

重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発
サブ課題D: 航空機的设计・運用革新を実現するコア技術の開発(宇宙航空研究開発機構・高木亮治)

目標
 従来の数値解析では評価できなかった設計課題(航空機実機詳細形状に対する離着陸時の最大揚力の予測、還音速バフェットの予測など)を、精度、解析時間の両面から設計に使えるレベル評価可能なアプリケーションプログラムを開発する。

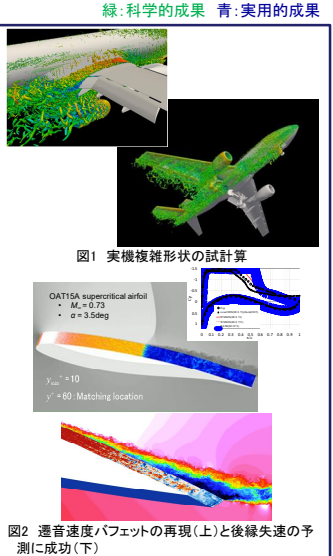
成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)実機複雑形状に対して、階層型等間隔直交構造格子生成を達成し、試計算を実施(図1)
 成果(2)新たな壁面モデルの実装と基礎検証を完了し、還音速バフェットの再現と後縁失速の予測に成功(図2)

航空機産業の国内生産額は、過去5年間で1.1兆円から1.8兆円と年率約5%で急成長しており、2030年には3兆円を超えることが期待されている。本サブ課題では、ポスト「京」の計算能力をフルに活用することにより、航空機設計の要となる空力設計技術を飛躍的に高度化することを狙っている。

(1)の成果に関しては、着陸装置(脚、タイヤ等)や高揚力装置のついたJSM、CRM、LEGの実機複雑形状(レイヤー格子なし、LES壁モデルなし)に対して、試解析を実施し、問題なく計算ができることを確認した。また、STL形状から格子を自動生成し、数億点規模の格子で細かな構造も再現できることを確認し、基盤ソルバーのレイヤー格子への対応と機能検証として、45億点規模の試計算を実施した。これにより、離着陸時の最大揚力係数の推算が可能となり、その向上を図ることができれば、滑走路長の短い空港にも離着陸が可能となる他、高地空港(空気密度が低い)での運航柔軟性、空港周辺への騒音低減となるため、航空機の商品価値の大幅な向上に繋がる。(2)の成果に関しては、開発された壁面モデルにより、飛行限界を決める、主翼上面に発生する衝撃波と境界層の干渉による「離」振動現象である還音速バフェット現象の再現や後縁失速の予測に成功し、前者については、その精度の検証およびメカニズムの提案を行った。現在、壁面モデルの研究開発として、LES平衡壁面モデルの開発中のコードFFVHC-ACEへの導入と平板乱流境界層解析での予測精度の検証、非平衡壁面モデルの研究開発を実施している。これにより、従来の解析では不可能であった飛行限界の評価が可能となり、シミュレーションにより飛行試験のリスクを大きく低減させることが可能となるため、航空機の開発期間の大幅な短縮と開発コストの大幅な削減に繋がる。

最終達成目標としては、ポスト「京」で実施する解析対象と同等な実機複雑形状に対して計算格子が作成できることを確認し、また、最大揚力の予測精度および還音速バフェットの予測精度に関しては単独翼などを対象とした解析結果を、既存の風洞実験値と比較することにより解析精度を確認する。



重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発
サブ課題E: 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発(東京大学大学院・奥田洋司)

目標
 母材の接触状態を詳細に計算し、溶接による収縮を高精度に予測(従来は実測値に対して数十%であるが、これを数%)にするための、数m規模の解析領域に存在する数mmの溶融部を数μmで解像することが可能なソルバーを開発する。

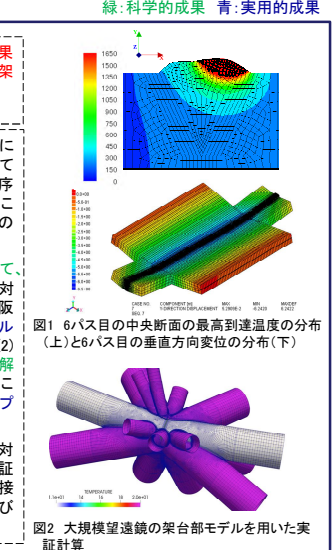
成果内容と科学的・社会的意義

成果(1)超大規模・高精度強連成解析ソルバーを開発し、数億自由度の接触問題の解析に適用し、効果を実証(図1)。また、これまでの計算規模では予測精度が十分ではなかった大規模望遠鏡の架台部モデルの問題を用いて、予測精度を検証(図2)
 成果(2)プリ・ポストプロセッサのプロトタイプが完了

日本の基幹産業である自動車を始め、クレーン、圧力容器、タービン、配管、LNGタンクなどの製造には、様々な鋼板の溶接が行われており、この工程は生産時間やコストに大きく影響を与えるものとなっている。本サブ課題では、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する。溶接工程における溶接順序探索の高精度化、逆ひずみ量推定の高速化を目的とし、高度成形・溶接シミュレータを開発している。これにより、生産時間の短縮やコストダウン、熟練工によるトライアル&エラー依存からの脱却、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する。

(1)の成果に関しては、材料構成則を整備し、接線係数マトリックスの連成成分を導出することによって、熱構造一体型連成手法の構築、コードの動作確認するとともに、数億~数百億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と、部品モデル(~数億自由度)に対する精度をJWRJAN固有ひずみ法コード(阪大接合研)との比較し、良好に一致することを確認した。これにより、超大規模・高精度強連成解析ソルバーを持つシミュレータが完成し、溶接工程における「京」全体規模の永久変形予測を実現できる。(2)の成果に関しては、開発環境Electronを使用してウェブブラウザで動作するプリ・ポストの開発し、溶接解析の機能(溶接線、溶接条件の設定機能、複数バスの設定機能など)を拡張、動作検証を実施した。これにより、プレス成形と溶接の一連の工程を一つのプリ・ポストプロセッサで解析することが可能となり、プレス成形解析から溶接解析に至るワークフローをサポートできる。

最終達成目標としては、超大規模・高精度強連成解析ソルバーとして、数千億自由度規模の問題に対する並列性能の最適化と全体モデル(自動車や重機械フレームなどの~数十億自由度)に対する実証解析を実施し、また、プリ・ポストプロセッサとして、プレス成形のスプリングバックによる残留応力を溶接の初期条件として渡す機能を実装し、動作検証を行い、溶接工程における適切な溶接順序探索および逆ひずみ量推定が可能となることを確認する。



重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発
サブ課題F: マルチスケール熱可塑性CFRP成形シミュレータの研究開発(東京大学生産技術研究所・吉川暢宏)

目標

熱可塑性CFRPの合理的設計を通じたものづくり力強化のための、マルチスケール解析技術を活用した熱可塑性成形シミュレーション技術の開発し、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする。

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果(1)炭素繊維と樹脂を区分した考慮したモデルによる結果をマルチスケール展開し、高精度の熱可塑性CFRP成形シミュレーションが可能なマクロスケール熱可塑性成形シミュレータが完成(図1)
- 成果(2)開発したシミュレータの効果の検証として、ジェットエンジンファン部材(Structural Guide Vane)の成形シミュレーションに適用中(図2)

