

研究課題別中間評価結果

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: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 室長)

3. 研究概要

超伝導とは、20世紀初めに発見された、人類がこれまでに目にしてきた物理現象の中でも最も劇的な現象の一つである。その産業応用への高い潜在的可能性は誰もが認めるところであるが、超伝導研究開発の最前線では、現在、基礎から応用まで、解決すべき困難な課題を抱えており、その積極的産業利用は未だ十分に進んでいるとは言えない。こうした背景の下、本研究実施者らはこれらの課題を解決し、未来の超伝導社会を切り拓くため、シミュレーションをツールとして、マイクロ・メゾ・マクロの異なる3つのスケールでの代表的課題を見定め(あるいは必要に応じてそれらを統合し)、地球シミュレータクラスの超並列計算機を利用してこれらの課題解決の糸口を探ることとした。尚、本研究課題は平成18年度10月より各スケールでの研究に実績を有する5大学・2研究機関の体制にて研究を開始し、平成19年度、それらを整理統合し、4大学・2研究機関とした。成果としては、まず、ミクロスケールの研究において、原子力機構・町田グループが18年度、密度行列繰り込み群(DMRG)と呼ばれる高精度な量子状態の計算手法の2次元化を進めた他、その際、必須となる行列の対角化に関する並列計算技術を国際会議(SC06)で発表し、当年最高の高性能計算技術を賞するIEEE主催のゴードン・ベル賞のファイナリストに選出された。また、関連する計算技術は19年度計算工学会論文賞(原子力機構・町田グループの山田研究員)を受賞している。DMRGの2次元計算手法開発については19、20年度も継続し、慶応大・大橋グループや産総研・柳澤グループと協力し、原子ガスや高温で実現する超伝導についての理解をミクロレベルで進め、来る京速計算機上で動作するアプリケーションとしての準備を進めている。メゾについては、原子力機構・町田グループと秋田大・林グループが高温超伝導体・固有ジョセフソン効果において量子(非線形)同期現象と呼ぶ普遍的な概念の発見に、地球シミュレータ等を利用した超並列計算により成功した他、東北大・小山グループは高温超伝導体・固有ジョセフソン接合のマイクロ波発振に対して、外部環境も含めたマルチフィジックス・シミュレーションのプロトタイプを開発し、実験結果を定性的に説明することに成功している。尚、量子同期現象の研究に用いた行列の全対角化コードについては、来る京速計算機上で高速に動作するライブラリーとしての研究開発にも着手している。また、大阪府立大・加藤グループは、有限要素法を用いて、時間依存ギンツブルク・ランダウ方程式のシミュレーションコード開発を進め、磁束量子を用いた新しいデバイス動作原理を提案した。最後にマクロについては、ほぼ、当初の予定どおり研究を遂行し、原子力機構・町田グループが規則格子を用いた時間依存ギンツブルク・ランダウ方程式の並列シミュレーションコードの開発を進め、未解決の磁束運動に関わる基礎物性(ホール効果、磁束格子ダイナミクス等)の解明に成功している。20年度以降も、更に当該方程式の数値計算技術開発を進め、磁束ピン止めダイナミクスのマルチスケール・シミュレーション手法を開発する予定である。

4. 中間報告結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

日本における超伝導応用シミュレーション研究の中心チームとして、これまでの研究成果は十分評価できる。超伝導応用装置開発のためのシミュレーションコードを開発し、具体的応用装置(例えば、量子デバイスや放射線検出器等)開発への知見を得ており、当初の計画のとおり順調に研究が進んでいる。特記すべきは、大規模行列対角化の並列計算による高速化実現という、計算法で期待されるブレークスルーがあった。

