro Fuji, Yugo Miseki, Kenta Hongo, Daling Lu, Ryo Maezono, Kazuhiro Sayama, Masatomo Yashima, Koji Kimoto, Hideki Kato, Masato Kakihana, Hiroshi Kageyama, Kazuhiko Maeda	Angew. Chem., 59(24), 9736-9743 (2020).	R2. 3	国外

Stability of fcc phase FeH to 137 GPa	Chie Kato, Koichiro Umemoto, Kenji Ohta, Shoh Tagawa, and Kei Hirose	American Mineralogist, 105(6), 917-921 (2020).	R2.6	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
Phase transition of 4-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group (口頭発表)	Shinichiro Akiyama, Yoshinobu Kuramashi, Takumi Yamashita, and Yusuke Yoshimura	The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2019) (Wuhan/China)	R1.6	国外
Tensor network study of two dimensional complex $\phi^4$ theory at finite density (口頭発表)	Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura	The 37th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2019) (Wuhan/China)	R1.6	国外

Tensor network study of two dimensional complex $\phi^4$ theory at finite density (招待講演)	Ryo Sakai, Daisuke Kadoh, Yoshinobu Kuramashi, Yoshifumi Nakamura, Shinji Takeda, and Yusuke Yoshimura	The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019) (Tokyo/Japan)	R1.6	国外
Tensor renormalization group approach to scalar field theories in particle physics (招待講演)	Yoshinobu Kuramashi	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
Phase transition of four-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group (ポスター発表)	Shinichiro Akiyama, Yoshinobu Kuramashi, Takumi Yamashita, and Yusuke Yoshimura	Computational Approaches to Quantum Many-body Problems (CAQMP2019) (Chiba/Japan)	R1.7	国外
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 (口頭発表)	藏増嘉伸	第3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)	R1.8	国内
高次テンソル繰り込み群による4次元Ising模型の相転移の解析 (ポスター発表)	秋山進一郎、 藏増嘉伸、山 下巧、吉村友 佑	熱場の量子論とその応用 (京都大学基礎物理学研究所/京都)	R1.9	国内

テンソル繰り込み群による2次元有限密度複素 $\phi$ 4理論の解析（口頭発表）	藏増嘉伸、加堂大輔、坂井涼、中村宜文、武田真滋、吉村友佑	日本物理学会 2019年秋季大会（素核宇）（山形大学/山形）	R1.9	国内
高次テンソル繰り込み群による4次元Ising模型の相転移解析（口頭発表）	秋山進一郎、藏増嘉伸、山下巧、吉村友佑	日本物理学会 2019年秋季大会（素核宇）（山形大学/山形）	R1.9	国内
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（ポスター発表）	藏増嘉伸	ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会（第9回材料系ワークショップ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～）（秋葉原コンベンションホール/東京）	R2.2	国内
テンソル繰り込み群による4次元Ising模型の解析（口頭発表）	秋山進一郎、藏増嘉伸、山下巧、吉村友佑	日本物理学会 第75回年次大会（2020年）（名古屋大学/名古屋）	R2.3	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
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	Journal of High Energy Physics, 2019(-), 184 (2019).	R1.5	国外
Irregular parameter dependence of numerical results in tensor renormalization group analysis	D. Kadoh, Y. Kuramashi, and R. Ueno	Progress of Theoretical and Experimental Physics, 2019(6), 061B01 (2019).	R1.6	国内

Three-dimensional finite temperature $Z_2$ gauge theory with tensor network scheme	Y. Kuramashi and Y. Yoshimura	Journal of High Energy Physics, 2019(-), 23 (2019).	R1.8	国外
Phase transition of four-dimensional Ising model with higher-order tensor renormalization group	S. Akiyama, Y. Kuramashi, T. Yamashita, and Y. Yoshimura	Physical Review D, 100(5), 054510 (2019).	R1.11	国外
Investigation of complex $\phi^4$ theory at finite density in two dimensions using TRG	D. Kadoh, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, R. Sakai, S. Takeda, and Y. Yoshimura	Journal of High Energy Physics, 2020(-), 161 (2020).	R2.2	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 国立大学法人横浜国立大学

## 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
～「量子コンピュータ」「量子通信」の次に来る、「量子中継ネットワーク」～ “難しい” 量子情報分野を理解し、今後のリリースの読み方がわかるようになる！（招待講演）	小坂英男	メディア向け勉強会 テーマ 『量子中継ネットワーク』（フクラシア丸の内オアゾ/東京）	H31.4	国内
Time dependent GW molecular dynamics simulation（口頭発表）	Thi Nu Pham and Kaoru Ohno	Vietnam - Japan Science and Technology Symposium (VJST2019) (Hanoi/Vietnam)	R1.5	国外
任意の電子励起固有状態計算のための拡張準粒子理論（口頭発表）	大野かおる、小野頌太、磯部智遥	ナノ学会第17回大会（かごしま県民交流センター/鹿児島）	R1.5	国内
準粒子方程式のエネルギー依存性に関する研究（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	ナノ学会第17回大会（かごしま県民交流センター/鹿児島）	R1.5	国内
全電子混合基底法によるスピン軌道相互作用の評価（ポスター発表）	中嶋武、大野かおる	ナノ学会第17回大会（かごしま県民交流センター/鹿児島）	R1.5	国内

Application of First-Principles Potential Renormalization Theory to a Phase Transition between bcc and fcc Fe crystals (ポスター発表)	Thi Nu Pham, Ryoji Sahara, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	ナノ学会第17回大会 (かごしま県民交流センター/鹿児島)	R1.5	国内
量子情報処理の最新動向～「量子コンピュータ」「量子通信」の次に来る、「量子中継ネットワーク」～ (招待講演)	小坂英男	第4回YNU横浜経営者の会 (横浜ベイシェラトンホテル/横浜)	R1.5	国内
GW( $\Gamma$ ) calculation for photoabsorption energies of spin polarized systems (ポスター発表)	Tomoharu Isobe, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP 2019) (Tromsø/Norway)	R1.7	国外
TOMBO Tutorial: Lecture II (招待講演)	Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Electronic Structures and Energy Conversion Efficiency of Heterojunction C60/CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells (招待講演)	Khian-Hooi Chew, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外

Effect of linear extrapolation of self-energy in GW approximation (ポスター発表)	Tomoharu Isobe, and Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Electromechanical (actuator) properties of Mxenes (ポスター発表)	Mohammad Khazaei, Nguyen Tuan Hung, Keivan Esfarjani, and Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Spin-orbit coupling in all-electron mixed basis approach (ポスター発表)	Takeru Nakashima and Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Feasibility of the $\Gamma$ Point Only GW Calculation for Periodic Systems Using TOMBO (招待講演)	Kaoru Ohno and Tsubasa Aoki	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
Ab-initio calculation of interatomic forces and molecular vibrations in all-electrons mixed basis approach (ポスター発表)	Wanibe Shota and Kaoru Ohno	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外

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（口頭発表）	小坂英男	第3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）	R1.8	国内
Extended Quasiparticle Theory and Its Applications（招待講演）	Kaoru Ohno	Workshop on Density Functionals for Many-Particle Systems: Mathematical Theory and Physical Applications of Effective Equations (Singapore/Singapore)	R1.9	国外
Selective quantum teleportation transfer of a photon polarization state into a carbon nuclear spin state in an NV center in diamond（口頭発表）	Kohei Kurashita, Kazuya Tsurumoto, Yuhei Sekiguchi, Hideo Kosaka	SSDM2019 (International Conference on Solid State Devices and Materials) (Nagoya/Japan)	R1.9	国外
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II（口頭発表）	関口雄平、安井優貴、古賀悠太、鶴本和也、小坂英男	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	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II（口頭発表）	鶴本和也、倉下滉平、関口雄平、小坂英男	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
ダイヤモンドNV中心における炭素核スピンシングルショット測定（口頭発表）	今池伸晃、川崎愛大、中里隆也、レイエスラウスティン、鶴本和也、倉見谷航洋、関口雄平、小坂英男	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内

量子中継システム実験に向けたダイヤモンド量子NV素子の光学的構造最適化（口頭発表）	倉見谷航洋、関口雄平、松下和生、鈴木智也、新荻正隆、加藤宙光、牧野俊晴、小坂英男	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
多体摂動論に基づいたGW近似の高精度化（ポスター発表）	磯部智遥、大野かおる	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
全電子混合基底法によるスピン軌道相互作用の評価（ポスター発表）	中嶋武、大野かおる	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	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）	鱈部翔太、大野かおる	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
GW+BSE法によるX線発光スペクトルの第一原理計算（ポスター発表）	青木翼、大野かおる	日本物理学会 2019年秋季大会（岐阜大学/岐阜）	R1.9	国内
Toward quantum internet: A way to build a quantum repeater with geometric qubits on an NV center in diamond（招待講演）	Hideo Kosaka, Yuhei Sekiguchi, Hiromitsu Kato, Tokuyuki Teraji	Japan-Netherlands Quantum Conference (Delft/Netherlands)	R1.9	国外
Toward quantum internet: A way to build a quantum repeater with geometric qubits on an NV center in diamond（招待講演）	小坂英男	応用物理学会新領域量子情報研究グループ研究会（国立情報学研究所/東京）	R1.10	国内
ダイヤモンド量子セキュリティ（招待講演）	小坂英男	CREST「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出」第4回領域会議（東京大学先端科学技術研究センター ENEOS ホール/東京）	R1.10	国内