ジェットエンジンファンブレードや自動車ボディのCFRP(炭素繊維強化プラスチック)化においては、その成形性の高さから薄さ0.1 mm程度の熱可塑性プリプレグシートを積層し加熱成形する手法が有望視されており、プリプレグシートの形状や積層構成を設計変数とする高度な最適設計に期待が寄せられている。本サブ課題では、成形後の繊維配置を正確に予測し、合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とする、熱可塑性成形シミュレーション技術を開発する。これにより、金型修正の手戻り抑止(経費削減:15百万円、工期短縮:45日)、最適成形条件探索の効率化(経費削減:25百万円、工期短縮:75日)を実現し、設計および製造プロセスの合理化による国内メーカーの優位性を確立する。

(1)の成果に関しては、炭素繊維と樹脂を明確に区分するマイクロモデルから正確なマクロ材料モデルを構築し、熱伝導-構造接触連成解析機能を整備して、精度の高い成形シミュレーションを実施可能とした。CFRP材料の熱可塑性変形特性を正確に予測可能であることを、プリプレグシートを8層積層した試験体の成形後のゆがみ予測問題で検証した。(2)の成果に関しては、ジェットエンジンファン部材であるStructural Guide Vane (SGV)のプレス成形シミュレーションを実施し、内部に発生する複雑な応力分布と残留ひずみ発生メカニズムを明らかにした。実成形品との照合を行いシミュレータの実効性を確認することで、シミュレーション結果を活用した設計及び製造の高度化を推進するとともに、試作回数を激減させ、開発コスト削減に貢献することが可能となる。

最終達成目標としては、実効性を確認したシミュレータを活用し自動車ボディあるいはジェットエンジンの実部品レベルの熱可塑性成形シミュレーションを実施し、繊維配向の乱れなどの製造誤差を低減する成形プロセスの策定と設計において勘案すべき製造誤差の見積もりを行い、熱可塑性CFRPのマルチスケール成形シミュレータを活用した最適成形プロセスの策定と合理的設計のための製造誤差を見積もることができることを確認する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

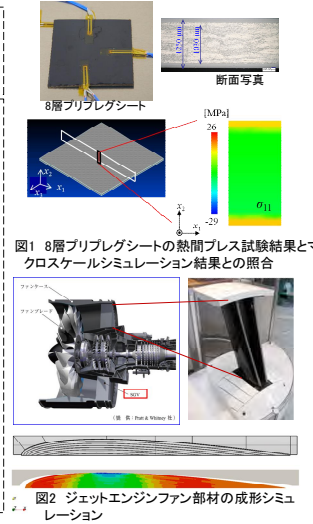


図1 8層プリプレグシートの熱間プレス試験結果とマクロスケールシミュレーション結果との照合

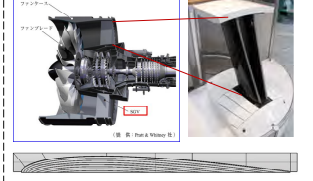


図2 ジェットエンジンファン部材の成形シミュレーション

重点課題9

宇宙の基本法則と進化の解明

素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。

本課題の主な成果

1. ポスト「京」(富岳)の時代に本格化する大型実験・観測計画のデータと比較可能な理論予想のためのシミュレーションコードが整った(MNRAS 482, 4846等)
2. B中間子崩壊の計算において、SuperKEKB実験で必要とされる精度の達成に道筋
3. バリオン間力の格子QCD計算での系統誤差に関して長年の問題を解決(JHEP 1903, 007)、ストレンジネスを含むバリオン間力を計算し実験的に未発見の状態を予言(PRL120, 212001)
4. 水銀同位体で中性子数とともに繰り返しの量子相転移を発見するなど、ポスト「京」で初めて可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功(Nature Physics 14, 1163)
5. 中性子星連星の合体現象を解明(林忠二郎賞、仁科記念賞、木村利栄理論物理学賞、日本物理学会若手奨励賞、日本天文学会研究奨励賞)し、かつ来たる観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群を整備
6. 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を解明(MNRAS 487, 2718)し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題A: 究極の自然法則と宇宙開闢の解明(サブ課題代表者: 高エネルギー加速器研究機構・橋本省二)

目標

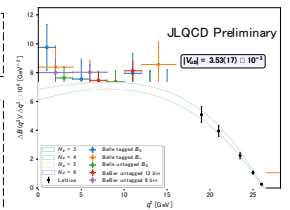
素粒子と初期宇宙のシミュレーション研究により、究極の自然法則と宇宙開闢の解明に貢献する。具体的には、B中間子セミアレプトニック崩壊形状因子の精密計算、有限温度QCD相構造サーベイの予備計算、超弦理論に基づく宇宙開闢のシミュレーションを行う。

成果内容と科学的・社会的意義

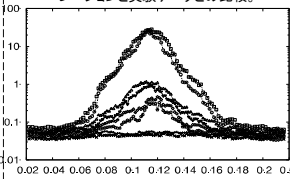
成果(1) B中間子セミアレプトニック崩壊形状因子の計算において、SuperKEKBで必要とされる精度の達成に道筋。
成果(2) QCD相転移において新たな対称性の回復現象を発見。QCD相構造の全体像解明に向けた第一歩に。
成果(3) 超弦模型計算における符号問題を扱う新手法を開発し、インフレーションによる空間膨張を再現可能に。

- (1) B中間子のセミアレプトニック崩壊 $B \rightarrow \pi l \nu$ を記述する形状因子の格子QCD計算を実行した。格子間隔、クォーク質量などについての内外挿において系統誤差が制御できることを確認した。これにより、小林益川行列要素 $|V_{ub}|$ の決定に必要な形状因子を、Bファクトリー実験のデータと同程度の精度で計算することが可能になった。ポスト京においてさらに高精細かつ高統計の計算を行うことで、2019年から高エネルギー加速器研究機構(KEK)で本格的に始まったSuperKEKB実験で必要とされる精度を得ることが可能になる。素粒子の標準模型の精密検証に向けて、大規模実験プロジェクトとの連携を深める。
- (2) (フレーバー数2の)QCDの有限温度相転移の高温相において、クォーク質量が小さい領域でトポロジカル感受率および軸量子異常が消失する現象を観測した。この発見は、有限体積効果の検証、中間子スペクトルにおける検証を加えて、さらに確実なものになった。カイラル対称性を保つ格子定式化を採用した計算により従来想定されていた対称性の破れ(およびその回復)のパターンとは異なる結果が得られたことで、QCD相図の理解に変更が迫られることになる。ストレンジクォークを含む現実的な(フレーバー数3の)理論について大規模なサーベイを行う準備が整った。
- (3) 超弦理論の定式化の一つであるタイプIIB行列模型に基づく宇宙開闢のシミュレーション研究により、宇宙初期に時空が急速に膨張する様子を再現することを究極の目標として予備研究を進めた。計算量を削減する近似による計算では連続的な時空が得られないという問題に直面し、この問題を乗り越えるためには、分配関数に現れる符号問題を適切に扱う必要があることが明らかになった。符号問題を扱う手法として、複素ランジュバン法の研究を進め、その適用限界を明らかにするとともに、超弦理論に適用することで連続的な時空が得られる可能性が出てきた。ポスト京でのより大規模な計算により、宇宙開闢の解明に向けた本格的なシミュレーションを開始することができる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



