

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 27 年 6 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2010～2014

課題番号：22104001

研究課題名（和文）コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス

研究課題名（英文）Materials Design through Computics: Complex Correlation and Non-Equilibrium Dynamics

研究代表者

押山 淳（Oshiyama, Atsushi）

東京大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：80143361

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 38,700,000円

研究成果の概要（和文）：本新学術領域研究の目的は、計算科学と計算機科学が融合したコンピューティクスという新たな学術分野を確立し、物質科学の重要問題である複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測を行うことである。異分野間の連携により、物質科学における量子論的計算のための多くの方法論が高度化・高速化され、それにより、物質科学の進展、とくに、ナノ構造における複合相関解明、電子強相関系における量子相発現の機構解明等の成果が得られた。本研究期間内で、主要学術雑誌に884篇の論文が公表され、主要国際／国内学会での招待講演は498件を数えた。

研究成果の概要（英文）：In this research area, we aim to establish a new academic discipline called "computics", which integrates computational materials science and computer science to change the existing approach of computational physics and forge a new paradigm of materials science. We have innovatively improved the research methodology based on the first principle of the quantum theory and then contributed a lot in materials science. The total numbers of the papers published in major journals and the invited talks in major conferences are 884 and 498, respectively. More information is available at <http://computics-material.jp/index-e.html>.

研究分野：計算物性科学

キーワード：コンピューティクス 計算科学 計算機科学 物質科学 複合相関 非平衡ダイナミクス

### 1. 研究開始当初の背景

ナノテクノロジーあるいは省エネルギー・環境テクノロジーが、持続する次世代の社会を牽引すると目されている現在、物性科学は新たなチャレンジを要求されている。それは量子論に立脚した、新しいものづくりのパラダイムの提示である。様々な物質創成技術、ナノ加工技術の発達により、人類は所望の元素を所望の構造に作りこむ技術を得つつある。問題は、どの元素をどのように並べるかである。量子論の第一原理に立脚した計算科学的アプローチは、その科学的土台の深遠さと付随する定量性の故に、この物質デザインの問題に対する本質的貢献を成し得る。

計算科学的アプローチは、1980年代より着実な進展を示し、とくに密度汎関数理論を主軸とする第一原理計算の有用性は、理工学の多くの分野で認知されている。しかし、「京」コンピュータさらには次世代スーパーコンピュータは、計算科学の新たな展開を要求している。現在、単一演算ノードの性能は飽和に近づいており、今後の高性能スーパーコンピュータは超並列アーキテクチャとならざるを得ない。超並列機においては、これまで開発されてきたプログラム群は有効に働かず、実効性能の低下が顕著となる。計算機アーキテクチャを十分に理解した、新しい数値計算アルゴリズムの導入、ノード間、コア間並列プログラムの開発・高度化が必須の要件となり、従来からの計算科学 (computational science) 分野と計算機科学 (computer science) 分野での互いに独立な研究開発は、有効性を持たない。さらに 2020 年には現実のものとなると予想されている、次々世代エキサフロップス・スーパーコンピュータにおいては、汎用ノードとともに、GPU (Graphics Processing Unit) などの新たなハードウェアを用いた特殊用途計算エンジンが導入されると予想され、高性能コンピューティング (HPC) は多重階層性を持つことになる。

こうした状況においては、計算科学と計算機科学を統合し、さらには数理学の知見を縦横に駆使した、新しいアプローチが必要である。我々はこのアプローチをコンピューティクス (Computics) とよぶ。計算科学は、今、次世代スパコンに象徴される HPC の質的变化に伴い、新たなフェーズに突入している。自然の謎を解き明かし、新たな物質科学の地平を切り開くには、コンピューティクスにより実際の物質での現象を解明・予測し、実験的研究と相補的に共同する新たな学術分野の創成が不可欠である。

### 2. 研究の目的

以上を背景に、本新学術領域研究では以下を目的とする。

(1) 次世代、次々世代 HPC におけるコンピューティクスの確立：次世代超並列アーキテクチャ、次々世代多重階層アーキテクチャ、さらには下方展開として整備されていく各

研究機関での計算機アーキテクチャを踏まえ、(2)以下の実際の物性科学の諸問題における新数値解法の導入、最適アルゴリズム探索、プログラム高度化を通じ、コンピューティクスを確立する。

(2) ナノスケール構造体での非平衡ダイナミクスの解明・予測：密度汎関数理論を主軸とした先端的大規模ダイナミクス計算、非調和項を考慮した統計的サンプリング法、非平衡グリーン関数法などの手法を開拓し、並列アーキテクチャ上で高度化することにより、ナノ構造体の生成機構解明、ナノ界面安定性探索、熱伝導・熱膨張・熱破壊機構解明、過渡的デバイス応答機構解明を行い、ナノ構造体作成可能性とその構造体の機能を明らかにする。