量子中継システム実験に向けたダイヤモンド量子NV素子の光学的構造最適化（口頭発表）	倉見谷航洋、関口雄平、鈴木智也、新荻正隆、加藤宙光、牧野俊晴、小坂英男	ニューダイヤモンドフォーラム第33回ダイヤモンドシンポジウム（東京工業大学/東京）	R1. 11	国内
夢の技術・量子情報がひらく世界（招待講演）	小坂英男	NHK文化センター創立40周年記念 横浜国立大学提携講座「知の大学」（NHK文化センター横浜ランドマーク教室/横浜）	R1. 11	国内
Diamond-based quantum repeater for quantum internet（招待講演）	KOSAKA Hideo	Topical Conference on Quantum Communication and Security 2019 (TCQCS 2019) (Kyoto/Japan)	R1. 12	国外
Quantum entanglement between a photon and a spin in diamond by resonance fluorescence under a zero magnetic field（ポスター発表）	Yuhei Sekiguchi, Yuki Yasui, Hiromitsu Kato, Tokuyuki Teraji and Hideo Kosaka	EU-USA-JAPAN International Symposium on Quantum Technology (Kyoto/Japan)	R1. 12	国外
量子ネットワーク関連の研究 動向（招待講演）	小坂 英男	ムーンショット国際シンポジウム (Kyoto/Japan)	R1. 12	国外
ダイヤモンドNV中心における共鳴蛍光による光子偏光と電子スピンの量子もつれ生成に関する研究（ポスター発表）	レイエスラウスティン、安井優貴、鶴本和也、関口雄平、小坂英男	第15回ナノテク交流シンポジウム（横浜国立大学/横浜）	R2. 3	国内
量子情報技術におけるダイヤモンド量子素子の機能向上に関する研究（ポスター発表）	笹崎和希、小坂英男、関口雄平、倉見谷航洋	第15回ナノテク交流シンポジウム（横浜国立大学/横浜）	R2. 3	国内

ダイヤモンド NV 中心における複合スピン系を用いた量子誤り訂正に関する研究 (ポスター発表)	中里隆也、今池伸晃、松田一泰、レイエスラウスティン、関口雄平、小坂英男	第15回ナノテク交流シンポジウム (横浜国立大学/横浜)	R2.3	国内
GW近似の系統的高精度化の研究 (ポスター発表)	磯部智遥、大野かおる	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
TOMBOのGW計算におけるエネルギー依存性の自己無撞着化 (ポスター発表)	後藤潔成、磯部智遥、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム (横浜国立大学/横浜)	R2.3	国内
経路積分分子動力学法によるNO <sub>3</sub> -(H <sub>2</sub> O)の構造に関する理論研究 (ポスター発表)	岡村優詩、桑畑和明、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム (横浜国立大学/横浜)	R2.3	国内
NiTi合金の第一原理フェーズフィールドシミュレーション (ポスター発表)	土屋萌南、PHAM Thi Nu、大野かおる	第15回ナノテク交流シンポジウム (横浜国立大学/横浜)	R2.3	国内
ダイヤモンドNV中心における量子メモリ大容量化に向けた弱結合炭素のもつれ操作 (口頭発表)	レイエスラウスティン、石坂泰一、今池伸晃、松田一泰、中里隆也、関口雄平、小坂英男	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内
ダイヤモンド NV 中心における核スピン量子メモリの量子誤り訂正 (口頭発表)	中里隆也、今池伸晃、松田一泰、レイエスラウスティン、関口雄平、小坂英男	日本物理学会 第75回年次大会 (2020年) (名古屋大学/名古屋)	R2.3	国内

第一原理フェーズフィールド法による合金組織の予測技術（口頭発表）	大野かおる、Swastibrata Bhattacharyya、佐原亮二、Thi Nu Pham、桑原理一	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学/東京）	R2.3	国内
Study of alloying element effects on the microstructure in Ti alloys using first-principles phase field method（口頭発表）	Thi Nu Pham, Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, and Swastibrata Bhattacharyya	日本金属学会2020年春期講演大会（東京工業大学/東京）	R2.3	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
Spin-orbit coupling in all-electron mixed basis approach	Takeru Nakashima and Kaoru Ohno	Annalen der Physik, 531(9), 1900060 (2019).	H31.4	国外
First principles calculations of surface dependent electronic structures: a study on $\beta$ -FeOOH and $\gamma$ -FeOOH	Yuki Sakamoto, Yusuke Noda, Kaoru Ohno, Kayo Koike, Katsushi Fujii, Tomiko M. Suzuki, Takeshi Morikawa, and Shinichiro Nakamura	Physical Chemistry Chemical Physics, 21(34), 18486-18494 (2019).	R1.5	国外

Quantum teleportation-based state transfer of photon polarization into a carbon spin in diamond	Kazuya Tsurumoto, Ryota Kuroiwa, Hiroki Kano, Yuhei Sekiguchi and Hideo Kosaka	Communications Physics, 2(-), 74 (2019).	R1.6	国外
Implementation of hyperfine coupling in all-electron mixed basis approach	Hiroyuki Terada, Shota Kanno, and Kaoru Ohno	Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 52(16), 165001/1-9 (2019).	R1.6	国外
計算ナノ科学 - 第一原理計算の基礎と高機能ナノ材料への適用	大野かおる、中村振一郎、水関博志、佐原亮二	ナノ学会編シリーズ：未来を創るナノ・サイエンス&テクノロジー（近代科学社），5(-)，1-272 (2019).	R1.8	国内
A first-principles phase field method for quantitatively predicting multi-composition phase separation without thermodynamic empirical parameter	Swastibrata Bhattacharyya, Ryoji Sahara, and Kaoru Ohno	Nature Communications, 10(-), 3451/1-10 (2019).	R1.8	国外
Ab initio simulations and exciton analysis of x-ray emission spectroscopy with the GW+Bethe-Salpeter equation	Tsubasa Aoki and Kaoru Ohno	Physical Review B, 100(7), 75149/1-8 (2019).	R1.8	国外
Dynamical Decoupling of a Geometric Qubit	Yuhei Sekiguchi, Yusuke Komura and Hideo Kosaka	Phys. Rev. Applied, 12(5), 051001 (2019).	R1.11	国外

Mass production of low-boiling point solvent- and water- soluble graphene by simple salt-assisted ball milling	Yoshihiko Arao, Riichi Kuwahara, Kaoru Ohno, Tanks Jonathon, Kojiro Aida, Masatoshi Kubouchi, Shin-ichi Takeda	Nanoscale Advances, 1(12), 4955-4964 (2019).	R1.11	国外
第一原理フェーズフィールド法で材料組織を予測す	大野かおる	23の先端事例がつなぐ計算科学のフロンティア (近代科学社) 第7章, 83-93 (2019).	R1.12	国内
Clear evidence of element partitioning effects in a Ti-6Al-4V alloy by the first-principles phase field method	Thi Nu Pham, Kaoru Ohno, Riichi Kuwahara, and Swastibrata Bhattacharyya	Journal of Physics: Condensed Matter, 32(26), 264001/1-9 (2020).	R2.3	国外

その他の実績

1. 受賞等

名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際の別
外部資金獲得研究者表彰	小坂英男	横浜国立大学	R1.6	国内
優秀研究者表彰	小坂英男	横浜国立大学	R2.3	国内
理工学部学業優秀者表彰	レイエス ラウスティン	横浜国立大学	R2.3	国内
横浜物理工学会優秀賞	レイエス ラウスティン	横浜国立大学	R2.3	国内
理工学府博士前期課程優秀 学生理工学府長表彰	鶴本和也	横浜国立大学	R2.3	国内

理工学府学業優秀者表彰	鶴本和也	横浜国立大学	R2.3	国内
論文顕彰	鶴本和也	横浜国立大学	R2.3	国内
横浜物理工学会優秀賞	鶴本和也	横浜国立大学	R2.3	国内
2019年度 貴金属に関わる研究助成	大野かおる	田中貴金属記念財団	R2.3	国内

## 2. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

名称	日付	説明	備考
盗聴困難な「量子インターネット」	R1.6.26	日経産業新聞	
盗聴困難な「量子インターネット」	R1.6.26	日本経済新聞 電子版	
世界初、光子からダイヤモンド中の炭素への量子テレポーテーション転写に成功～量子インターネットを実現する量子中継の大容量化に道～	R1.6.28	横浜国立大学プレスリリース	
世界初、光子からダイヤモンド中の炭素への量子テレポーテーション転写に成功～量子インターネットを実現する量子中継の大容量化に道～	R1.6.28	科学技術振興機構 (JST) プレスリリース	
Researchers teleport information within a diamond	R1.6.28	EurekAlert! (English)	
世界初、光子からダイヤモンド中の炭素への量子テレポーテーション転写に成功～量子インターネットを実現する量子中継の大容量化に道～	R1.6.28	EurekAlert! (日本語)	
横浜国大、量子転写で暗号通信 安全なネット網実現へ	R1.7.1	日刊工業新聞	
横浜国立大、光子からダイヤモンド中の炭素への量子テレポーテーション転写に成功	R1.7.1	日本経済新聞	

合金の複雑な構造をパラメータ無しで予測	R1. 8. 1	横浜国立大学プレスリリース	<a href="https://www.ynu.ac.jp/hus/koho/22626/detail.html">https://www.ynu.ac.jp/hus/koho/22626/detail.html</a>
Simulation technique can predict microstructures of alloy materials used in jet engines -- before they are made	R1. 8. 1	EurekAlert! (English)	<a href="https://eurekalert.org/pub_releases_ml/2019-08/ynu-5073019.php">https://eurekalert.org/pub_releases_ml/2019-08/ynu-5073019.php</a>
合金の複雑な構造をパラメータ無しで予測 世界初の革新的マルチスケールシミュレーション新技術	R1. 8. 1	EurekAlert! (日本語)	<a href="https://eurekalert.org/pub_releases_ml/2019-08/ynu-5073019.php">https://eurekalert.org/pub_releases_ml/2019-08/ynu-5073019.php</a>
合金の複雑な構造をパラメータ無しで予測 世界初の革新的マルチスケールシミュレーション新技術	R1. 8. 1	物質・材料研究機構プレスリリース	<a href="https://www.nims.go.jp/news/press/2019/08/201908010.html">https://www.nims.go.jp/news/press/2019/08/201908010.html</a>
合金の複雑な微細構造をパラメータ無しで予測 — 計算機シミュレーションによる合金設計に道：横浜国立大学/物質・材料研究機構	R1. 8. 1	つくばサイエンスニュース	<a href="http://www.t-sukuba-sci.com/?p=6776">http://www.t-sukuba-sci.com/?p=6776</a>
金属組織の構造変化 実験なしで高精度予測 実験データなしで高精度予測	R1. 8. 2	鉄鋼新聞 (2面)	
横浜国大と物材機構 パラメーターなしで合金構造を予測	R1. 8. 2	日刊産業新聞 (11面)	