B中間子セミアレプトニック崩壊 $B \rightarrow \pi l \nu$ の微分崩壊率。シミュレーションと実験データとの比較。



超弦理論のシミュレーションにより、時空が一樣に広がることを示す図。

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題B: 物質創成史の解明と物質変換(サブ課題代表者: 京都大学基礎物理学研究所・柴田 大)

目標

- (1) ポスト京に向け、バリオン間力計算の理論手法・アルゴリズム・コードを開発・確立する。
- (2) 重原子核の構造計算を遂行するとともに、原子力工学など他分野への応用に重要な基礎的なデータを得てポスト京に備える。
- (3) 中性子星連星合体や超新星爆発のメカニズムの理解を可能にするポスト「京」用計算コードの開発。

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果(1) バリオン間力の格子QCD計算における手法間の矛盾問題を解決し、HAL法の信頼性を確立した。
- 成果(2) 物理点でのバリオン間力の格子QCD計算を行い、新たなダイバリオン状態の存在を発見した。
- 成果(3) 炭素12の第一原理計算や、水銀など重い原子核の計算可能な限界に挑戦した計算に成功。
- 成果(4) 中性子星連星の合体現象を解明し、かつ観測結果との比較が可能な計算コード群が完成。
- 成果(5) 6次元ニュートリノ輻射輸送を完全に考慮した超新星爆発コードが完成。

- (1)の成果により、バリオン間力の格子QCD計算において、直接法とHAL QCD法の二手法間の結果が矛盾するという長年の問題を解決した。直接法では励起状態の混合による系統誤差により誤った結果が得られる一方、HAL法では系統誤差がコントロールされており信頼性のある計算が可能であることが明らかになった。
- (2)の成果により、ストレンジネス $|S|=0-6$ のバリオン間力を物理点で系統的に計算した。新たなダイバリオン状態(Ω 状態、 $N\Omega$ 状態)が存在することを初めて発見した。これらの状態は重陽子とほぼ同様のユニタリー極限近傍状態であることが分かった(図1)。また格子QCD計算に基づくハイペロン間力を用いて、その中性子星状態方程式への影響を精査した。
- (3)の成果により、第一原理計算から炭素12のボイル状態を検証可能とした。散乱実験の結果とつぎあわせ検討することにより、原子核におけるクラスター構造の理解を深めた。また、ポスト京で初めて本格計算可能となる質量数200領域原子核の試行計算に成功。水銀同位体で中性子の数とともに繰り返し量子相転移が起こることを、大規模計算により理論的に発見した。錫やサマリウムなどの構造進化も含め、安定超重核元素の探索や魔法数、中性子過剰エキゾチック核の構造原理解明に寄与し、rプロセス元素合成、核分裂解明など基礎・応用の研究につながる。
- (4)の成果により、中性子星連星の合体現象を解明し、かつ来たる観測結果を解釈する上で必須の計算結果を導出するためのコード群が整備された。本成果は、ポスト「京」の時代に本格化する予定の重力波と電磁波のマルチメッセンジャー観測の結果に解釈を与えるのに必須の精度良い理論モデルを導出可能にした。
- (5)の成果により、ポスト「京」完成後、超新星爆発の第一原理計算が現実的に可能になった(図2)。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

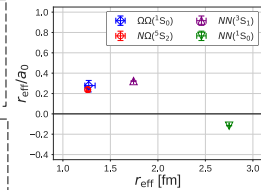


図1 物理点格子QCDで予言した $N\Omega$, $\Omega\Omega$ ダイバリオン状態に対する散乱パラメータ

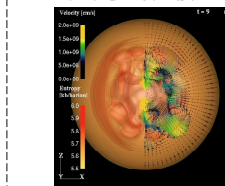


図2 6次元超新星爆発の計算結果。エントロピー等値面と速度場を表示

重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

サブ課題C: 大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明

目標

宇宙のダークマター分布の非線形成長を追い、さらに電磁流体力学や輻射輸送などの、天体形成に関わる基礎物理を取り入れたマルチフィジクスシミュレーションを遂行する。宇宙望遠鏡や地上大型望遠鏡を用いた観測ビッグデータと比較し、宇宙138億年の進化を解明する。

成果内容と科学的・社会的意義

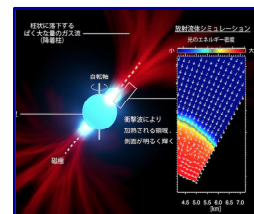
- 成果(1) 宇宙の構造形成シミュレーションにより大局的および局所的なダークマター分布を明らかにした。
- 成果(2) コンパクト天体降着流の一般相対論的輻射磁気流体シミュレーションを遂行した。
- 成果(3) ブラソフ-ポアソン方程式ソルバーを開発し、6次元位相空間内でのニュートリノ分布を明らかにした。

(1)の成果により、86億個の質量粒子を用いた大規模Nシミュレーションを100ラン以上行った。この出力をデータベース化し、主成分解析やガウス過程を実装した「エミュレータ」を開発し、物質分布の2点相関関数など主要統計量の高速計算を可能にした。次に、5500億個の質量粒子を用いた宇宙の構造形成シミュレーションを「京」上で行った。銀河形成の基本要素であるダークマターハローの形成進化のカタログを生成し、天文学の研究者らが使えるように整備した。さらにカタログ上で恒星分布を準解析的にモデル化し、恒星ストリームや銀河古成分系の数値カタログを生成した。特に現在銀河系で観測される恒星ストリームは、母天体が矮小銀河であればそれは $0.5 < z < 2.5$ の特徴的な期間に銀河系に取り込まれたことを明らかにした。

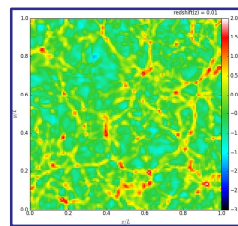
(2)の成果により、ブラックホール周囲の光の軌道や、コンプトン散乱などのガスと物質の相互作用を正しく解けることを示した。また、モーメント法に基づく一般相対論的輻射磁気流体コードの最適化を行い、ブラックホールおよび中性子星周りの降着流の計算を行うことができた。本成果により、中性子星への超臨界円盤降着が可能であることを一般相対論シミュレーションで世界で初めて示し、X線望遠鏡により発見されたSS433やLULXと呼ばれる時間変動天体の正体が中性子星である可能性を示唆した(右図)。また、高精度散逸性磁気流体コードCANS+を拡張、最適化し、多くの天体物理学およびプラズマ物理学の研究者が使用できるように整備した。非熱的粒子生成過程を解明するため、3次元プラズマ粒子シミュレーションを実施し、強い天体衝撃波近傍での電場と磁気乱流による電子加速過程を示した。

(3)の成果により、無衝突ボルツマン方程式(ブラソフ方程式)の数値解の正値性・単調性を満たしつつ、空間7次精度を達成する数値解が得られた。宇宙論的な共動座標系を採用し、宇宙大規模構造形成に応用した(右図)。本成果は広域銀河サーベイにより得られる宇宙の大域的物質分布と比較することができる。特に、初期宇宙から残存するニュートリノが物質分布に及ぼす影響を正確に測定することができる。その統計解析からニュートリノの質量和に強い制限を与えることができる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



高精度X線ハルサーの輻射流体シミュレーション。中性子星への降着流を再現



ブラソフコードを用いた宇宙の大規模構造形成シミュレーション。

萌芽的課題1-1

課題名 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)