新たな展開としては、本研究課題の中の主要な計算部分(固有値対角化)を次世代スパコン向けに研究開発することになり、この課題で開発された大次元行列対角化の手法が「次世代スパコン・グランドチャレンジアプリ」に応用される可能性が出て来ていることである。また、鉄系高温超伝導体についての第一原理計算の実施、グラファイト薄膜(グラフェン)を通しての超伝導秩序の拡散(超伝導近接効果)を新しい課題としてスタートさせ、近接効果の超伝導振幅の温度及び距離依存性について従来超伝導体と違う特徴を見出したこと、BSCCO 固有ジョセフソン接合系からのテラヘルツ波の発信が確認された昨年からの研究状況は急展開し実用化レベルのミリワットの出力、テラヘルツギャップと呼ばれる 1-10 テラヘルツ領域での発信等の実現のために、実用化に向けた計算が実験グループから強く求められるようになったことが挙げられる。

成果の科学的・技術的インパクトでは、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、科学的・技術的なインパクトは極めて大きい。また、国際的にも高く評価されている。特に、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ひとつであり、まだ、有効な手法は開発されていないが、本課題はこの問題に挑戦し、解決の見通しを与えつつある。類似研究との比較では、数千億次元の行列の対角化ができるのは世界的にみても最先端を行っているといえる。例えば 2 次元強相関電子系の厳密対角化に関し、SC06 でゴードン・ベル賞のファイナリストに選ばれるなど計算科学技術上の活躍が評価される。

研究実施体制については、広い範囲の研究課題であるが、各研究課題に応じた研究体制を敷いており、適切な体制と言える。固体物性関係の研究者と数理解析関係の研究者が連携して、新しいアルゴリズムをうみだしつつある点が評価できる。

研究費の執行については、当初計画どおりの配分で執行されており、妥当である。広範囲なテーマに対して多くのグループが参加しているなかで、有効に活用されていると考えられる。

現在までの研究成果としては、行列対角化計算の高速化を実現、テラヘルツ発振条件のシミュレーションに成功、磁束量子ホール効果を解明、等々が挙げられる。

4-2. 今後の研究に向けて

今後の研究の進め方については、それぞれのテーマの成果は期待できるが、研究テーマが多岐にわたっており、プロジェクトとして一つのインパクトある成果を出すよう工夫することが望まれる。また、超伝導分野においては新たな実験結果が発表されることが多々あることから、これらの事態に迅速に対処し、研究計画を柔軟に変更することも重要である。この点で、新規テーマ(鉄系超伝導体)にもチャレンジしている点は意欲的であり評価できる。なお、マクロ(線材)のテーマでは、材料研究分野との連携も必要であろう。これまでの成果と遂行能力は大いに評価に値する。今後も、さらに挑戦的な課題を見出してそれに挑戦していく姿勢が望まれる。

今後見込まれる成果については、固有値対角化の超並列機への応用、超伝導体による新デバイスの探索等、今後大きな成果が得られる可能性がある。物理と計算科学がよく融合しており、研究の発展性が特に高いと考えられる。今後は各グループの成果を統合して、超伝導の解明が一層進展することを期待する。

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については、高温超伝導体の応用分野は極めて広く、本研究がそれらの分野で応用されるならば、成果の社会的影響は極めて大きい。社会的なインパクトが大きいことから、得られた成果を適確に社会に発信していくことが重要である。また、行列の対角化は多くの理論・計算科学にあらわれる数学的方法のひとつであるが、ナノやバイオの問題では行列の次元数が大規模になり、しかも、並列化が難しいことから、数値計算上のネックになっている。この問題が解決されれば、ナノやバイオの分野での大きなブレークスルーになり、分子デバイスの知的設計にも見通しが出て来ることになる。

4-3. 総合評価

本研究は、超伝導現象の解明から、超伝導体のマクロスケールまでの新しい応用の可能性を探るものであり、また、その為の基本となる超並列計算用の手法(対角化)の研究開発である。超伝導体、特に高温超伝導体は、工学的応用が広く、本研究により、成果が得られるならば、社会的な影響は極めて大きいものがある。

既に幾つかの大きな評価に値する成果を挙げており高く評価できる。特記すべきは、大規模行列対角化の並列計算による高速化実現という、計算法で期待されるブレークスルーがあったことである。本研究の後半に更なる成果を期待する。今後は、基礎研究に留まらず、工学への適用を見据えた研究の方向性の検討と体制構築(材料研究との連携など)も配慮することが望まれる。