合金の複雑な構造をパラメーター無しで予測——新手法「第一原理フェーズフィールド法」を開発	R1. 8. 5	fabcross forエンジニア (MEITEC)	<a href="https://engineer.fabcross.jp/archive/190805_nimms.html">https://engineer.fabcross.jp/archive/190805_nimms.html</a>
合金構造の予測 正確な計算モデル	R1. 8. 26	日本経済新聞 (9面)	
Researchers teleport information within a diamond (AAASが提供するオンラインニュースサービスEurekAlert!において2019年の閲覧数ランキング第6位)	R1. 12. 24	AAAS (Science誌の母体機関)	
Quantum teleportation-based state transfer of photon polarization into a carbon spin in diamond (Springer Natureの2019年のResearch Highlightsに選定)	R2. 2. 28	Springer Nature (Nature誌の母体機関)	

### 3. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

名称	開催日時	開催場所	参加人数
量子コンピュータ・量子通信の次に来る、量子中継ネットワーク	H31. 4. 19	フクラシア丸の内オアゾ/東京	40
量子情報処理の最新動向～量子コンピュータ・量子通信の次に来る、量子中継ネットワーク～, 第4回YNU横浜経営者の会	R1. 5. 29	横浜ベイシェラトンホテル/横浜	20
TOMBO Tutorial	R1. 7. 23	10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) Hong Kong	50

「夢の技術・量子情報がひらく世界」, NHK文化センター創立40周年記念 横浜国立大学提携講座 「知の大学」	R1. 11. 30	NHK文化センター横浜ランドマーク教室/横浜	10
TOMBO Seminar	R1. 12. 10	東北大学金属材料研究所 (計算物質科学人材育成コンソーシアム、PCoMS 主催)	20
超電導量子コンピュータの基礎から作製方法、応用まで	R2. 2. 26	横浜国立大学/横浜	30
量子インターフェース勉強会	R2. 3. 16	東京大学生産技術研究所/東京	25

## 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
大規模DFT計算によるPd@Agコアシェルナノ粒子触媒の構造・電子状態解析（口頭発表）	中田彩子、宮崎剛	第22回理論化学討論会（北海道大学/札幌）	R1.5	国内
Linear-scaling First-principles Molecular Dynamics Simulations of Complex Nano-structured Materials with the CONQUEST Code（招待講演）	T. Miyazaki	4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019) (Gifu/Japan)	R1.6	国外
Linear-scaling DFT simulations of complex nano-structured materials with the CONQUEST code（招待講演）	T. Miyazaki	10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (Singapore/Singapore)	R1.6	国外
Linear-scaling DFT simulations of complex nano-structured materials using the CONQUEST code（招待講演）	T. Miyazaki	10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP 2019) (Tromsø/Norway)	R1.7	国外

Linear-scaling ab initio molecular dynamics study of complex structure of materials with the CONQUEST code (招待講演)	J. Lin, Z. Raza, D. R. Bowler and T. Miyazaki	The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (Hong Kong/China)	R1.7	国外
高温、高圧下のケイ酸塩融体に対する大規模第一原理分子動力学による連携研究 (口頭発表)	宮崎剛	第3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)	R1.8	国内
Site- and size-dependence of atomic and electronic structures of metallic nanoparticles by large-scale DFT calculations (口頭発表)	Ayako Nakata, David R. Bowler, Tsuyoshi Miyazaki	14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (Kobe/Japan)	R1.11	国外
Large scale DFT study on Pd@Ag core shell nanoparticles (ポスター発表)	中田彩子、David R. Bowler、宮崎剛	TIAかけはしポスター交流会2019「-計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査-」 (東京大学/千葉)	R1.12	国内
Large-scale DFT study of complex nano-structured materials with the CONQUEST code (招待講演)	宮崎剛	Materials Research Meeting 2019 (MRM2019) (Yokohama/Japan)	R1.12	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
Highly accurate local basis sets for large-scale DFT calculations in CONQUEST	D. R. Bowler, J. S. Baker, J. T. L. Poulton, S. Y. Mujahed, J. Lin, S. Yadav, Z. Raza, T. Miyazaki	Japanese Journal of Applied Physics, 58(10), 100503/1-7 (2019).	R1.10	国外
Large scale and linear scaling DFT with the CONQUEST code	Ayako Nakata, Jack S. Baker, Shereif Y. Mujahed, Jack T. L. Poulton, Sergiu Arapan, Jianbo Lin, Zamaan Raza, Sushma Yadav, Lionel Truflandier, Tsuyoshi Miyazaki, and D. R. Bowler	The Journal of Chemical Physics, 152(16), 164112/1-23 (2020).	R2.3	国外

その他の実績

1. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

名称	日付	説明	備考
日刊工業新聞（材料進化の最前線）	R1. 12. 18	NIMS最新成果として、プログラムCONQUESTの開発を紹介	「第一原理計算 ナノ構造物質の特性解明」

## 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
Large eddy simulation of cavitating flow using a homogeneous mixture model based on method of moments（招待講演）	Yuichi Kunishima, Shin-ichi Tsuda, Satoshi Watanabe	The 14th International Symposium on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows (Gdansk/Poland)	R1.7	国外
キャビテーションのマルチスケール解析に関する連携研究（口頭発表）	國嶋雄一、津田伸一、浅野雄太、野口博司、渡辺宙志	第3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）	R1.8	国内
多重プロセス型モデルを用いたキャビテーション流れのLES（口頭発表）	國嶋雄一、津田伸一、渡邊聡	第82回ターボ機械協会講演会（岡山大学/岡山）	R1.9	国内
多重プロセス型モデルを用いたClark-Y 11.7%翼まわりにおけるキャビテーション乱流のLES（口頭発表）	國嶋雄一、津田伸一、渡邊聡	第33回数値流体力学シンポジウム（北海道大学/札幌）	R1.11	国内

<p>キャビテーションの多重プロセス性を考慮したLarge Eddy Simulation (ポスター発表)</p>	<p>津田伸一</p>	<p>ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会(第9回材料系ワークショップ～「富岳」で飛躍へ!計算データの価値～)(秋葉原コンベンションホール/東京)</p>	<p>R2.2</p>	<p>国内</p>
<p>不凝縮ガスの析出・溶解を考慮した単独翼周りのキャビテーション流れの数値解析(口頭発表)</p>	<p>田中亮太郎、津田伸一、渡邊聡、國嶋雄一</p>	<p>日本機械学会九州支部第73期総会・講演会(九州産業大学/福岡)</p>	<p>R2.3</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 H $\Phi$ 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。
- ・硅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ヤ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 鉍物、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 ロトタイプの作 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 法による、珪酸 塩融体、含水鉍 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、含水鉍 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。

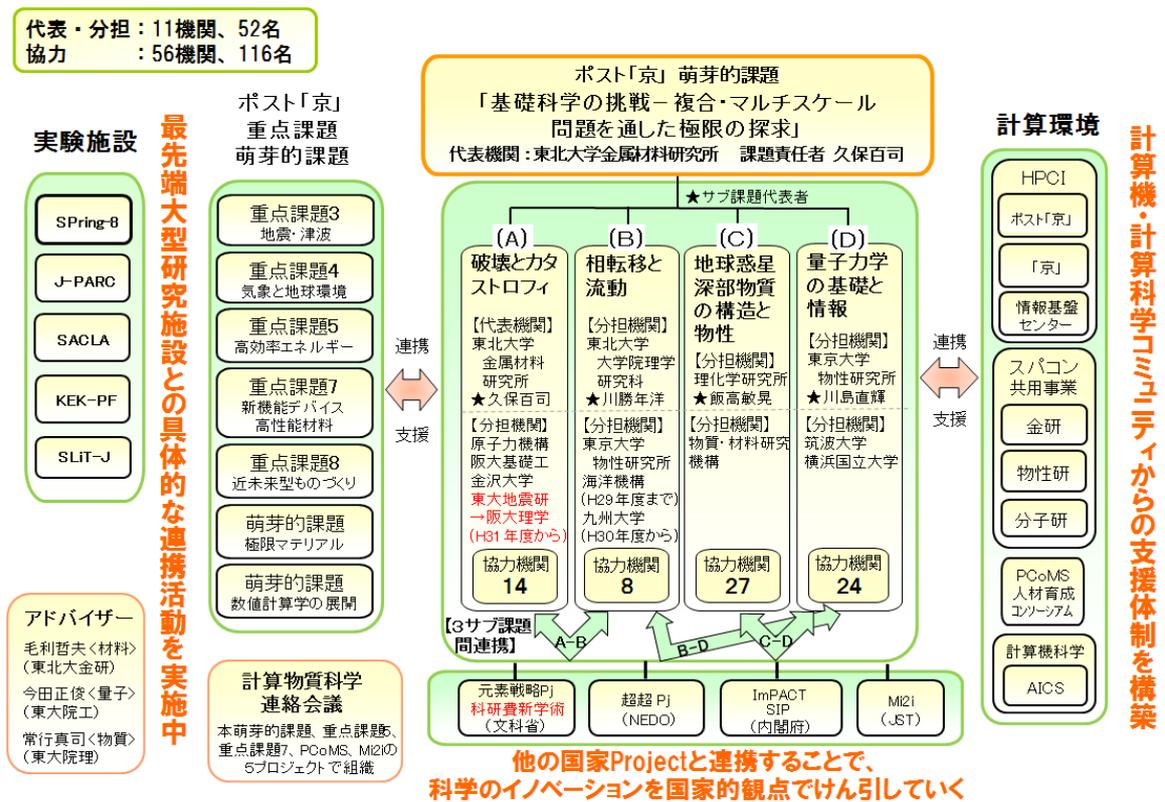


図1. 本課題の実施体制 (H31.4時点)

(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。

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により、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頂け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。