極限を探求する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

本課題の主な成果

1. 課題全体として、莫大な情報から有用な部分だけを抽出しマルチスケール性を解明する「インフォメーションディステーション」という新分野の端緒を築いた(Comp. Phys. Commun., 236 (2019) 65-71, Atmos. Chem. Phys., 18 (2018) 16619-16630)。
2. 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食を扱える1億原子分子動力学コードを開発するとともに、地震と材料破壊で共通、相違する統計則の一端を解明した。
3. マルチスケールシミュレーションと超並列分子動力学シミュレーションを用いて、複雑流動の流動特性の再現に成功した(Macromolecules, 52 (2019) 3951-3964)。
4. 極限環境シミュレータを開発し、新含水鉱物を予測・発見、地球表面から最深部に渡る水輸送現象の一端を解明した(Nature, 547 (2017) 205-208)。
5. テンソルネットワーク法等を利用した量子多体問題のソルバを開発し、量子情報処理につながる基本的問題に解答を与えた(プレプリントとして、<https://arxiv.org/abs/1901.05786>を公開済み)。

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 (サブ課題代表者: 東北大学金属材料研究所・久保百司)

目標

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を解明する。
材料破壊と地震現象に共通する統計的法則を解明する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

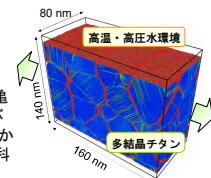
- 成果(1) 亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱える分子動力学法に基づくシミュレーションコードの開発
- 成果(2) 材料のせん断破壊の亀裂成長を支配する物理法則の解明
- 成果(3) 境界積分法断層破壊シミュレーションコードの高速化・高度化と地震波放出過程の再現・予測
- 成果(4) 金属単結晶や金属ガラスの変形・破壊現象と地震現象の統計性に現れる類似性と相連性の発見

(1)の成果は、化学反応を扱うことが可能な分子動力学シミュレーションコードLASKYOを基礎に、亀裂先端の化学反応・亀裂生成・腐食・変形を扱えるコードを開発した。さら「京」向けの最適化を行い、1億原子系で亀裂先端の化学反応および亀裂生成現象のシミュレーションを実現した。さらに金属表面が水と化学反応することで亀裂生成が加速されることを明らかにした。本成果は、粒界、転位、歪み等の内部構造を含む大規模系で化学反応を伴う亀裂生成を扱えるようにしたこと科学的意義が高い。さらに、ナノスケールの化学反応が、サブマイクロスケールの亀裂生成・腐食・変形に与えるマルチスケール性が解明可能になったことで、マルチスケールの理解に基づく破壊力学の再構築への貢献が可能になった。

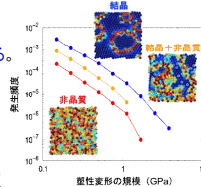
(2)の成果は、加速分子動力学法シミュレーションコードを開発し、「京」上で 10^{17} 倍以上の時間加速を可能とした。また、材料のせん断破壊時の亀裂成長を支配する物理が、摩擦の物理と共通であることを解明した。特に亀裂成長時の破壊せん断力が負のせん断速度依存性を示し材料の不安定破壊を導く温度・せん断速度条件があることを明らかにした。本成果は、分子動力学計算の時空間スケール制限をなくし材料亀裂進展過程全貌の解析を可能としたこと、さらに材料のせん断破壊が、断層破壊と同じ摩擦の物理に基づくことを解明し、時空間スケールや対象物質を超えた統一的破壊現象の理解を導いたという科学的意義を持つ。また、地震や破壊現象に共通する根源メカニズムの解明を通じて安全・安心社会に貢献する。

(3)の成果は、境界積分法に基づく断層破壊シミュレーションコードの高速化を行い、計算時間の大幅な短縮(断面メッシュサイズNの3乗に比例を2乗に比例に高速化)を実現し、加えて材料科学で知られている摩擦法則をコードに実装した。このコードを用いH28年4月の熊本地震とH26年の長野県北部地震の再現シミュレーションを行い妥当性を証明した。このコード開発により、大小様々な屈曲構造が入り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が可能になった。さらに、摩擦法則の探求を通じて、従来は全く異なる分野として発展してきた材料科学と地震学の連携研究が可能になった。

(4)の成果は、単結晶材料の亀裂進展量の統計的性質はベキ分布を示さず、ある条件では指数分布を示した。さらに、金属ガラスの応力降下量の統計的性質は低温ではベキ分布に従い、温度上昇に伴いベキ分布から逸脱することを示し、ベキ分布に従う地震との類似性と相連性を明らかにした。加えて、地震と同じ統計的性質を示す結晶相と非晶質相を混在化させると各単相に比べて大規模変形を抑制することを示した。本成果は、材料における組織や構造、環境の因子が地震と同じ統計性を示すために重要であることが明らかになった。また本成果は、材料破壊と地震に共通する統計的法則の理解に基づく破壊メカニズムの解明とさらには大規模な崩壊を抑制した材料開発に基づく安全・安心社会の構築に貢献するものである。



1億原子から構成される多結晶チタンの水蒸気環境下での化学反応による亀裂生成の加速化



結晶、非晶質、混在構造の塑性変形の規模と強度の関係。地震と同じ統計的性質を示すが、混在化することで大規模変形を抑制。

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(サブ課題代表者:東北大学大学院理学研究科・川勝年洋)

目標

MSSPの実装と、マルチスケールシミュレーションによる雲の形成過程、機械内部流動における気泡成長等とマクロ流動との連携。
 カルマン渦およびナノバブル生成過程に対する超並列分子動力学法とMSSPの比較によるマルチスケール法の検証。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果(1) MSSPおよびマイクロシミュレータの手法の開発とMSSPの作成。
- 成果(2) 高分子流体および相転移流体の流れによる渦および気泡の生成過程の超並列分子動力学法による解析。
- 成果(3) 雲の形成過程および気泡初生のマルチスケールモデルによる解析。

(1)の成果により、流体粒子法を用いたマクロ流動シミュレーションとマイクロモデルを組み合わせたマルチスケールシミュレーションを実現するための汎用プラットフォームであるMSSPを開発し、open MP/MPiハイブリッド並列による大規模計算を実現した。ニュートン流体と粘弾性流体のそれぞれにおけるカルマン渦の実験および超並列分子動力学シミュレーションとの比較を行うことで方法論の定性的/定量的な正確さを証明できた(図1)。さらに、MSSPを弾塑性体へも拡張し、アモルファス固体中でのクラックの進展についてもシミュレーションする方法を開発し、サブ課題Aの弾性破壊との連携に向けての基礎を確立した。本成果は、幅広い混相流動の研究についての定量的な解析ツール群を提供するものであり、本ツール群を混相流動の関与する材料開発に適用することで、開発の加速が期待される。

(2)の成果により、流体中に極微量の高分子や気泡が含まれるときの渦の性質や粘度等の流動特性の大幅な変化を超並列分子動力学シミュレーションで解明することができた。特に、高分子添加によってカルマン渦の周期が長くなるという実験結果の再現および気泡生成における渦の役割について理解できた(図2)。本成果は、極微量の高分子添加による流動抵抗の減少(トムズ効果)や、水中で回転するタービンのまわりでキャビテーションにより発生する気泡の運動など、工学上重要なマルチスケールの問題への解決につながる、応用面でも重要な研究成果であるだけでなく、MSSPの検証のためにも貴重なデータである。

