

「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」

平成 18 年度採択研究代表者

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)

「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」

1. 研究実施の概要

超伝導は 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最も劇的な量子現象の一つであり、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。しかしながら、超伝導研究分野では現在、その基礎から応用まで解決すべき困難な課題を抱えており、積極的産業利用が未だ十分に行われていない。こうした背景下、本研究実施者らは、それら困難な課題をシミュレーションにより解決することで超伝導社会の到来に向けての新たな道が開拓可能となると考えた。具体的には、各々、マイクロ・メゾ・マクロの異なる 3 つのスケールで代表的課題を見定め、それらに対し、地球シミュレータクラスの超並列計算機上で大規模並列シミュレーションすることにより課題解決の糸口を探ることとした。本研究課題は、平成 18 年度 10 月より始動し、各スケールでの研究に実績を有する 5 大学・2 研究機関と共に研究を実施することとした。マイクロレベルでは、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、行列の対角化に関する並列計算技術を国際会議で発表し、当年最高の高性能計算技術を賞する IEEE のゴードン・ベル賞のファイナリストに選出されている。このテーマについては 19 年度も DMRG の高次元計算手法開発を進め、原子ガスや高温で実現する超伝導についての理解をマイクロレベルで進めることとする。メゾ、マクロについては、当初の予定どおり研究を遂行し、高温超伝導固有ジョセフソン接合の量子論的枠組み構築に成功した他、有限要素法による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た。19 年度以降もこれらの理論及び数値計算技術開発を進める。また、時間依存ギンツブルク・ランダウ理論に基づき、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開発を実施する。

2. 研究実施内容

超伝導研究分野では現在、その基礎から応用まで複数の問題を抱えており、積極的産業利用が十分に行われていない。こうした背景の下、本研究課題実施者らは、それらの困難

な課題をシミュレーションにより解決することで超伝導社会の到来に向けての新たな道が開拓可能となると考えた。具体的には、各々マイクロ・メゾ・マクロの異なる3つのスケールで代表的課題を見定め、それらに対し、地球シミュレータクラスの超並列計算機上で大規模並列シミュレーションすることにより課題解決の糸口を探ることとした。本研究課題は、18年度10月より始動し、各スケールでの研究に実績を有する5大学・2研究機関において研究を実施した。マイクロレベルの問題においては、大橋（慶応大）及び松本（筑波大）グループが原子物理学で最新のトピックスである光学格子上での超流動状態を研究し、超伝導機構解明に対し示唆に富んだ理論計算を実施した他、町田（原子力機構）グループは柳澤（産総研）グループと協力し、2次元格子での強相関フェルミ粒子の振る舞いを調べることが可能な2次元DMRG（密度行列繰り込み群）法の開発に成功し、最大で 4×20 サイトのハバードモデルの基底状態を計算可能とした。

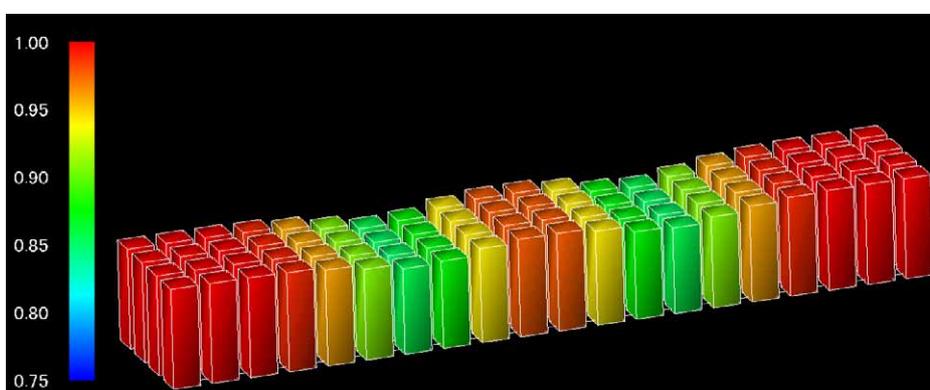


図1：矩形井戸型トラップ中での80 (= 4×20) サイト・ハバードモデルに対してDMRG法を適用して得られた粒子密度空間分布（アップスピン粒子38、ダウンスピン粒子38）。

図1は、2次元光学格子（矩形井戸型トラップ中）で原子数が格子数よりわずかに小さい場合の原子密度分布を示しており、周期的変調構造が現れていることが分かる。この結果は、来る原子ガス光学格子で容易に観測可能である他、高温超伝導体で見られるストライプ現象を考察する上でも極めて示唆的な結果であると考えられる。また、上記のようなマイクロレベル問題研究の必須な研究技術である大規模行列の数値対角化に関しては、その並列数値計算技術を国際会議（スーパーコンピューティング SC06 ; 11月16日、写真1）上で発表し、当年最高の高性能計算技術を賞するゴードン・ベル賞のファイナリストに選出されている。