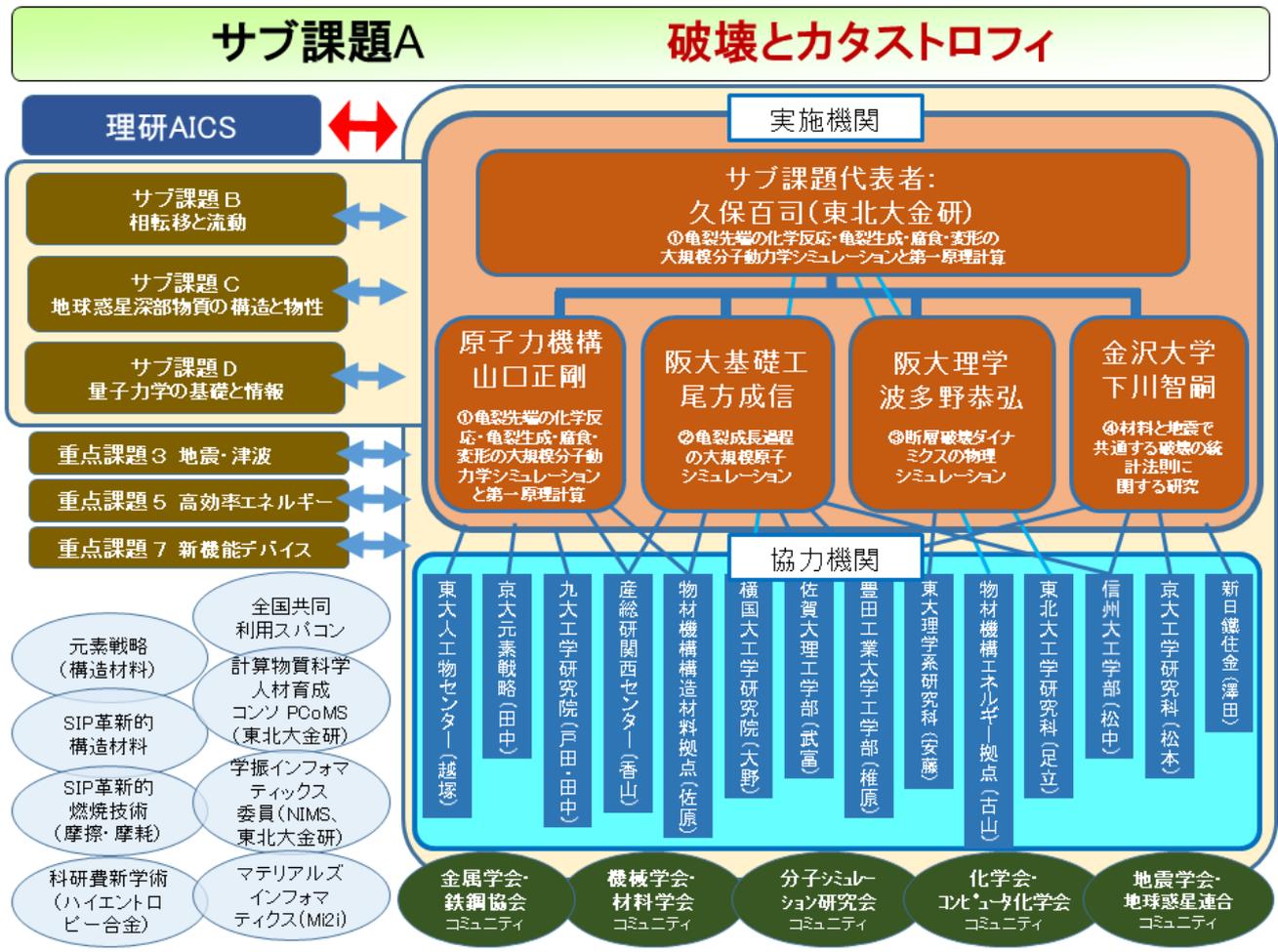


図 2. サブ課題Aの実施体制 (H31. 4 時点)

## 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、複雑流動のマイ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、従来のマイ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、それらのマイ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マイ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マイ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、雲の形成過程のマイクロシミュレータ、機械内部流動における気泡成長、およびその他のマイ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マイ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 およびマイ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。

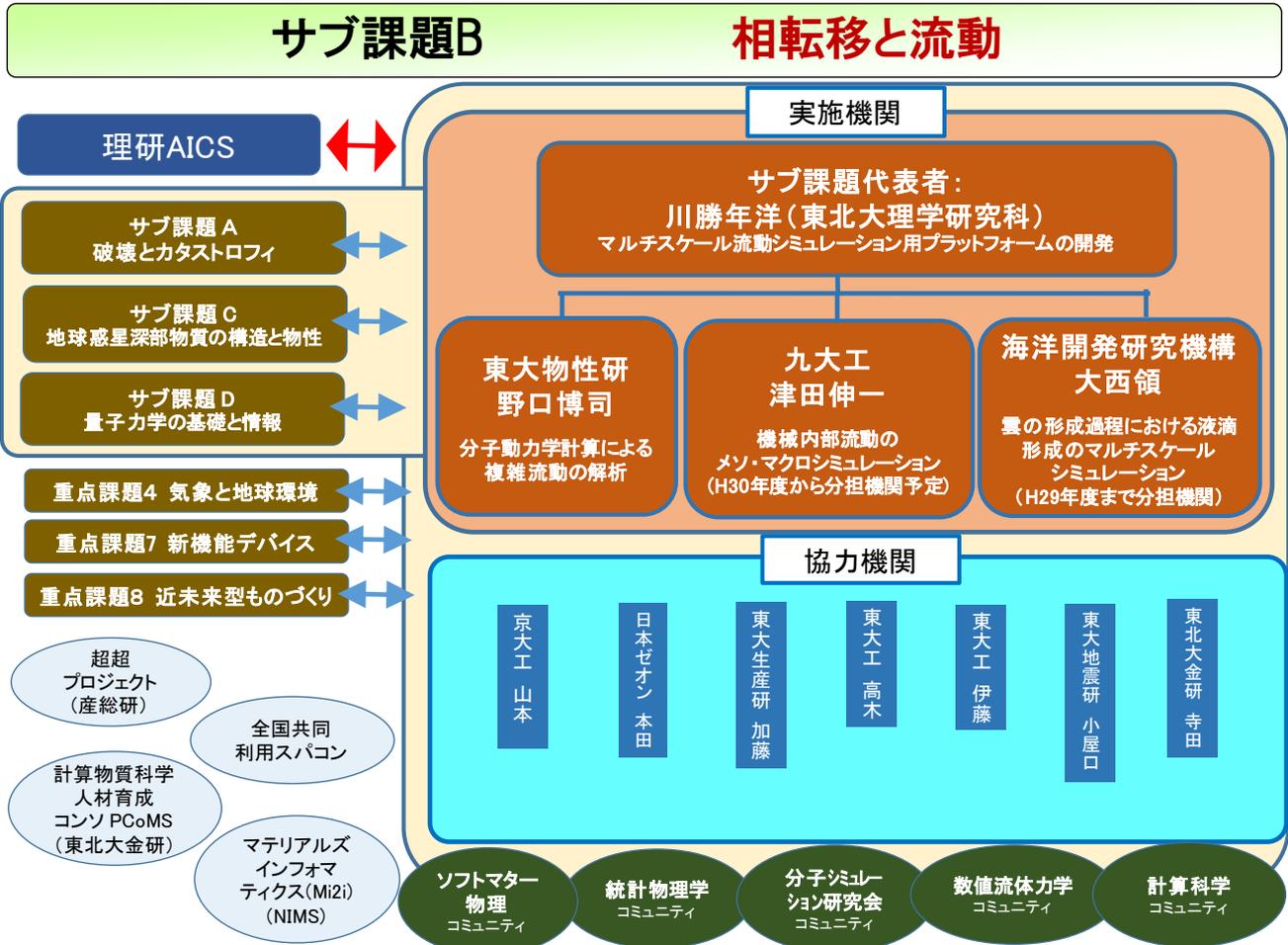


図3. サブ課題Bの実施体制 (H30.1時点)

## 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するかの、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」またはその他のスーパーコンピュータで実現されている。

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

の関係を解析する。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テ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

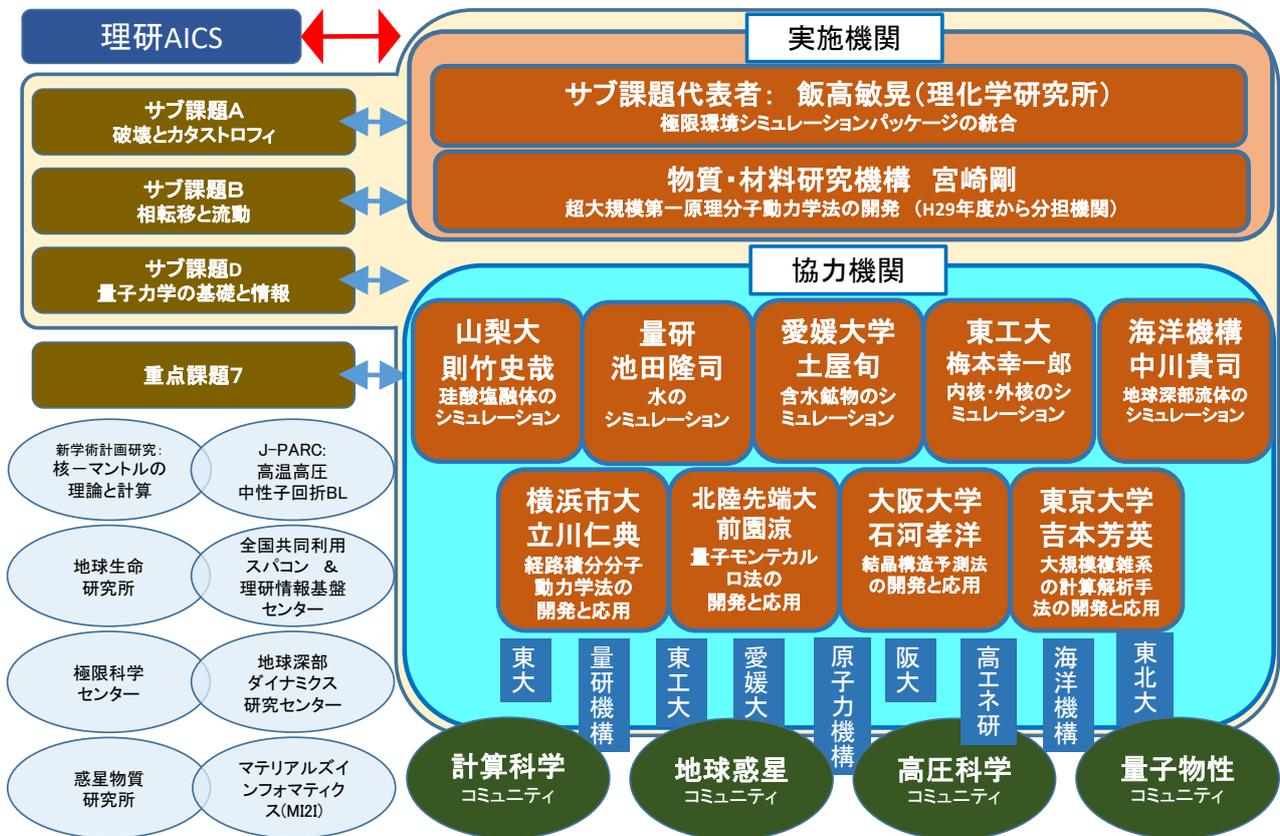


図4. サブ課題Cの実施体制 (H30.1時点)