(3)の成果により、雲及び雨滴の形成過程および流体機械内部で生じるキャビテーションのような混相流動に関して、雲粒の形成・合体の過程あるいは気泡初生などのようなマイクロな現象に立脚したマクロ流動を再現することに成功した。その結果、高さと数キロメートルにおよぶ広範囲の領域でのエアロゾルおよび雲粒、雨粒を網羅する全雲粒子の運動と成長を初めて再現することに成功し、また、極低温流体(液体酸素など)において分子スケールで生じ得る気泡核の競合的な粗大化(オストワルド成長)による気泡初生速度と、水においてよく観察されるマクロな既存気泡核を起点とした気泡初生速度が、本質的に同一のモデルで表現し得ることなどがわかった。本成果は、マイクロなモデルに立脚したマクロ流動特性の再現方法を実現するものであり、気象予測および流体機械の設計に大きな寄与を与えるものと期待される。

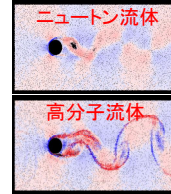


図1: MSSPによる障害物を過ぎる流れにおけるカルマン渦の生成。

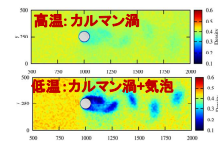


図2: 超並列分子動力学シミュレーションによるカルマン渦とキャビテーションの生成過程。

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(サブ課題代表者:理化学研究所・飯高敏晃)

目標

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実現する。
 極限環境統合シミュレータにおいて複数モジュールを利用した複合計算により、地球惑星深部物質に関する重要問題を解明する。

緑:科学的成果 青:実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

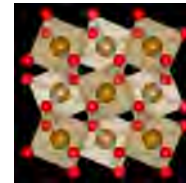
- 成果(1) 極限環境下での定温定圧オーダーN第一原理分子動力学法を実現した。
- 成果(2) 超高压下で安定な水酸化鉄の新しい高压相を理論的に予測し、実験的に発見した。
- 成果(3) 水高压相における核量子効果は高温(270K)でも重要であることを明らかにした。

成果(1)では、オーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTに定温定積分子動力学法(Hirakawa et al., *J. Phys.: Cond. Mat.* 2017 <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa810d>) および定温定圧分子動力学法を導入した。そのさいに比較的小さな密度行列切断半径でストレス計算が可能であることを示し、定温定圧O(N)法第一原理MD法を確立した。オーダーN法第一原理定温定圧MDを高圧下SiO₂系(約1万原子系まで)に適用した。CONQUESTは計算規模、計算安定性の面で大規模第一原理計算をリードするプログラムであるが、本研究によって、高温・高圧下の地球惑星深部物質に対する数万原子規模の大規模第一原理分子動力学にもとづく理論研究が可能になり、多くの新しい知見が得られることが期待される。また、各種材料開発のシミュレーションへの応用も期待される。

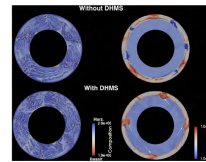
成果(2)では、ダイヤモンドアンビルセルと放射光を用いたX線その場観察実験と、スーパーコンピュータ「京」などを用いた第一原理電子状態計算に基づき、水酸化鉄(FeOOH)が約80万気圧の高圧下で新しい高压相(パイライト型構造)に相転移することを初めて明らかにした。(Nishi et al., *Nature*, 547, 205-208 (2017) <https://doi.org/10.1038/nature22823>)。また、含水鉱物高压相を取り入れた地球流体分子動力学シミュレーションにより地球表面から最深部に渡る水輸送現象の一端を解明した(Nakagawa, et al.: *Prog. Earth Planet. Sci.* 5, 51 (2018) <https://doi.org/10.1186/s40645-018-0209-2>)。

地球の表面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、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輸送・存在形態を私たちは未だ良く知らない。本成果は地球深部において未解明な水の役割と循環を明らかにする新たな知見となると期待される。

成果(3)では、原子核の運動を量子力学に基づいて取り扱う「経路積分セントロイド分子動力学法」をサポートしたCPMD開発版などの開発を推進した。温度・体積一定条件下での第一原理経路積分セントロイド分子動力学コードを用いて高压水の構造相転移や光学スペクトルに対する核量子効果を定量的に評価し、H₂O水の高压物性に対する核量子効果の重要性を明らかにした。水素化合物等の材料開発への活用に道筋をつけた。(T. Ikeda, *J. Chem. Phys.* 148, 102332 (2018) <https://doi.org/10.1063/1.5003055>.)



理論的に予測され実験で実証したパイライト型水酸化鉄



含水鉱物高压相を取り入れた地球流体シミュレーション

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 (サブ課題代表者: 東京大学物性研究所・川島直輝)

目標

テンソルネットワークなどの計算法を標準的手法として確立しコードを公開する。これを利用し、フラストレート量子多体系、格子ゲージ理論、量子通信デバイスなどの重要課題を解決する。更に行列低ランク近似などデータ圧縮技術をマルチスケール流体計算などの手法として確立する。

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果(1) 物性科学計算コードを開発・性能検証・公開した。テンソル繰り込み群(TRG)法ではスケールリングまで改善し、それを用いてトポジカル量子デバイスの基礎となるKitaevモデルの本質を明らかにした。
- 成果(2) 量子ダイナミクスコードは並列計算可能なものを開発し公開。
- 成果(3) 素粒子物理学研究用に3次元・フェルミ系も扱えるプログラムを開発し実証計算を実施。
- 成果(4) 実験によって、光子から核子への量子テレポーテーション転写に成功。また量子万能操作手法を開発。

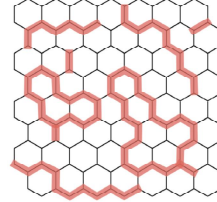
成果(1)では、テンソルネットワーク法として基本的な枠組みである2つの手法、TRG法とPEPS法をベースとしてプログラムを開発、github上で公開した。その際に、乱数を使う特異値分解法を応用することによって、並列化に適したテンソルネットワーク法アルゴリズムを開発した。TRG法では従来法よりも計算量のオーダーの低いアルゴリズムを発見した。またKitaev関連モデルへの応用の結果、これまでに得られている最高精度を達成した。これらの成果は、量子情報デバイスへの応用も期待される量子多体系の難問であるフラストレート量子系のトポジカルに非自明な基底状態、格子ゲージ理論、など多くの重要問題の解明につながる成果である。また、テンソルネットワークによる機械学習を応用したマルチスケール流体計算手法を開発したが、これは気象シミュレーションなどに広く応用される可能性がある。

成果(2)では、量子ダイナミクス計算の基礎となる厳密対角化プログラムの開発を行った。また、量子マスター方程式法にもとづくプログラムを作成し、共振器系(Tavis-Cummings 模型)における非平衡状態の性質を解析し、レーザー光と物質との間の相互作用によるヒステリシス現象を解明した。この成果は以下の成果(4)との連携により量子通信デバイスの設計につながるも期待される。

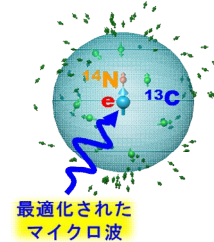
成果(3)では、TN計算における処理の局所化によりデータの通信量を削減するアルゴリズムを考案し、高次元テンソル繰り込み群のアルゴリズムを実装した。また、素粒子論研究のためにグラスマン数を扱うことのできる高次元(3次元以上)向けグラスマン高次テンソル繰り込み群の開発を行った。さらに、3次元格子ゲージ理論への応用では従来のMC法より高精度な結果を得た。これらはQCD相図の解明の端緒となる成果である。