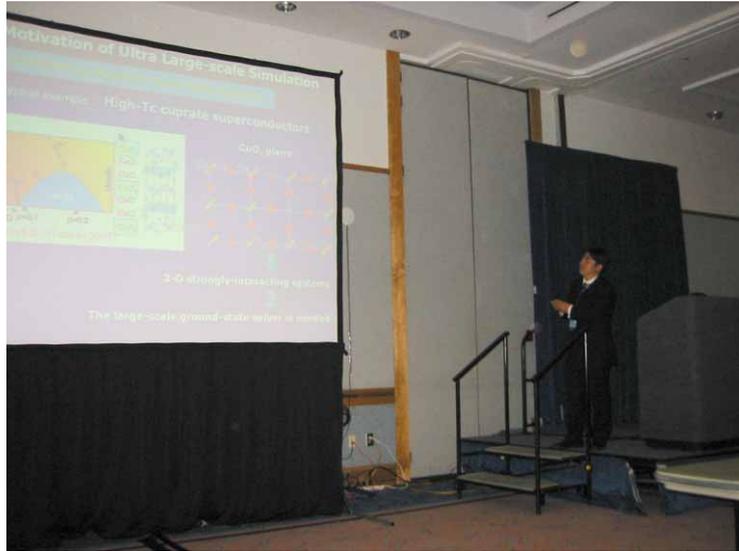


写真 1: 国際会議スーパーコンピューティング (SC07) のゴードン・ベル賞ファイナリストセッションにて発表を行っている研究代表者 (町田)

メゾレベルの問題においては、海老澤 (東北大情報) グループ及び小山 (東北大金研) グループらがジョセフソン接合を量的に取り扱う統一的理論の枠組み構築に着手し、新たな数値計算課題を提案し、町田 (原子力機構) グループが地球シミュレータ上で動作するプログラム開発を行った。開発したプログラムは時間発展連立シュレディンガー方程式を解き、ジョセフソン接合列の量子ダイナミクスをシミュレートするが、図 2 は、そのシミュレーション結果の一例で二つのジョセフソン接合の量子ダイナミクスの様子を示している。二つの結合ジョセフソン接合を対象としていることから、空間次元は 2 次元であり、図は波動関数の 2 次元空間分布の時間発展の様子を表している。図 2 は、2 次元であるが、

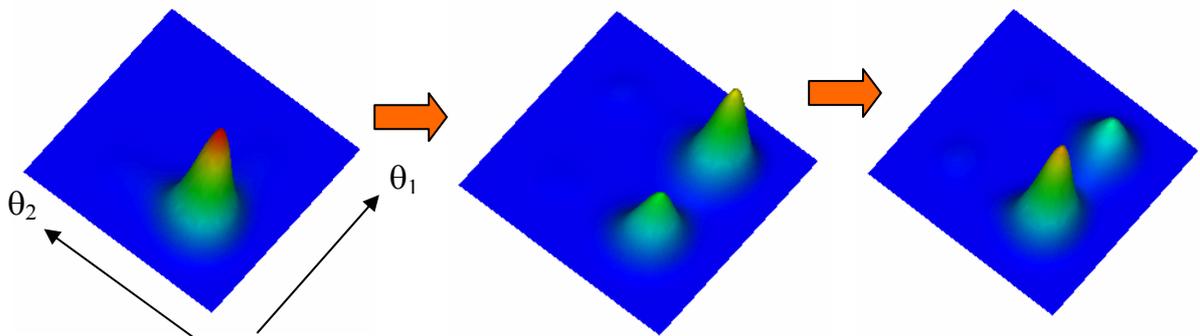


図 2 : 二つのジョセフソン接合列 (固有ジョセフソン接合) の量子ダイナミクスのシミュレーション結果の一例。2 次元上での位相差の波動関数の時間発展を示している。

現在、地球シミュレータで4次元、即ち、4個の結合ジョセフソン接合の大規模シミュレーション研究を実行中である。

マクロレベルの問題では、大阪府大（加藤）グループが有限要素法による時間依存のギンツブルク・ランダウ方程式のシミュレーション・プログラム開発を進めた他、時間依存のギンツブルク・ランダウ方程式の超並列差分コードの整備を実施した。