## 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で中心的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 Krekar, 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。

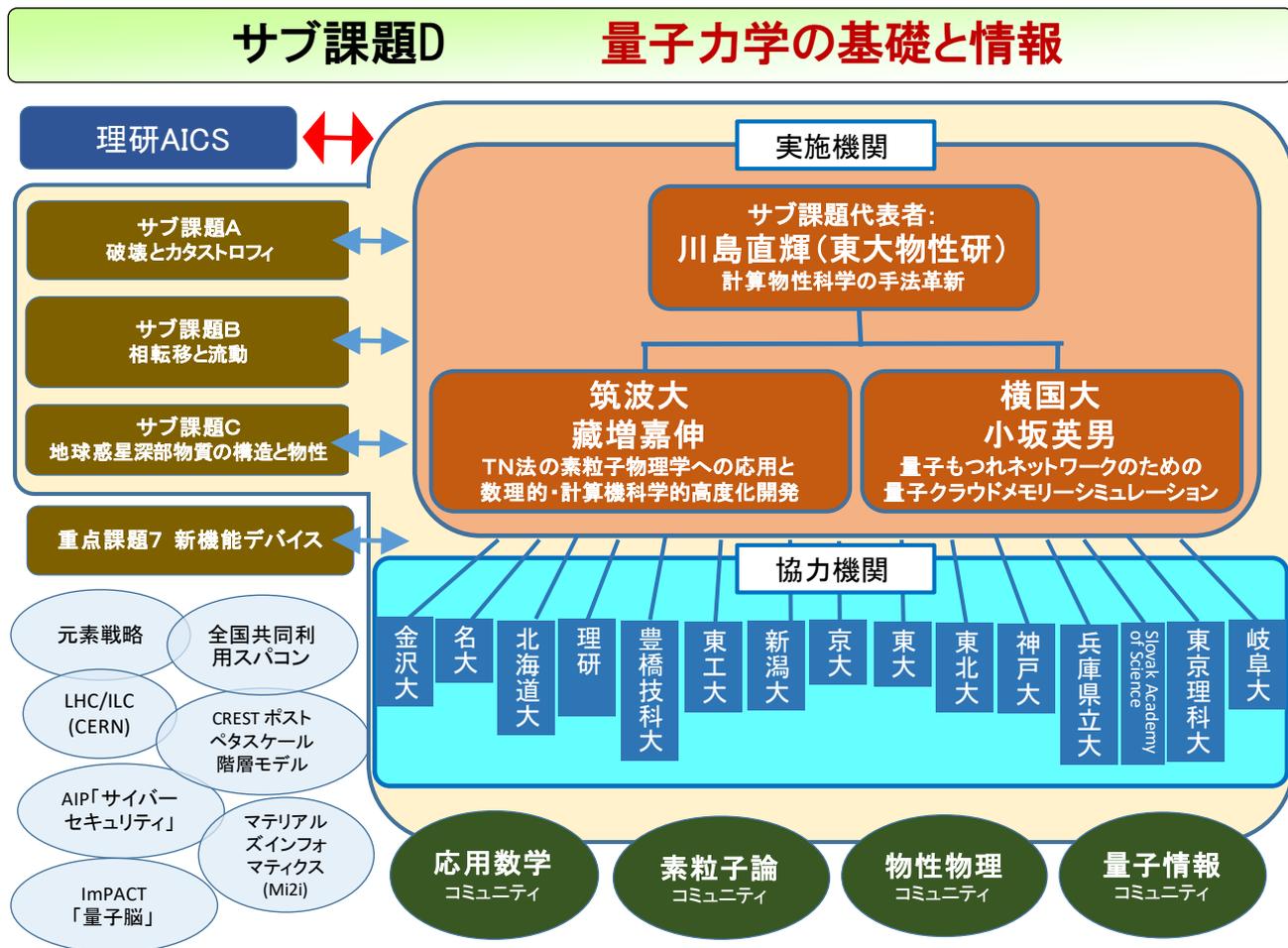


図5. サブ課題Dの実施体制 (H30.1時点)

### 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
	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	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	

令和元年度 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3回合同公開シンポジウム （令和元年8月1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した極限の探求」 第6回運営委員会（令和元年8月1日）報告書	4
<資料3>	萌芽的課題と重点課題の合同最終報告会（第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍 へ！計算データの価値～）（令和2年2月17日～2月18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した極限の探求」 第7回サブ課題代表者会議（平成31年4月2日）報告書	8
<資料5>	ポスト「京」重点課題5、7、「基礎科学の挑戦」課題責任者連携会議（令和元年5月30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した極限の探求」 第8回サブ課題代表者会議（令和元年5月30日）報告書	10
<資料7>	第2回ポスト「京」重点課題5、7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」課題責任者連携会議（令 和元年6月13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した極限の探求」 第9回サブ課題代表者会議（令和元年6月21日）報告書	12

<資料 9 >	第 3 回ポスト「京」重点課題 5、7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」課題瀬委任者連携会議 (令和元年 7 月 9 日) 報告書	1 3
<資料 1 0 >	ポスト「京」重点課題 (7) サブ課題 E 「高信頼性構造材料」・萌芽的課題 基礎科学の挑戦 A 「破壊とカタストロフィ」第三回合同研究会 (令和元年 7 月 31 日) 報告書	1 4
<資料 1 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じた極限の探求」 第 4 回サブ課題 A 会議 (令和元年 8 月 1 日) 報告書	1 6
<資料 1 2 >	ポスト「京」重点課題 7 E 「高信頼性構造材料」と萌芽的課題 基礎科学の挑戦 A 「破壊とカタ ストロフィ」第 1 回連携会議 (令和元年 9 月 2 日) 報告書	1 7
<資料 1 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 1 回サブ課題 B 会議 (令和元年 7 月 21 日) 報告書	1 8
<資料 1 4 >	2 0 1 9 年度第 1 回 ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題 B、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 & G 合同研究会 (令和元年 8 月 28 日) 報告書	1 9
<資料 1 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 6 回サブ課題 C 会議「地球惑星深部物質の構造と物性」(令和元年 7 月 17 日) 報告書	2 0
<資料 1 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 8 回極限物質科学研究会「地球惑星深部物質の構造と物性：成果と展望」(令和元年 7 月 17 日) 報告書	2 1
<資料 1 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9回極限物質科学研究会「動力的回折理論による結晶構造解析」(令和元年9月30日)報告書	22
<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10回極限物質科学研究会 “Silicate Melts and Glass” (令和元年11月30日)報告書	24
<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じた極限の探求」 第11回極限物質科学研究会「地球惑星物質の流動と破壊」(令和元年12月19日)報告書	25
<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」 第12回極限物質科学研究会 (令和2年2月6日)報告書	26
<資料21>	
研究会「無水・含水環境におけるオリビンの高圧相転移とイプシロン相の形成」(令和2年3月9日)報告書	27
<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じた極限の探求」 第7回サブ課題C会議「地球惑星深部物質の構造と物性」(令和2年3月30日)報告書	29
<資料23>	
滞在型国際ワークショップ「Computational Approaches to Quantum Many-body Problems(CAQMP 2019)」(令和元年7月16日～8月8日)報告書	30
<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じた極限の探求」 第1回グループリーダー会議 (令和元年9月6日)報告書	31
<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じた極限の探求」 第2回グループリーダー会議 (令和元年10月7日)報告書	32
<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」  
2019年度第1回サブ課題A－B連携研究会（令和元年7月13日）報告書

・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 33

<資料27>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」A、B、重点課題7E、7G連携会議（令和元年  
10月11日）報告書

・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 34

<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3回合同公開シンポジウム 報告書

(1) 日時 令和元年8月1日(木) 10:00~18:20

(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(PCoMS)

(4) 概要 ポスト「京」萌芽的課題プロジェクトの最終年度にあたり、「基礎科学の挑戦」と「極限マテリアル」の成果を広く公開するために、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件の発表が行われた。「極限マテリアル」からは、計4件の発表が行われた。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15名を含む99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を頂き、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

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」

10:15-10:35 サブ課題A 東北大学 久保百司

「亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱える大規模シミュレーションコードの開発」

10:35-10:55 サブ課題A 大阪大学 波多野恭弘

「材料科学と地震学の連携研究で解明する断層摩擦法則」

- 10:55-11:15 サブ課題A 金沢大学 下川智嗣  
「材料の機械的性質と塑性現象に潜む地震に類似した統計的性質の関係」
- 11:15-11:20 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」
- 11:20-11:40 サブ課題C 物質・材料研究機構 宮崎 剛  
「高温、高圧下のケイ酸塩融体に対する大規模第一原理分子動力学による連携研究」
- 11:40-12:00 サブ課題C 東京工業大学 梅本幸一郎  
「超高压下における地球惑星構成物質の構造相転移」
- 12:00-12:20 サブ課題C 北陸先端科学技術大学院大学 本郷研太  
「第一原理計算からのマテリアルズ・インフォマティクス研究展開」
- 12:20-12:35 サブ課題CD連携 理化学研究所 飯高敏晃  
「テンソルネットワーク時代の地球惑星物質科学」
- 12:35-13:50 昼休み
- 13:50-13:55 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」
- 13:55-14:15 サブ課題B 東北大学 川勝年洋  
「混相流のマルチスケール解析に関するサブ課題Bでの連携研究」
- 14:15-14:35 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に関する連携研究」
- 14:35-14:50 サブ課題AB連携 東北大学 森井洋平  
「弾塑性体の亀裂進展におけるマルチスケールシミュレーション」
- 14:50-14:55 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」
- 14:55-15:15 サブ課題D 東京大学 川島直輝  
「テンソルネットワーク法によるデータ圧縮と量子物性の新しい理解」
- 15:15-15:35 サブ課題D 筑波大学 藏増嘉伸  
「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」
- 15:35-15:50 休憩
- 15:50-16:10 サブ課題D 横浜国立大学 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」