成果(4)では、量子もつれネットワークへ向けて量子クラウドメモリーの実験系(ダイヤモンドNV中心系)を準備し、光子から核子への量子テレポーテーション転写に成功しその精度を検証した。また、機械学習によって、万能量子操作手法を開発した。さらに、ダイヤモンドに関して超微細相互作用を解析しNV中心の特性評価を行った。これらは、情報セキュリティを支える量子通信ネットワークの構築のための量子情報の新技術開発につながる。

緑:科学的成果 青:実用的成果



スピン液体状態を表すストリングガスの模式図



ダイヤモンドNV中心系の制御

萌芽的課題1-2

極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と 超高性能計算環境の創成(基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦)

極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ていない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

本課題の主な成果

1. 密行列系では世界初となる100万次元以上の連立一次方程式に対する精度保証を実用的な計算時間で実行することに成功した。従来は、ドイツのヴッパータール大の研究グループによって最大で10万次元程度の問題まで精度保証されていたが、これを大きく上回っている。
2. 大規模な量子物質計算において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性を示した。ここでは、電子エネルギーに対応する固有値の存在範囲や順番が重要となる。これまでに、40万次元程度までの実問題に対する精度保証に成功している。

極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成

目標

・最終目標: 100万次元規模の量子物質計算を実用的(問題の難しさに応じて、近似解の計算時間の数倍から数十倍程度)に精度保証付きで解くことが可能なアプリケーションを開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果(1).....120万次元までの連立一次方程式に対して、実用的な精度保証が可能となった。
成果(2).....具体的なアプリケーションに対して、精度保証の適用可能範囲を拡大した。

(1)の成果により、密行列系では世界初となる100万次元以上の連立一次方程式に対する精度保証を実用的な計算時間(近似計算と比較して数倍以内)で実行することに成功した。従来より、問題の大規模化によって、計算誤差の累積が顕著になることが危惧されていた。実際、問題が大規模になるに連れて、数値計算によって得られた解の精度が大きく低下することが確認された(図1)。そこで、本研究グループによって開発されてきた線形計算の高精度保証法及びエラーフリー変換による高精度計算法をスーパーコンピュータ上で駆使することによって、大規模計算に対する精度保証の適用可能範囲を大幅に拡大した。これを実現するため、スーパーコンピュータ上の数値計算ライブラリに対して、ベンダーと共同で精度保証に有用な機能を付加する方法の開発に取り組み、実際に、120万次元の問題に対する精度保証を成功させた(図2)。従来は、ヴッパータール大(ドイツ)の研究グループによって最大で10万次元程度の問題まで精度保証されていたが、これを大きく上回っている。本研究チームのWebページ(<http://www.math.twcu.ac.jp/ogita/post-k/>)において、開発したライブラリの一部を京、FX100、PC向けにオープンソースで無償提供し、成果の活用に努めている。

本成果は、大規模な実アプリケーションに対する精度保証の適用可能性に直接的につながるものである。これは様々なシミュレーションサイエンスへ汎用的に適用可能なものであり、本研究成果の応用範囲は極めて広く、科学技術計算全体の品質向上に貢献するものである。

(2)の成果により、科学的・社会的意義のあるアプリケーションにおいて精度保証の有効性を示すことが可能となった。具体的には、大規模な量子物質計算(図3、高分子の電子状態計算)において精度保証付き数値計算が数学的に正しい結果を与えることの有効性を示した。ここでは、ある種の行列固有値問題を解くことが本質となるが、特に電子エネルギーに対応する固有値の存在範囲や順番が重要となる。一方で、問題の大規模化によって、数値計算によって得られた解の精度がどれくらい正しいのかを知ることが困難となってきた。本研究課題では、成果(1)の直接的なアプリケーションとして研究開発を進め、大規模固有値問題向けの精度保証方式を開発・実装した。これまでに40万次元程度までの実問題に対する精度保証に成功している。

本成果は、有機デバイス材料などの研究開発に資する現在の計算科学に、精度保証(計算結果の正しさ)の観点から数値的な信頼性を与えるものであり、次世代の先進的材料開発に貢献するものである。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

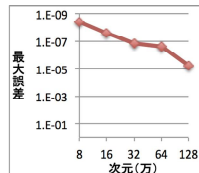


図1: 連立一次方程式における計算誤差の累積。

| 次元 | 精度保証の計算時間(比) | 相対誤差(最大) |
|------|--------------|----------|
| 30万 | 7.09 | 1.12E-16 |
| 60万 | 6.40 | 1.12E-16 |
| 120万 | 5.32 | 1.12E-16 |

図2: 連立一次方程式の近似解の精度保証結果。

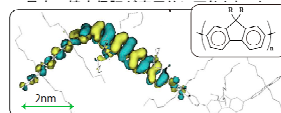


図3: 量子物質計算における高分子のモデル。原子数が非常に多いため大規模固有値問題の計算が必要。

萌芽的課題1-3

複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ (基礎科学のフロンティア-極限への挑戦)

極限を探索する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答えの出ない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。

本課題の主な成果

1. 固体物理学における3つの難題(高精度基底状態計算・固体固体相変態シミュレーション・非平衡電子ダイナミクス計算)を突破する3つのアプリ(WaveX・AtomREM・ATTOMCSCF(mATTOMCSCF))の基幹部分の開発を終了した。(WaveX関連: J. Chem. Phys. **148**, 204109 (2018), J. Chem. Phys. **148**, 224103 (2018), J. Chem. Phys. **149**, 034106 (2018), J. Chem. Phys. **150**, 114104 (2019). AtomREM関連: J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 063801 (2018), Physica A **528**, 121481 (2019). ATTOMCSCF関連: Phys. Rev. A **98**, 023415 (2018), Phys. Rev. A **95**, 043416 (2017).)
2. 固体固体相変態シミュレーション手法の開発において、新たな基礎理論構築を達成し、未知固体相の系統的探索への道を拓いた。(Physica A **528**, 121481 (2019).)
3. 開発アプリの公開を順次開始した。具体的には、WaveXに関してポスト「京」課題関係者への公開開始、AtomREMの一般公開を開始、mATTOMCSCFの一部を公開開始した。

萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題A: 複合相関マテリアルのための電子状態計算基盤-DFTを超えて超高精度へ(サブ課題代表者: 東京工業大学・松下雄一郎)

目標

・波動関数理論に基づいて電子相関を露に取り込んだ高精度電子状態計算基盤開発を行い、現実周期系へと適用し、実証研究を行う

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果(1) 周期系に対する波動関数理論計算のアプリ(WaveX)を開発し、アプリをポスト「京」課題関係者へ提供開始
成果(2) GFCCSD法を孤立原子系へと適用し、準粒子スペクトルにおける電子相関効果の確認
成果(3) GFCCSD法を現実周期系へと適用し、サテライトピーク・イオン化インパクト等の電子相関効果の記述能力の確認

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもらうと同時に、新たな電子論手法開発のための参照データを提供することが可能となった。