次に今後の研究であるが、マイクロレベルの問題においてはDMRG法を用いて2次元光学格子上で期待される新たな現象予測をいち早く行う一方、19年度は有限温度や時間発展の計算法の開発に新たに着手する。メゾレベルの問題では、数値計算プログラム開発を更に進め、量子効果を数値的に取り扱うためのプラットフォーム作りを進める。最後にマクロレベルの問題では、磁束量子ピン止めのマルチスケール・シミュレーション手法開発を進めることとする。

3. 研究実施体制

(1) 町田(原子力機構)グループ

①研究分担グループ長：町田 昌彦((独)日本原子力研究開発機構 室長)

②研究項目

(1) ミクロ (超伝導発現機構)：

- 1) フェルミ原子ガスを通してみる室温超伝導の姿
- 2) 2次元強相関電子系への超並列シミュレーションによるアプローチ

(2) メゾ (デバイス)：

- 1) 高温超伝導体・固有ジョセフソン接合
- 2) 各種超伝導体を幾何学的に配置することで得られる新奇デバイス機能
- 3) 超伝導放射線検出

(3) マクロ (線材)：

- 1) 磁束量子と複合欠陥とのマルチスケール・シミュレーション：

(2) 海老澤(東北大情報)グループ

①研究分担グループ長：海老澤 丕道(東北大学 教授)

②研究項目

- ・微小超伝導系の電気伝導特性に関する理論解析とマルチスケールの理論構築
- ・ネットワーク及び層状ジョセフソン接合系における磁化特性と渦糸のダイナミクスに関する理論解析

(3) 松本(筑波大)グループ

①研究分担グループ長：松本 秀樹(筑波大学 教授)

②研究項目

(1)量子原子気体を主に対称とする超強結合超流動の研究

1-1 超強結合超流動の物理的性質

1-2 自由なモデリングによる超高温超流動の実現

(2)量子原子気体と非平衡現象

(3)高温超伝導体・固有ジョセフソン接合

(4)ナノスケール超伝導体の性質

(4)加藤(大阪府立大)グループ

①研究分担グループ長：加藤 勝(大阪府立大学 助教授)

②研究項目

- ・ラチェット効果を調べるため、サブミクロンサイズの超伝導ネットワークにおける渦糸の運動を有限要素法を用いて現象論的 Ginzburg-Landau 方程式を解き、シミュレーションを行う。
- ・d-dot と呼ぶ複数の種類の超伝導体を組み合わせた超伝導複合体における磁束運動の制御を、2成分の Ginzburg-Landau 方程式を有限要素法を用いて数値的に解き調べる。
- ・異方的ナノサイズの超伝導体の超伝導対称性の形状依存性を微視的な Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことで研究する。
- ・微小な超伝導板において生じる巨大磁束に関して、そのまわりの準粒子構造を微視的な Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値的に解くことで調べ、走査型トンネル分光の実験で観測できる可能性を示す。
- ・現象論的な Ginzburg-Landau 方程式を数値的に解いて得られた超伝導ネットワークにおける磁束構造を、超伝導ネットワークを作成し、SQUID 顕微鏡で磁束を測定することで実証する。

(5)大橋(慶應大)グループ

①研究分担グループ長：大橋 洋士(慶應義塾大学 助教授)

②研究項目

- ・BCS-BEC クロスオーバー理論の超流動転移温度以下への拡張
- ・BCS-BEC クロスオーバーにおける超流動粒子数・凝縮粒子数の研究
- ・光学格子中におけるフェルミ、ボーズ原子ガス超流動を扱う理論の構築の着手

(6)小山(東北大金研)グループ

①研究分担グループ長：小山 富男(東北大学 助手)

②研究項目

- ・超伝導線材内の渦糸ダイナミクス及び固有ジョセフソン接合を用いた量子素子に対する理論的研究

(7)柳澤(産総研)グループ

①研究分担グループ長 : 柳澤 孝((独)産業技術総合研究所 研究グループ長)

②研究項目

- ・ 2次元強相関係への超並列シミュレーションによるアプローチ
- ・ 固有ジョセフソン接合を利用した量子コンピュータの理論

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

町田(原子力機構)グループ

- S. Yamada, M.Machida, Y.Ohashi, and H.Matsumoto, “Strong pairing and microscopic inhomogeneity of lattice fermion systems”, Physica C(In Press).
- M.Machida and T.Koyama, “Theory for Collective Macroscopic Tunneling in High-Tc Intrinsic Josephson Junctions”, Physica C(In Press).

小山(東北大金研)グループ

- T.Koyama, M.Machida, M.Kato and T.Ishida, “Macroscopic Quantum Effect in Intrinsic Josephson Junctions Containing Magnetic Flux”, Physica C(In Press).