16:10-16:25 サブ課題B D連携 東京大学 玉井敬一

「マルチスケールシミュレーション高速化に向けた大自由度力学系における情報圧縮技術の開発」

16:25-16:30 「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」

16:30-16:50 サブ課題A代表 東京工業大学 松下雄一郎

「固体系における結合クラスター法の並列計算」

16:50-17:10 サブ課題B代表 東京大学 明石遼介

「反応座標を用いない反応経路探索：固体系への応用」

17:10-17:30 サブ課題C代表 東京大学 篠原 康

「多体効果を取り込んだ固体の電子ダイナミクスシミュレーション」

17:30-17:45 産業界からの期待

デンソー 伊藤みほ / 京セラ 田中政博 / マツダ 高見明秀

17:45-18:00 アドバイザーからの講評

東京大学 常行真司 / 豊田理化学研究所・早稲田大学 今田正俊 / 東北大学 毛利哲夫

#### (6) 参加者

99名

内訳：	東北大学	39名	物質材料研究機構	3名
	東京大学	13名	日本原子力研究開発機構	2名
	東京工業大学	4名	理化学研究所	2名
	大阪大学	3名	その他国立研究開発法人	2名
	筑波大学	2名	高度情報科学技術研究機構	1名
	九州大学	2名	行政機関	1名
	その他大学	8名	民間企業	15名
			一般参加	2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した極限の探求」  
第6回運営委員会 報告書

- (1) 日時 令和元年8月1日(木) 12:50~14:05
- (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31年1月28日の文科省ヒアリングにおけるコメントの対応状況について報告を行った。また、令和元年7月文科省提出の資料を基に萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の成果について報告を行った。
- (4) 議題
  - 1) 平成30年度成果報告書の報告
  - 2) 研究成果のまとめの報告
- (5) 参加者  
9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(豊田理研・早大)、常行真司(東大)、毛利哲夫(東北大)  
オブザーバー: 宇賀神昌利(文科省)、高橋昭(東北大)

<資料3>

萌芽的課題と重点課題の合同最終報告会  
(第9回材料系ワークショップ ～「富岳」で飛躍へ！計算データの価値～)  
報告書

(1) 日時 令和2年2月17日(月)～令和2年2月18日(火)

(2) 場所 秋葉原コンベンションホール

(3) 開催主体

主催 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

共催 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)、  
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」、同(6)「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」、同(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」、  
ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」

協賛 公益財団法人計算科学振興財団、TIA かけはし、  
計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS：東北大学金属材料研究所計算材料学セ  
ンター、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学ナノサイエ  
ンスデザイン教育研究センター)、  
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI2I)、  
日本材料学会

(4) 概要 ポスト「京」プロジェクトの最終年度にあたり、重点課題7「次世代の産業を支える新  
デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」と「極限マテ  
リアル」と合同で最終報告会を開催し、プロジェクト期間全体の成果の報告を行った。  
重点7、「基礎科学の挑戦」、「極限マテリアル」それぞれの課題代表者からの口頭報  
告と、重点7から20件、「基礎科学の挑戦」から14件、「極限マテリアル」から4件  
のポスターによる報告が行われた。最終報告会は公開で行われ、大学関係者だけでは  
なく、公的研究機関、民間企業からの参加を含む、2日間で延べ計339名の参加があり、  
成果について外部研究者との意見交換がなされた。

(5) プログラム

2月17日(月)

10:00-10:05 開会挨拶

草間 義紀(高度情報科学技術研究機構)

10:05-10:40 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」

- 久保 百司(東北大学)
- 10:40-11:00 高精度第一原理計算手法の開発 - 量子コンピュータ・新物質構造探索・レーザー加工への展開  
松下 雄一郎(東京工業大学)(発表資料 [PDF])
- 11:00-11:35 重点課題(6)における材料・分子系のシミュレーション事例、ならびにデータ科学との連携事例  
望月 祐志(立教大学)(発表資料 [PDF])
- 11:35-12:50 <ランチタイム>
- 12:50-14:20 ポスター発表(ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題(1)で創出された成果紹介)
- 14:20-14:55 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」  
岡崎 進(名古屋大学)(発表資料 [PDF])
- 14:55-15:30 重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス、高性能材料の開発」  
常行 真司(東京大学)(発表資料 [PDF])
- 15:30-15:50 <休憩>
- 15:50-16:10 HPCI 利用環境と利用支援：HPCI における産業利用推進の取り組み  
塩原 紀行(高度情報科学技術研究機構)(発表資料 [PDF])
- 16:10-16:45 鉄鋼材料の高強度化に向けた基礎研究と産学連携  
澤田 英明(日本製鉄株式会社)
- 16:45-16:50 <休憩>  
「計算物質科学におけるエコシステムの構築は可能か」
- 16:50-18:00 パネルディスカッション  
モデレータ：古宇田 光(東京大学物性研究所)  
パネリスト：江原 正博(分子科学研究所) / 久保 百司(東北大学) / 森川 良忠(大阪大学) / 尾崎 泰助(東京大学物性研究所) / 茂本 勇(東レ株式会社, 産応協) / 奥田 基(高度情報科学技術研究機構)

2月18日(火)

- 10:00-10:50 データを中心とした研究開発の課題と将来への期待  
庄司 哲也(トヨタ自動車株式会社)
- 10:50-11:40 固体と液体の界面における電気化学反応シミュレーションに関するチュートリアル  
大谷 実(産業技術総合研究所)
- 11:40-13:00 <ランチタイム>
- 13:00-13:35 地震現象に類似した固体塑性挙動に対する原子スケール解析  
新山 友暁(金沢大学)
- 13:35-14:10 ボルツマン機械で迫る高温超伝導の発現メカニズム  
山地 洋平(東京大学)(発表資料 [PDF])

- 14:10-14:45 パナソニックにおける材料開発のデジタルイゼーションについて  
藤井 幹也(パナソニック株式会社)
- 14:45-15:20 JSRにおけるマテリアルズ・インフォマティクスと量子コンピューティングの取組  
大西 裕也(JSR 株式会社)
- 15:20-15:40 <休憩>  
「技術と人をつなぐ産学コミュニティの形成」
- 15:40-17:00 パネルディスカッション  
モデレータ：寺田 弥生(東北大学)  
パネリスト：新山 友暁(金沢大学) / 山地 洋平(東京大学) / 大西 裕也(JSR 株式会社) / 藤井 幹也(パナソニック株式会社) / 吉澤 香奈子(高度情報科学技術研究機構)

(6) 参加者

延べ339名

2月17日(月) 184名(民間企業：79名、公的研究機関：17名、大学72名、その他：16名)

2月18日(火) 155名(民間企業：81名、公的研究機関：12名、大学51名、その他：11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した極限の探求」

第7回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 平成31年4月2日(火) 12:00~13:00
- (2) 場所 東京大学物性研究所 A424号室
- (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) 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
  - 3) その他
- (5) 参加者  
4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)

<資料5>

ポスト「京」重点課題5、7、「基礎科学の挑戦」  
課題責任者連携会議 報告書

- (1) 日時 令和元年5月30日(木) 12:00~14:00
- (2) 場所 ハロー貸会議室虎ノ門 7F Room3
- (3) 概要 ポスト「京」重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について打合せを行った。
- (4) 議題
  - 1) ポスト「京」重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について
- (5) 参加者  
4名  
岡崎進(名古屋大学)、久保百司(東北大学)、常行真司、古宇田光(東京大学)

<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8回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 令和元年5月30日(木) 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 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、8月1日開催の第3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プログラム内容について検討を行った。
- (4) 議題
  - 1) 平成31年度の研究計画について
  - 2) 8月1日開催第3回合同公開シンポジウムのプログラムについて
- (5) 参加者  
4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)

<資料7>

第2回ポスト「京」重点課題5、7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」  
課題責任者連携会議 報告書

- (1) 日時 令和元年6月13日(木) 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 ポスト「京」重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について打合せを行った。その結果、重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の合同で計算物質科学フォーラム(仮)を立上げ、合同で2020年2月~3月頃にポスト「京」課題の最終結果発表会を開催する方向で進めることとなった。
- (4) 議題
  - 1) ポスト「京」重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について
- (5) 参加者  
6名  
久保百司(東北大学)、常行真司(東京大学)、岡崎進(名古屋大学)、高橋昭(東北大学)、古宇田光(東京大学)、加藤隆士(分子科学研究所)

<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」  
第 9 回サブ課題代表者会議 報告書

- (1) 日時 令和元年 6 月 21 日 (金) 15 : 00 ~ 17 : 00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室 A (サピアタワー10 階)
- (3) 概要 平成 31 年度のサブ課題間連携研究について議論を行った。さらに、8 月 1 日開催の第 3 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プログラム内容について検討を行った。
- (4) 議題
  - 1) サブ課題間連携について
  - 2) 8 月 1 日開催第 3 回合同公開シンポジウムのプログラムについて
- (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)、高橋昭 (東北大)

<資料9>

第3回ポスト「京」重点課題5、7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」  
課題瀬委任者連携会議 報告書

- (1) 日時 令和元年7月9日(火) 18:00~20:00
- (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 ポスト「京」重点課題5および7、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について打合せを行った。
- (4) 議題
  - 1) ポスト「京」重点課題5、7、および萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の連携について
- (5) 参加者  
5名  
久保百司(東北大学)、常行真司(東京大学)、岡崎進(名古屋大学)、古宇田光(東京大学)、加藤隆士(分子科学研究所)

<資料10>

ポスト「京」重点課題（7）サブ課題E「高信頼性構造材料」・萌芽的課題 基礎科学の挑戦A  
「破壊とカタストロフィ」  
第三回合同研究会 報告書

- (1) 日時 令和元年7月31日（水）10:00～17:30  
(2) 場所 TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター 102号室  
(3) 概要 ポスト「京」重点課題7E、萌芽的課題「基礎科学の挑戦」の成果について互いに報告を行い、連携について打合せを行った。

