

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 超伝導新奇応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの基盤構築

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）：

研究代表者

町田 昌彦（(独) 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター
シミュレーション技術開発室 研究主幹（室長））

主たる共同研究者

林 正彦（秋田大学教育文化学部 准教授）

加藤 勝（大阪府立大学大学院工学研究科 准教授）

大橋 洋士（慶應義塾大学理工学部 教授）

小山 富男（東北大学金属材料研究所 助教）

柳澤 孝（(独) 産業技術総合研究所 主任研究員）

林 伸彦（大阪府立大学ナノ科学・材料研究センター 講師）（平成 21 年 4 月～）

3. 研究実施概要

本研究では、超伝導の新奇応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション基盤の構築という目標を掲げた。具体的には、超伝導および関連する現象を、その現象が現れる空間スケールから三つ（マイクロ・メゾ・マクロ）に分け、各スケールの代表的テーマに対し、新たな理論・シミュレーション手法を開発する一方、開発したシミュレーション手法を用いて、各テーマの問題解決に実際に取り組んだ。

まず、マイクロにおいては、超伝導現象が実現するそのメカニズムの解明に迫るため、町田（原子力機構）G、柳澤（産総研）G、大橋（慶應大）G が理論およびシミュレーションの研究開発を行った。町田 G と柳澤 G は、高温超伝導が強相関電子系において現れることに着目し、強相関電子の電子状態を精密に計算可能とする計算手法（厳密対角化法、密度行列繰り込み群法、量子モンテカルロ対角化法）を開発し、これまでほとんど例のない規模での計算を可能にする、超並列化と超並列シミュレーションを行った。厳密対角化に関しては、その主要なルーチンである密行列対角化部分を、K コンピュータのライブラリとしての開発・整備し、さらに公開したが、その成果は 2006 年のゴードン・ベル賞のファイナリストとしてノミネートされた。現在では、その極めて高いパフォーマンスが注目され、K コンピュータ上のアプリケーションにおいても利用されている。密度行列繰り込み群では、困難と思われた超並列化に成功し、その成果をまとめた論文は 2010 年の応用数理のベストオーサー賞を受賞し、強相関由来の超伝導機構の検証を高精度に行う準備が整っている。量子モンテカルロ対角法では、従来の 2 次元強相関電子系での超伝導出現が、コストリッツ・サウレス的な転移をすることを初めて明らかにした。大橋 G は、高温超伝導からさらに夢のある室温超伝導実現の可能性を探索するため、モデル物質系としてフェルミ原子ガスの超流動を対象とすることで、室温超伝導が安定に現れることが理論的に可能であること、および実現された際に期待される現象を予言することに成功した。

メゾにおいては、超伝導の新奇デバイス応用を実現化させるため、現時点で極めて優れた可能性を有する三つの現象（高温超伝導体からの THz レーザー発振、グラフェン・強磁性体と超伝導との接合、磁場下のナノ超伝導平板及びネットワーク）に着目し、町田G、小山（東北大）G、林（秋田大）G、加藤・林（府立大）G、柳澤 G が、シミュレーション手法の研究開発と新奇デバイス機能の探索を行った。THz レーザー発振では、小山 G が、空間スケールの約 1 万倍異なる媒質間での電磁波伝搬の接続

問題を解決するためのマルチスケール・シミュレーション手法の開発に成功した。こうした接続問題は全ての物理・工学の共通問題であり、その解決法の用途は広い。グラフェンおよび強磁性体と超伝導体との接合系においては、林 G と柳澤 G が精力的に研究を進め、ナノスケールでの制御により、クリアな機能変化が得られることを発見し、特に柳澤 G はその成果を新聞発表した。磁場下でのナノ超伝導平板やネットワークに対しては、加藤・林 G がナノレベルの物性に対し、初めて微視的レベルからアプローチできる有限要素法を利用した手法を開発し、磁束分子等の奇妙な量子状態を発見した他、磁束の運動の現象論を改良することに成功している。

マクロにおいては、多数の磁束量子の運動によるエネルギー散逸を防ぐため、磁束のピン止めの基本的メカニズムを調べ、町田 G が小山 G および林 G と協力し、時間依存のギンツブルク・ランダウ方程式の大規模並列シミュレーションを実現させ、ホール効果等の基本的問題の解決に貢献した他、規則的に並ぶナノスケールの欠陥列の存在下での、磁束運動の効果的抑制についての知見を得ることに成功した。

以上、本研究では、マルチスケール・シミュレーションを含め新規計算手法の開発に成功し、各分野においてインパクトを与えた一方、計算手法を公開するなど、成果普及にも努めた。

4. 事後評価結果

4-1. 研究の達成状況及び得られた研究成果（論文・口頭発表等の外部発表、特許の取得状況等を含む）

本研究は、超伝導という分野でのマイクロ（超伝導発現機構解明）、メゾ（超伝導利用の新奇デバイス提案）からマクロ（超伝導線材特性解析）までの一貫したシミュレーション研究開発である。マイクロでは、フェルミ原子ガスを通して類似性による室温超伝導の現象解明を行って、そのシミュレータ開発し、室温超伝導の安定な実現が理論的に可能であること、およびその実現する現象の予言に成功した。シミュレータ開発ということでは、それからの派生物（密度行列繰りこみ群など）も含め一定の成果が得られた。メゾ・マクロも同様に、THz レーザー発振では、空間スケールの約 1 万倍異なる媒質間での電磁波伝搬の接続問題を解決するための、マルチスケール・シミュレーション手法の開発に成功する等、各々のシミュレータ開発では成果が得られた。しかし、新奇デバイス提案あるいは線材の特性解析という最終目標の成果は、まだこれからに期待しなければならないという状況なので、全体としては、概ね評価できるというところである。ただし、この評価は、当初の目標設定にかなり高いものがあり、その目標に対しての評価であることを付記しておく。事実、研究内容はこの分野での世界をリードするものであり、研究成果の国際的な評価は非常に高い。