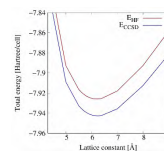
(2)の成果により、孤立原子の準粒子スペクトルを、波動関数理論の1つである連結クラスター理論(CCS)法に基づいた計算により初めて報告した。その際、CCSD法の結果から1粒子グリーン関数を計算(GFCCSD計算)することにより準粒子スペクトルをCCSDの精度で求めた。計算の結果、孤立原子系において電子相関効果により生じるサテライトピークがGFCCSD法で再現されることを確認した。また、特にCr原子において従来の密度汎関数理論(DFT)では定性的にも正しく評価できない軌道エネルギーが、GFCCSD法では正しく再現することを確認した。

本成果は、GFCCSD法の現実物質への初めての適用報告であり、世界に先んじてその結果を報告することができた。また、その計算結果から、DFTでは本質的に取り扱いが困難であったサテライトピークなどの情報をGFCCSD法では再現できることを実証研究により示すことができた。

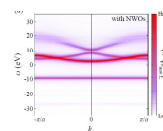
(3)の成果により、GFCCSD法を1次元LiH鎖、ポリアセチレンへと適用し、その準粒子スペクトルを報告することができた。計算の結果、周期物質における、準粒子の緩和過程であるサテライトピークとイオン化インパクト等が記述できることを示した。これら物理量はDFTでは本質的に記述することの出来ない効果であることを示した。

本成果は、特にデバイス設計などの産業界に取って重要なイオン化インパクト因子の計算が可能となることを示す。これら電子相関効果を露わに考慮する必要のある物理量に関して本手法は有効に働くものと考えられる。今後、GFCCSD法を用いた半導体中の電子相関効果評価のための有効な手法になるものと考えられる。

本成果は、今後益々重要性を増すDFTの近似法開発にとって重要な知見を与えるものである。



1次元LiH鎖のGFCCSD法によって得られたエネルギー面



1次元LiH鎖のGFCCSD法によって得られた準粒子バンド構造

萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題B: 極限高圧下マテリアルの相変態シミュレーション-室温超伝導に向けて(サブ課題代表者: 東京大学・明石遼介)

目標

- ・固体反応の加速シミュレーション手法プログラムコードの開発・チューニング及び、コードの具体的物質への適用・圧力誘起超伝導の実験提案

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 固体相変態シミュレーションを可能にするアプリ(AtomREM)を開発し、アプリを公開開始
- 成果(2) 反応座標・架空ポテンシャルフリーなサンプリング法の基礎理論の構築
- 成果(3) 新サンプリング法の並列化・クラスター系での効果実証・分子動力学コードLAMMPSとの結合

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもらえ環境を構築した。

(2)の成果により、従来、物質における化学反応の数値シミュレーションを行う際に必要とされてきた「物質に適した反応座標の設定」および「架空ポテンシャル印加」を必要としないアルゴリズムが構築可能であることが示された。

本課題の最終ターゲットは固体の反応および構造変態のシミュレーションである。この系において、実験などの事前知識がない物質の構造変化をシミュレートする場合、それを実現するための適切な反応座標および印加ポテンシャルの設定は系の自由度の大きさのため極めて難しい。本成果では、系の本来のポテンシャル面において最も反応が起こりやすい(ポテンシャル面の極小から脱出しやすい)方向への構造変化を自動的に起こすサンプリング手法の構成に成功した。

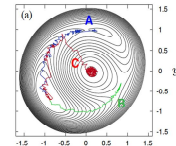
本成果は、化学反応のような稀な事象をシミュレートするためには恣意的な反応座標の設定あるいは人工的なポテンシャル力が必要である、という常識を覆す結果であり、レイイベントシミュレーション手法の新たな展開につながる。また実用面での効用として、シミュレーション対象物質ごとに上記の反応座標および印加ポテンシャルの検討を行う必要がなくなった。これにより今後圧力誘起超伝導の候補物質を探索する効率が大幅に向上する。

(3)の成果により、(2)で構築した手法が、実用的なシステムサイズにおいても適用可能となった。また既に広く使われている分子動力学コードと結合することにより、広汎な物質への応用が可能になった。

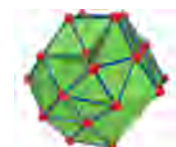
本成果では、(2)で構築した方法の効率的な並列アルゴリズムを実装し、実証としてアルゴンクラスター系に適用、クラスター表面において起こる支配的な反応過程を事前知識無しにシミュレーションにより生成することに成功した。さらに、様々な物質を記述するポテンシャル関数として分子動力学コード「LAMMPS」のパッケージを引用するサブルーチンを実装した。

本成果により、(2)のサンプリング手法がモデルポテンシャルのみならず、実用的な数の原子を含む系についても適用可能であることが示された。また既に応用分野でも広く使われている分子動力学コードとの結合により、将来の産業の現場での新規固体反応探索への手法転用への道が開かれる。

[直近の展望]本手法の周期系への拡張は急務である。これが完了すれば、固体反応加速シミュレーション開発においてこれまで直面した問題が全てクリアされ、実際の固体の圧力誘起反応の系統的・効率的探索が可能となる。



モデルポテンシャル平面上に生成された反応経路の例



Ar₃₆クラスター表面における欠損・キャップ形成

萌芽的課題1-3 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ

サブ課題C: 強光子場中マテリアルの原子論的シミュレーション-波動関数理論から臨む光と物質の相互作用(サブ課題代表者: 東大・篠原康)

目標

- ・固体における時間依存多配置波動関数理論の開発とそのコードへの実装
- ・上記理論とコードを精緻させ、光励起された固体の緩和過程の定量的評価と定性的理解に取り組む

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果(1) 固体の多配置波動関数理論を実装したmATOMSCF/ATOMSCFを開始し、その一部を公開開始
- 成果(2) 実固体からの高次高調波発生過程のメカニズムの解明
- 成果(3) 固体からの高次高調波発生に表れる多体効果の影響の調査

(1)の成果により、広く開発アプリを使用してもらえ環境を構築した。

(2)の成果により、本サブ課題で用いている原子論的シミュレーション法が固体の高次高調波発生過程の実験結果を説明する事に成功、その結果の解析からそのメカニズムを明らかにした。

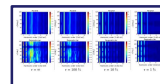
本課題の目標は、電子間散乱に起因する固体内の緩和過程の理解である。緩和過程がどういった現象に顕著に表れるか、さらに実験結果との整合性がどうなっているかは明らかではない。こうした理解を得るために、密度汎関数理論で評価した独立電子近似に、よく用いられる近似的な緩和を導入した量子ダイナミクスシミュレーションを行った。高次高調波発生と呼ばれる現象について評価して、実験との直接比較を行った。

本成果により、緩和が顕著に表れる条件と物理量を明らかにした。実験との比較を通じて、密度汎関数理論で導かれる独立電子近似により素過程が良く理解されることを示した。また、典型的な緩和の時定数を実験とスペクトルを比較する事で評価した。

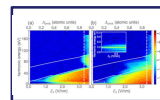
(3)の成果により、時間依存Hartree-Fock法に基づくシミュレーションを遂行する事で、固体の高次高調波発生過程において、もっとも基本的な多体効果である電子・正孔相互作用がどのような影響を及ぼしているのか明らかにした。

高次高調波発生に代表される強い電場によって駆動される現象で、電子・正孔相互作用がどういった役割を果たしているのかは系統的に調べられたことはなかった。電子・正孔相互作用が十分に含む時間依存Hartree-Fock法を用いて、一次元模型固体の高次高調波発生シミュレーションを行った。

本成果により、三次元固体での計算遂行における、計算条件や見るべき物理量がどういったものかという知見が得られた。電子・正孔相互作用により、高次高調波発生で得られるスペクトルにどのような兆候が表れるべきかを示した。