(4) 議題

10:00-10:05 趣旨説明・諸連絡 香山正憲（産総研）

座長：毛利哲夫

10:05-10:30 「液体金属脆化の元素選択性：第一原理計算」

山口正剛（原子力機構）

10:30-10:55 「機械学習による大規模粒界モデル中の局所エネルギー予測の現状」

田村友幸（名工大）

休憩 10分

座長：香山正憲

11:05-11:35 「①第一原理計算を用いた bcc Fe の Mn による粒界脆化の解析、②第一原理局所エネルギーと COHP を組み合わせた sp 元素の粒界偏析メカニズムの解析」

伊藤一真、澤田英明（日本製鉄）

11:35-11:55 「不安定変形」

毛利哲夫（東北大金研）

昼食休憩

座長：山口正剛

13:10-13:35 「Ab initio local analysis on the stability of Mg symmetrical tilt grain boundaries」

徐卓、香山正憲、田中真悟（産総研）

13:35-14:00 「化学反応を考慮した大規模分子動力学法による応力腐食割れシミュレーション」

久保百司（東北大金研）

休憩 10 分

座長：久保百司

14:10-14:35 「multi-scale modeling から cross-scale modeling への展開」

澁田靖（東大）、高木知弘（京都工繊大）、大野宗一（北大）、毛利哲夫（東北大金研）

14:35-15:00 「Unusual overgrowth at the converging grain boundary during columnar grain growth」

Chunwen Guo、高木知弘（京都工繊大）、大野宗一（北大）、澁田靖（東大）、毛利哲夫（東北大金研）

休憩 10 分

座長：香山正憲

15:10-15:35 「Study of Ti-Al-V microstructure using the first-principle phase field method」

Pham Thi Nu, 大野かおる（横浜国大）

15:35-16:00 「非平衡電子格子ダイナミクスのシミュレーション」

小野頌太（岐阜大）

休憩 10 分

16:10-17:30 総合討論 「次期プロジェクトに向けて」

#### (5) 参加者

16名（他参加者多数）

香山正憲、徐卓、田中真悟（産総研）、毛利哲夫、久保百司（東北大金研）、山口正剛（原子力機構）、田村友幸（名工大）、伊藤一真、澤田英明（日本製鉄）、澁田靖（東大）、高木知弘、Chunwen Guo（京都工繊大）、大野宗一（北大）、Pham Thi Nu、大野かおる（横浜国大）、小野頌太（岐阜大）

<資料 1 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じた極限の探求」

第4回サブ課題A会議 報告書

(1) 日時 令和元年8月1日(木) 20:00~21:30

(2) 場所 東北大学金属材料研究所 2号館7階久保研教授室

(3) 概要 今後の研究計画について議論を行った。

(4) 議題

1) 今後の研究計画の打ち合わせ

(5) 参加者

4名

久保百司(東北大学)、尾方成信、波多野恭弘(大阪大学)、山口正剛(原子力機構)

<資料12>

ポスト「京」重点課題7E「高信頼性構造材料」と萌芽的課題 基礎科学の挑戦A「破壊とカタストロフィ」第1回連携会議  
報告書

- (1) 日時 令和元年9月2日(月) 17:30~19:30
- (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 重点課題7E「高信頼性構造材料」と萌芽的課題 基礎科学の挑戦A「破壊とカタストロフィ」の連携研究について打ち合わせを行った。

(4) 議題

- 1) 今後の連携研究の打ち合わせ

(5) 参加者

10名

毛利哲夫、久保百司(東北大学)、尾方成信、波多野恭弘(大阪大学)、下川智嗣(金沢大学)、山口正剛(原子力機構)、香山正憲(産総研)、田村友幸(名古屋工業大学)、澤田英明(日本製鉄)

オブザーバー参加: 高橋昭(東北大学)

<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1回サブ課題B会議 報告書

- (1) 日時 令和元年7月21日(日) 10:00~18:00
- (2) 場所 JR博多シティ 小会議室(G+H) (博多駅ビル内)
- (3) 概要 サブ課題Bのメンバーが一堂に会し、令和元年度前半の活動報告と、後半の研究計画について報告し、来年度以降の研究の継続方法についての議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) 事務連絡、活動報告
  - 2) その他
- (5) 参加者  
9名  
村島隆浩、森井洋平、川勝年洋(東北大理)、  
野口博司(東大物性研)、渡辺宙志(慶大理工)  
谷口貴志、山本量一(京大工)、  
津田伸一、國嶋雄一(九大工)

<資料14>

2019年度第1回 ポスト「京」  
萌芽的課題「基礎科学の挑戦」サブ課題B、  
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&G  
合同研究会 議事録

- (1) 日時 令和元年8月28日(水) 9:00~12:30
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室B (サピアタワー10階)  
<http://www.bureau.tohoku.ac.jp/somu/bun/bun.html>
- (3) 概要 ポスト「京」重点課題7E&Gと萌芽的課題サブ課題Bの間の研究交流を推進する。
- (4) 議題
- 1) 重点課題7E&Gと萌芽的課題Bの連携に関して
  - 2) その他
- (5) 出席者(敬称略)
- 12名
- 重点7E:
- 大野かおる(横浜国大)、高木知弘(京都工芸繊維大)、大野宗一(北大)、澁田靖(東大)、  
佐原亮二(NIMS)、毛利哲夫(東北大)
- 重点7G:
- 陳迎(東北大)
- 萌芽B:
- 野口博司(東大)、渡辺宙志(慶応大)、大西領(JAMSTEC)、村島隆浩(東北大)、  
川勝年洋(東北大)

<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じた極限の探求」  
第6回サブ課題C会議「地球惑星深部物質の構造と物性」 報告書

- (1) 日時 令和元年7月17日(水) 10:00~12:00
- (2) 場所 TKP スター貸会議室 日本橋ミーティングルーム 3A
- (3) 概要 ポスト「京」の萌芽的課題サブ課題Cの研究成果・計画、体制に関する議論を行った。
- (4) 議題
  - 1) 平成30年度、平成31年度の研究成果・計画、計算資源、財政状況、サブ課題内連携、サブ課題間連携、外部との連携
- (5) 参加者  
5名  
池田隆司(量研)、梅本幸一郎(東工大)、土屋旬(愛媛大)、則竹史哉(山梨大)、飯高敏晃(理研)

<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8回極限物質科学研究会「地球惑星深部物質の構造と物性：成果と展望」 報告書

- (1) 日時 令和元年7月17日(水) 12:00~19:00
- (2) 場所 TKP スター貸会議室 日本橋ミーティングルーム 3A
- (3) 概要 招待講演者およびサブ課題メンバーによる「地球惑星深部物質の構造と物性：成果と展望」に関する講演と議論を行った。

(4) プログラム

- 13:00 瀬戸雄介 衝撃圧縮下のXFEL回折、動力学効果を考慮した電子線回折と構造解析
- 13:40 池田隆司 "First-principles molecular dynamics simulation of hydrogen clathrate hydrate"
- 14:20 梅本幸一郎 Post-post-perovskite transitions of MgSiO<sub>3</sub> by first principles
- 15:00 五味斎 Electrical resistivity and thermal conductivity of fcc Fe: Stratification of Mercury's core
- 15:40 土屋旬 D/H partitioning between forsterite, wadsleyite, and ringwoodite: ab initio calculation
- 16:20 石河孝洋 進化的アルゴリズムを活用した新物質探索：化学組成・結晶構造の同時探索及び超伝導性予測器の作成
- 17:00 則竹史哉 珪酸塩融体におけるネットワーク構成元素の拡散過程の解明に向けて
- 18:00 全体討論
- 19:00 解散

(5) 参加者

8名

招待講演者：五味斎（岡山大）、瀬戸雄介（兵庫大）

参加者：池田隆司（量研）、梅本幸一郎（東工大）、土屋旬（愛媛大）、石河孝洋（物材研）、則竹史哉（山梨大）、飯高敏晃（理研）

<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9回極限物質科学研究会「動力的回折理論による結晶構造解析」 報告書

- (1) 日時 令和元年9月30日(月)9:00~17:00
- (2) 場所 TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター ミーティングルーム 305
- (3) 開催主体
- 主催 ポスト「京」萌芽的課題1-1 サブ課題C「地球惑星深部物質の構造と物性」
- 協賛 ポスト「京」重点課題7 サブ課題C・サブ課題G； 科研費
- (4) 概要 運動学的回折理論とは回折現象を扱うときに一回散乱のみを考慮する理論(1次の摂動論)である。電荷を持たず散乱確率が小さいX線回折や中性子回折では運動学的理論は非常に良い近似となる。他方、電荷を持ち結晶と強い静電相互作用をする電子線/陽電子線回折では多重散乱を考慮した動力的回折理論(行列対角化)が重要となる。本研究会では、動力的回折理論のための数値解析法、動力的回折理論を用いた局所的結晶構造解析・表面構造解析などへの応用と手法開発について議論を展開する。

(5) プログラム

- 9:30-10:00 飯高敏晃(理研)「回折実験と結晶構造解析」
- 10:00-10:50 瀬戸雄介(神戸大)「電子回折計算ソフトの開発状況と結晶構造解析への展開」
- 10:50-11:40 星健夫(鳥取大)「陽電子回折実験に対する高速化データ駆動科学」
- (昼休み)
- 12:40-13:30 藤堂眞治(東大)「データ同化による結晶構造予測」
- 13:30-14:10 中西義典(東大)「X線CTR散乱による界面構造解析に資するベイズ推論」
- (休憩)
- 14:30-15:10 富岡尚敬(JAMSTEC)「電子線回折による超高压鉍物の探索」
- 15:10-15:50 大塚真弘(名大)「電子チャネリング効果(動力的回折)を活用したサイト選択的結晶材料分析」
- 15:50-16:30 望月出海(KEK)「TRHEPDの最近の成果」

(5) 参加者

12名

招待講演者：瀬戸雄介(岡山大)、星健夫(鳥取大)、藤堂眞治(東大)、中西義典(東大)、富岡尚敬(JAMSTEC)、大塚真弘(名大)、望月出海(KEK)

その他参加者：高橋敏男（学芸大）、奥地拓生（岡山大）、内出崇彦（産総研）、  
河津励（理研）、飯高敏晃（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10回極限物質科学研究会 “Silicate Melts and Glass” 報告書

- (1) 日時 令和元年11月30日(土) 10:00~15:00  
(2) 場所 理研和光 脳科学池の端研究棟 313号室 建物番号 C56  
(3) 概要 Silicate melt is 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 invited speakers will talk about their recent experimental and theoretical study on silicate melt and glass.