当初計画では想定されていなかった新たな展開として、本研究で得られたペタコン向けコード、固有値計算（密行列対角化ソルバー **Eigen-k**）および密度行列繰り込み群法は、「京」の上でのライブラリとして広く一般の研究者にも使われるよう計画されており、戦略分野 2 の 3 課題へ既に提供済みである。また、次世代スパコン・グランドチャレンジ「ナノ統合」プロジェクトにおける、少なくとも二つのアプリケーション、フラグメント **MO** 法および動的密度行列繰り込み群法で採用され、その高速化に大きな役割を果たしている。これは、本研究の本来の目的ではないけれども、その成果として望ましい展開である。また、鉄系超伝導体の発見に伴う研究開発を実施し、鉄系超伝導体への応用を試みたことは望ましい展開である。

外部発表に関しては、論文発表（欧文：312 件、和文：6 件）、招待講演（国際会議：76 件、国内会議：44 件）、口頭講演（国際会議：74 件、国内会議：318 件）、ポスター発表（国際会議：216 件、国内会議：52 件）のいずれにおいても件数は十分であり、非常に優れていると評価できる。また、2006 年米国電気電子学会ゴードン・ベル賞ファイナリスト選出、2010 年応用数理学会ベストオーサー賞等のいくつかの著名な賞も受賞しており、研究に対する外部からの評価も高いということも大いに評価できる。

知的財産権については、メゾ・マクロ領域からの多くの特許出願が望まれたが、シミュレーションに

よる成果の特許というのはあまり前例がないので、1件ではあるが先駆として評価したい。

研究の進め方については、研究代表者の所属機関である原子力機構を中心に、秋田大、東北大、慶應大、大阪府立大、産総研という多くの異なる組織をまとめ、計画した各研究題目の当初目標を達成させた指導力は優れたものであると大いに評価できる。

4-2. 研究成果の科学技術や社会へのインパクト、戦略目標への貢献

本研究は、超伝導の基本原理の解明から、THz 発振を含むその応用までをカバーするもので、研究内容は世界をリードしており、国際的な評価も高い。得られた成果に関しては、まだこれからに期待しなければならないところもあるが、研究のレベルや重要度は高く、科学的・技術的インパクトは大きいと評価できる。また、量子力学や量子化学における基本的な方程式の解法において、大規模行列の対角化は中心的な問題の一つであるが、本研究はこの問題に挑戦し、大規模行列対角化の並列計算による高速化を実現するという、計算法で期待されるブレイクスルーをもたらした。

今後、研究成果のさらなる展開が期待できるかについては、本研究はこの超伝導/超流動分野での世界をリードするものであり、成果を上げるのはこれからであるものの、さらに研究を深化・発展させることができるならば、成果のさらなる展開が期待できる。具体的には、フェルミ原子ガス超流動現象を解明することによって、超伝導現象の本質に迫る成果が得られるものと想定され、また、2次元強相関電子系の量子状態を厳密に解明できることが想定される。

戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しとしては、本研究は、超伝導に関する高度なシミュレーション技術開発や日本の研究者グループの形成において、大きな貢献をした。また、本研究は、マイクロ・メゾ・マクロと一貫した超伝導分野のシミュレーション技術を開発するものであり、しかも、基礎から応用まで幅広い視野をカバーしているので、その成果が超伝導材料開発、特に室温超伝導の現象解明やその材料開発につながるならば、社会的なインパクトは極めて大きい。今後さらに、計算物理の現実的な応用を示すことのできる研究へと発展することが期待される。

4-3. 総合的評価

本研究課題は、超伝導の基本原理の解明から、THz 発振を含むその応用までをカバーするものであり、本研究により、超伝導現象のマルチスケール/マルチフィジックスシミュレーションコードが開発され、超伝導/超流動の理解が深まった。研究内容はこの分野で世界をリードするもので、国際的に注目される研究成果を上げており、国際的な評価は非常に高い。既に述べたように、本研究領域の趣旨および当初の目標に照らせば、まだこれからに期待するところもあるが、発表された論文の数や HPC 技術の展開を図るなど成果も十分上がっており、高く評価できる。

また、本研究から得られた成果である固有値計算及び密度繰り込み群法は、今後広く他の分野の研究者にも使われて行くことが計画されており、その成果の貢献は非常に大きく、高く評価したい。これらのプログラムの京コンピュータ向けの並列化および性能チューニングは十分行われ、成果は実際のアプリケーションの一部に既に使用されている。例えば、この成果が組み込まれた RSDFT コードがゴードン・ベル賞を獲得するなど、今後成果を上げることが期待される。このように、計算物理としての成果に加え、京コンピュータを始めとするスーパーコンピュータへの積極的な取り組みが高く評価される。