(3) 電子強相関係の物性解明と新量子相の予測：密度汎関数理論とそれを超越する計算手法、エネルギーの階層性に着目したダウンフォールディング法、グリーン関数法などを並列アーキテクチャ上で高度化し、強相関係物質の複合相関性、非平衡系の強相関性を第一原理から定量的に解明し、新機能を有する物質群の予測を行う。電子の相転移が生み出す超高速現象に着目し、時間分解光電子分光などの実験的研究の理論的基盤を形成する。

(4) 超伝導転移温度の定量的計算と予測：電子・格子相互作用、電子・電子相互作用を統一的に記述する超伝導理論を構築し、次世代スーパーコンピュータ上での、高効率計算コードを開発し、高い超伝導転移温度を示す物質群を、実験研究者との共同により探索する。

(5) 蛋白質における反応機構のマイクロな同定と非平衡ダイナミクスの解明：生体を非平衡反応系と捉え、量子論に立脚した原子スケールでの反応機構解明を行う。同時に高次の電子相関効果である分散力の第一原理による記述を可能にする計算手法を確立する。

### 3. 研究の方法

A01:計算機アーキテクチャと高速計算アルゴリズム、A02: 密度汎関数法の新展開、A03: 密度汎関数を超えて、の 3 つの研究項目を設定し、計算科学と計算機科学の分野を連携させる。また A02、A03 の各研究班には実験研究者を配置し、計算科学と実験科学の連携を図る。実験的研究は公募研究としても採択予定であり、進展著しいナノ構造創成実験、高速分光実験、次世代ビーム実験、との連携が期待する。

#### 【本総括班の役割】

異分野間の密接な連携は、本新学術領域研究の進展にとって本質的である。そのために、A01、A02、A03 各研究項目での、具体的な研究活動に加え、本総括研究において具体的な共通研究課題の設定を行う。そのために、全ての計画研究代表者を本総括研究分担者として参画させ、実質的な研究連絡会議を開催する。また各研究グループ間でのミッションの共有、研究計画の調整も役割である。研

研究成果の公表と更なる研究の深化のための、国際・国内研究会を開催する。さらにはコンピュータイクスという新しい学術分野に関する広報活動も行う。

#### 4. 研究成果

##### 【コンピュータイクスの確立】

物質を舞台とする複合相関と非平衡ダイナミクスの解明・予測のためには、「空間」、「時間」、「精度」の3つの軸での先端的物質科学計算、すなわち、大規模、長時間、高精度のシミュレーションが重要である。本領域では、この先端的計算をコンピュータイクスの確立によって達成しようとした。総括班によって随時開催されている、両分野のトピックスを議論しあう「コンピュータイクス勉強会」(世話人: A01 稲葉班、A02 渡邊班、常行班)では、計算科学側(A02、A03 研究項目)とコンピュータ科学側(A01 研究項目)双方から課題を提示し、face-to-faceの議論により問題解決を目指した。実際そうした議論により、A01で展開されているHPCにおけるアルゴリズムと数理手法が物質側に伝授され、A02、A03の多くのアプリケーションは格段に高度化されてきた。その先陣がRSDFT(Real Space Density Functional Theory)コードである。A01高橋班とA02押山班の緊密な共同により、計算負荷の大きい部分(グラム・シュミット直交化、部分空間対角化)に、マルチコア超並列アーキテクチャに最適な数理手法とアルゴリズムが導入され、高度なハイブリッド並列チューニングが行われた。「京」コンピュータ上でのナノメートルスケールのSiナノワイヤー密度汎関数法電子状態計算は、その規模の大きさと実行効率の高さで世界中を驚かせ、2011年度のACM/IEEEのGordon Bell賞(最高性能賞)を獲得した。輸送モデルとの結合により、チャンネル電流密度のワイヤー形状とゲート電圧依存性が明らかとなった。現在、A02渡邊班との共同で、より精緻な非平衡グリーン関数輸送シミュレーション手法との結合が行われている。

こうした異分野間の共同は、研究期間内に大いに進展した。A01張班とA02渡邊班の間では、非平衡グリーン関数輸送計算において、新たな数理手法(Shifted Conjugate-Orthogonal Conjugate-Gradient法)が導入され、現行に比べて22倍の高速化が達成された。これにより、多数の入射エネルギーのサンプリングが可能となり、ナノ構造における急激なコンダクタンス変調が明らかとなった。また、A01公募班として加わった物質計算側の星班では、張班との緊密な共同により、クリロフ部分空間法を機軸とする革新的な線形代数アルゴリズムを導入し、強束縛型モデルではあるが、一億原子群の大規模電子状態計算を可能にしている(ELSESコード)。これにより、アモルファス状高分子有機EL(poly-(9,9)-dioctyl fluorene)系でデバイス性能を支配する $\pi$ 電子系の局在性が明らか