(4) プログラム

- 10:00-10:50 John Sak Tse (University of Saskatchewan) 【INVITED】  
The structures and transport properties of carbonate and aluminosilicate melts under the mantle conditions  
11:00-11:50 Tomonori Ohashi (Tohoku University) 【INVITED】  
Structures of dry and hydrous silicate glasses and melts under pressure  
(Lunch)  
13:30-15:00 Discussion

(5) 参加者

4名

John Sak Tse (USASK)、大橋友則(東北大)、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じた極限の探求」  
第11回極限物質科学研究会「地球惑星物質の流動と破壊」 報告書

- (1) 日時 令和元年12月19日(木) 13:00~18:00
- (2) 場所 TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンター ミーティングルーム103
- (3) 概要 地球惑星物質の流動と破壊に関する計算科学とAIの融合に関する研究会

(4) 議題

- 1) 13:00-13:30 自由情報交換
- 2) 13:30-17:30 各人の研究紹介と議論
  - 高田秀重 岩石破壊シミュレーションと破壊挙動の機械学習的理解
  - 安藤亮輔 岩石の破壊特性の可視化とモデリング
  - 佐藤賢斗 放射光施設におけるAI/Big dataプログラムの高度化
  - 飯高敏晃 岩石とマグマの第一原理分子動力学

(5) 参加者

4名

高田秀重(農工大)、安藤亮輔(東京大)、佐藤賢斗(R-CCS)、飯高敏晃(RIKEN)

<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」

第12回極限物質科学研究会 報告書

- (1) 日時 令和2年2月6日(木) 9:00~17:00
- (2) 場所 TKP 東京駅日本橋カンファレンスセンターミーティングルーム 215
- (3) 概要 地球惑星物質科学における計算科学とAIの融合に関する研究会

(4) 議題

- 1) 9:00- 9:30 自由情報交換
- 2) 9:30-16:30 各人の研究紹介と議論
  - 佐藤賢斗 放射光施設におけるAI/Big dataプログラムの高度化
  - 内出崇彦 自然地震解析を応用したAE自動検出
  - 瀬戸雄介 X線回折データの解析
  - 安藤亮輔 岩石の破壊特性の可視化とモデリング
  - 飯高敏晃 岩石とマグマの第一原理分子動力学

(5) 参加者

5名

佐藤賢斗 (R-CCS)、内出崇彦 (産総研)、瀬戸雄介 (神戸大)、安藤亮輔 (東京大)、  
飯高敏晃 (RIKEN)

<資料 2 1 >

研究会「無水・含水環境におけるオリビンの高圧相転移とイプシロン相の形成」  
報告書

(1) 日時 令和2年3月9日(月) 13:00~3月10日(火) 12:10

(2) 場所 海洋研究開発機構・高知コア研究所・会議室

(3) 開催主体

共催 科研費基盤研究A「高強度中性子散乱と高分解能電顕によるマントル鉱物の水素配置と水素輸送の統合解析」

ポスト「京」萌芽的課題 1-1 サブ課題C「地球惑星深部物質の構造と物性」

(3) 概要 始原的隕石や地球マントルの第一鉱物成分である、オリビンの高圧相の結晶構造と相転移メカニズムの研究は、過去に活発に行われたが、1990年代末に一段落ついた感があつた。しかし、近年の高空間・高時間分解能の物理化学分析法、鉱物物理計算法の技術革新は、これらの研究に新展開をもたらしつつある。本研究会では、無水系及び含水系の天然試料・高温高圧合成試料について、電子顕微鏡による微細組織観察、パルス中性子回折による結晶構造解析、2次イオン質量分析を用いた精密含水量測定、第一原理計算や電顕データ解析のソフトウェア開発に基づく結晶の物性・構造解析などの成果を、多角的に議論する。そして、小惑星の相互高速衝突やマントル深部における、オリビンの相変化と含水化のプロセスの理解を深める。

(4) 議題 (もしくはプログラム)

3/9(月)

13:45-13:55 富岡尚敬(JAMSTEC)

イントロダクション

13:55-14:35 富岡尚敬(JAMSTEC)

隕石の衝撃変成および超高压実験におけるイプシロン相の形成

14:35-15:15 河津励(理化学研究所)

イプシロン相の第一原理計算

15:15-15:25 休憩

15:25-16:05 瀬戸雄介(神戸大学)

電子回折動力学シミュレーションと惑星物質への応用

16:05-16:25 上村伸樹(大阪大学)

レーザー動的超高压下におけるペロブスカイト構造物質の振る舞いについて

16:25-16:55 片桐健登(大阪大学)

XFELによるナノ多結晶ダイヤモンド超高速変形その場観察

3/10(火)

10:00-10:20 関根利守(北京高压科学研究中心)  
中国におけるレーザー衝撃実験の現状

10:20-11:00 清水健二(JAMSTEC)  
SIMS による火山ガラス・無水鉍物の含水量測定法

11:00-11:40 奥地拓生(岡山大学)  
中性子による含水鉍物の水素配置と水素拡散

(5) 参加者

11名

飯高敏晃(理化学研究所)、河津 励(理化学研究所)、関根利守(北京高压科学研究中心)、尾崎典雅(大阪大学)、片桐健登(大阪大学)、上村伸樹(大阪大学)、瀬戸雄介(神戸大学)、奥地拓生(岡山大学)、清水健二(JAMSTEC)、岡崎啓史(JAMSTEC)、富岡尚敬(JAMSTEC)

<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した極限の探求」  
第7回サブ課題C会議「地球惑星深部物質の構造と物性」 報告書

- (1) 日時 令和2年3月30日(月) 14:00～14:30
- (2) 場所 Skype によるリモート会議
- (3) 概要 ポスト「京」萌芽的課題サブ課題Cの責任者、分担研究者、研究協力者代表がリモート会議に集い研究成果の総括および将来への展開について議論した。
- (4) 議題
- 14:00-14:10 飯高敏晃(理研) サブ課題C責任者  
平成31年度の研究成果の総括
- 14:10-14:20 宮崎剛(物材研) サブ課題C分担研究者  
極限環境CONQUEST公開の報告  
<http://order-n.org/>
- 14:10-14:20 梅本幸一郎(東工大) サブ課題C協力研究者代表  
太陽系外惑星の内部構造に関する研究の報告
- (5) 参加者  
3名  
梅本幸一郎(東工大)、宮崎剛(物材研)、飯高敏晃(理研)

<資料 2 3 >

滞在型国際ワークショップ

「Computational Approaches to Quantum Many-body Problems(CAQMP 2019)」

報告書

- (1) 日時 令和元年7月16日(火)～8月8日(木)
- (2) 場所 東京大学物性研究所(柏市) 大講義室
- (3) 概要 テンソルネットワーク法をはじめとする数値計算手法に関する研究発表と討論
- (4) 議題
  - 1) Tensor network, quantum Monte Carlo method
  - 2) Frustrated spin systems
  - 3) Topological quantum phases
  - 4) Informatics, data analysis, machine learning
  - 5) High-energy physics
  - 6) Experiments
  - 7) etc.
- (5) 参加者  
研究代表機関、研究協力機関から6名(研究協力機関以外からも多数参加)  
藏増嘉伸(筑波大)、藤堂眞治(東京大)、櫻井鉄也(筑波大)、  
小坂英男(横国大)、西野友年(神戸大)、川島直輝(東京大)

<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」  
第 1 回グループリーダー会議 報告書

- (1) 日時 令和元年 9 月 6 日 (金) 10 : 00 ~ 12 : 00
- (2) 場所 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 701 号室

(3) 議題

- 1) 今後の成果のまとめ方について
- 2) 各チームの成果の要点のサマリ
- 3) 各チームのソフトウェアとその公開

(4) 参加者

6 名

藏増嘉伸 (筑波大)、藤堂眞治 (東京大)、櫻井鉄也 (筑波大)、小坂英男 (横国大)  
西野友年 (神戸大)、川島直輝 (東京大)

<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じた極限の探求」  
第2回グループリーダー会議 報告書

(1) 日時 令和元年10月7日(月) 17:30~19:30

(2) 場所 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト 205号室

(3) 議題

1) 今後の成果のまとめ方について

2) 各チームの成果の要点のサマリ

(4) 参加者

6名

藏増嘉伸(筑波大)、藤堂眞治(東京大)、櫻井鉄也(筑波大)、小坂英男(横国大)

西野友年(神戸大)、川島直輝(東京大)

<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」

2019年度第1回サブ課題A—B連携研究会 報告書

- (1) 日時 令和元年7月13日(土) 14:00~18:00
- (2) 場所 東北大学東京分室 会議室A (サピアタワー10階)
- (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。さらに、8月1日開催の第3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発表内容について検討を行った。
- (4) 議題
  - 1) 8月1日のポスト「京」萌芽的課題シンポジウムでの発表内容について、その時点での現状の発表
- (5) 参加者
  - 13名
  - 久保百司、大谷優介、宮崎成正、川勝年洋、森井洋平(東北大学)、齋藤拓也(東京大学)、波多野恭弘、尾方成信、石井明男(大阪大学)、下川智嗣、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 27>

ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」A、B、重点課題7E、7G連携会議  
報告書

- (1) 日時 令和元年10月11日(金) 14:00~19:00  
(2) 場所 東北大学東京分室 会議室A (サピアタワー10階)  
(3) 概要 萌芽的課題 基礎科学の挑戦A「破壊とカタストロフィ」、B「相転移と流動」、重点課題7E「高信頼性構造材料」、7G「共通基盤シミュレーション手法」の連携研究について打ち合わせを行った。各研究者よりそれぞれの研究内容についての説明を行い、連携研究の内容について議論を行った。

(4) 議題

- 1) 今後の連携研究の打ち合わせ

(5) 参加者

15名

重点課題7E:

毛利哲夫(東北大学)、大野かおる(横浜国立大学)、澁田靖(東京大学)、  
田村友幸(名古屋工業大学)

重点課題7G:

陳迎(東北大学)

萌芽的課題A:

久保百司(東北大学)、下川智嗣(金沢大学)、山口正剛(原子力機構)、  
石井明男(大阪大学)

萌芽的課題B:

川勝年洋、村島隆浩、森井洋平(東北大学)、野口博司(東京大学)、津田伸一(九州大学)

オブザーバー参加: 高橋昭(東北大学)