成果(2)で得られた、近似的な緩和における緩和の時定数を変えた際に高次高調波発生時のスペクトルが変わっていく様子



成果(3)で得られた、電子・正孔相互作用が無い場合(左)と有る場合(右)の高次高調波スペクトルの比較。

萌芽的課題2-1

多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発 (複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究)

複雑かつ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済等、社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

本課題の主な成果

1. 社会経済現象の中で、特に重要な交通・経済・人間関係の基本的な諸相についての数理的なモデルを開発し、次世代スーパーコンピュータ用のシミュレーションアプリケーションを開発するとともに、諸相間の連携・接続のモデル・シミュレーションをも開発したことが応用上の主な成果である。具体的には、個々の企業活動に基づくマクロ経済予測([1-6])および地域社会設計([7-12])、証券・金融取引制度のリスク評価([13,14])、MaaS(一体的交通サービス)の制度設計([15])および運用、イベント時および災害時の避難計画([16,17])および経済運営、宣伝・広報の最適化、個々の人・法人・国家の間の協力関係および平和維持のための戦略立案[18]ほかで応用的なシミュレーションを実現した。
2. こうしたシミュレーションの特徴は、莫大な数のシナリオ・パラメータの探索による最適化である([19-21])。そのためにはスーパーコンピュータによる容量型処理(いわゆるキャパシティコンピューティング)が重要で、個々の処理は独立な実行であるが、処理の結果を使って次の処理を決めるという粗な並列実行が必要となる。この実現を確実とする汎用的なアプリケーションを開発した。数百万程度までの実行管理を行うOACIS([22])とそれ以上の数、スーパーコンピュータの性能の限界まで実行管理を行うCARAVANとである。こうした計算科学的な成果を使って、上述の成果、特に人工知能処理を実現した。
3. 9つの社会現象シミュレーション・解析アプリケーションを上述のOACIS・CARAVANで連携することにより多層的で時間・空間スケールの異なる種々の社会現象を相互作用させるフレームワークを開発した([23])。

注釈は次ページ

注釈

- [1] Hazem Krichene, Abhijit Chakraborty, Yoshi Fujiwara, Hiroyasu Inoue, Masaki Terai, "Tie-formation process within the communities of the Japanese production network: application of an exponential random graph model", Applied Network Science 4 (1) p.5 (2019).
- [2] Hiroyasu Inoue and Yasuyuki Todo, "Propagation of negative shocks across nation-wide firm networks", PLoS ONE 14(3): e0213648 (2019).
- [3] Yoshiyuki Arata, "Bankruptcy Propagation on a Customer-supplier Network: An empirical analysis in Japan", RIETI Discussion Paper, 18-E-040 (2018年6月).
- [4] Yoshiyuki Arata, Philipp Mundt, "Topology and Formation of Production Input Interlinkages: Evidence from Japanese microdata", RIETI Discussion Paper, 19-E-027 (2019年4月).
- [5] 受賞: 第2回進化経済学会賞(2018年3月) 井上 寛康 准教授(兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究所) "Analyses of aggregate fluctuations of firm production network based on the self-organized criticality model", Evolutionary and Institutional Economic review, Vol.13, Issue 2, p.383-396 に対する受賞.
- [6] 書籍: Hideaki Aoyama, Yoshi Fujiwara, Yuichi Ikeda, Hiroshi Iyetomi, Wataru Souma and Hiroshi Yoshikawa "Macro-Econophysics: New Studies on Economic Networks and Synchronization" (Cambridge University Press, 2017年4月).
- [7] Jun'ichi Ozaki, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Estimation of sales decrease caused by a disaster: Hokkaido blackout after earthquake in 2018", J Comput Soc Sc (2019).
- [8] Yuh Kobayashi, Hideki Takayasu, Shlomo Havlin and Misako Takayasu, "Time evolution of companies towards a stable scaling curve obtained from flow diagrams in three-dimensional phase space", New Journal of Physics 21, 043038 (2019).
- [9] Jun'ichi Ozaki, Koutarou Tamura, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Modeling and simulation of Japanese inter-firm network", Artif Life Robotics (2018).
- [10] Koutarou Tamura, Hideki Takayasu, and Misako Takayasu, "Diffusion-localization transition caused by nonlinear transport on complex networks", Scientific Reports vol.8, Article number 5517 (2018).
- [11] Hayato Goto, Eduardo Viegas, Henrik Jeldtoft Jensen, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Appearance of Unstable Monopoly State Caused by Selective and Concentrative Mergers in Business Networks", Scientific Report vol.7, Article number 5064 (2017).
- [12] Hirokazu Kawamoto, Hideki Takayasu, Misako Takayasu, "Network Anatomy Controlling Abrupt-like Percolation Transition", Scientific Reports vol.7, Article number: 163 (2017).
- [13] Takuma Torii, Kiyoshi Izumi, Kenta Yamada, "Shock transfer by arbitrage trading: analysis using multi-asset artificial market", Evolutionary and Institutional Economics Review, volume 12, number 2, pages 395-412, (2016).
- [14] Takuma Torii, Tomio Kamada, Kiyoshi Izumi, Kenta Yamada, "Platform design for large-scale artificial market simulation and preliminary evaluation on the K computer", Artificial Life and Robotics, vol.22, no. 3, pp. 301-307 (2017).
- [15] Itsuki Noda, "Multi-Agent Social Simulation for Social Service Design", Proc. of International Workshop on Massively Multi-Agent Systems (MMAS2018), invited-4, July, (2018).
- [16] Hiroyasu Matsushima, Itsuki Noda, "Analysis of Trade-off in Evacuation Plan using Evolutionarily Exhaustive Simulation", Proc. of the 23rd International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 23rd 2018), pp. OS15-4, International Society of Artificial Life and Robotics, Jan., 2018.
- [17] 松島裕康・内種岳詞・辻順平・山下倫央・伊藤伸泰・野田五十樹「実験計画法による実験数削減と有意なパラメータ探索の避難シミュレーション分析への適応」人工知能学会論文誌 vol.31 (2016) No.6 p.AG-E_1-9.
- [18] Y. Murase and S. K. Baek, J. Theor. Biol. 449 p.94 (2018).
- [19] I. Noda, N. Ito, K. Izumi, T. Yamashita, H. Mizuta, T. Kamada, Y. Murase, S. Yoshihama and H. Hattori, J. Comput. Soc. Sci. vol.1 p.155 (2018).
- [20] Daigo Umemoto and Nobuyasu Ito, "Large-scale parallel execution of urban-scale traffic simulation and its performance on K computer", Journal of Computational Social Science, vol.2, p.97-101 (2019).
- [21] Daigo Umemoto and Nobuyasu Ito, "Power-law distribution in an urban traffic flow simulation", Journal of Computational Social Science vol.1 p.493-500 (2018)
- [22] Y. Murase, T. Uchitane and N. Ito, "An open-source job management framework for parameter-space exploration: OACIS", J. Phys.: Conf. Ser. vol. 921 (2017) 012001.
- [23] Ryo Hamawaki, Kiyoshi Izumi, Hiroki Sakaji, Takashi Shimada, Hiroyasu Matsushima, "Chain Bankruptcy Size in Inter-bank Network: the Effects of Asset Price Volatility and the Network Structure", Journal of Computational Social Science, Volume 2, Issue 1, p.53-66, 2019.

14