かとなった。また、A01高橋班、櫻井班で提唱された、領域選択固有値計算アルゴリズムは、フェルミ準位付近のエネルギースペクトルが重要であるという物性科学の特徴にフィットし、現在ではA02、A03の多くの班のアプリケーションに採用され、従来は計算不可能であった大規模系のエネルギースペクトル解析に活用されている。

また、A02における密度汎関数法は、A03のダウンフォールディング法、超伝導転移温度計算、マテリアルデザインの基盤を形成し、逆にA03における、多体系に対するより高度な解法の、実際の物質での、高精度計算への応用が開始されている。

こうしたコンピュータイクス・アプローチの重要性は、本新学術領域研究が開始される以前には、殆ど認識されていなかったといえるが、現在では物質科学分野以外の各分野へも広がり、エクサスケール・コンピュータ開発におけるコデザイン(アプリケーションとハードウェア双方の視点からのコンピュータ・アーキテクチャの設計)活動へと結びついている。

コンピュータイクス・アプローチによって高度化されたアプリケーションを公開し、より広範なユーザーに対して提供することも重要と考えている。本新学術領域では、A02中西班、A03佐藤班の大阪大学グループを中心に、人材育成の目的でCMD(コンピュータシヨナル・マテリアルズ・デザイン)ワークショップ(本新学術領域研究期間内に10回開催)、またアジアでの人材育成の目的でAsia CMD Workshop(研究期間内にアジア各地で15回開催)が行われ、第一原理計算手法の普及に努めている。また、文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野2計算物質科学イニシアティブとも連携し、MateriAppsポータルサイト(<http://ma.cms-initiative.jp/ja>)でのプログラム公開を行っている。実際こうしたワークショップに実験研究者も参加し、後述するように、計算と実験の共同研究も進んだ。

コンピュータイクス分野からの発信の目的で、2012年大阪、2014年東京の2度に亘って、International Symposium on Compu-tics: Quantum Simulation and Designを主催した(<http://computics-material.jp/ISC-QSD2014/>、<http://computics-material.jp/ISC-QSD2012/>)。それぞれ、国内外から200名程度の参加者があり、活発な議論が展開された。

##### 【計算と実験の共同】

計算と実験の共同研究により、現象の本質とさらには定量的側面をも明らかにすることは、本新学術領域研究の重要な側面である。11件の計画研究には、研究分担者あるいは連携研究者として実験家も加わっている。また公募研究には10件の実験的研究班も加わり、計算と実験との間の有意義な共同研究が展

開された。A02 中西班では、阪大中西グループと東大福谷グループの間で、触媒表面である Pt 面上での水素反応に関して、計算と実験との間での緊密な共同研究が行われた。A02 倭班では、時間分解 X 線結晶解析 (KEK 足立グループ) と分子シミュレーション (名大倭グループ) の比較により、酸素貯蔵蛋白であるミオグロビン内部でのガス分子移動機構が解明された。また、A02 中村班による、ナノ接合での分子構造を考慮した電流応答計算は、A02 木口班のオリゴチオフェン分子を用いた単分子スイッチングの成功に結び付いた。A03 今田班では、光電子分光実験との共同で強相関物質の電子状態を解明している。A03 佐藤班の提唱するスピノーダル分解、同時ドーピングを利用した半導体成膜技術は、A03 周班、田中班、黒田班の成長実験によって、その有効性が確かめられた。さらには、A02 押山班と A02 平山班でのシリセン (silicene: グラフェン状の Si 膜) に対する計算と実験の相補的研究など、多くの班で建設的な連携が行われた。

また領域を超えた計算と実験との共同も進んだ。物性科学関係の新学術領域研究は合同研究会を毎年開催しているが (本領域が世話人として行った 2013 年度のホームページ (<http://www.topological-qp.jp/ryoikioudan2014/>)), その研究会を契機として、A02 中西班で開発したプロトン・ミュオンの量子性を考慮したダイナミクス計算 (コード名: Naniwa) が、「超低速ミュオン顕微鏡が拓く物質・生命・素粒子科学のフロンティア: 鳥養映子代表」新学術領域の、山梨大学および KEK の実験研究者によって行われた。具体的には、上記 CMD ワークショップに若手実験家が参加し、Naniwa コードによる計算と自らの実験結果とを比較し、酸化ケイ素、グラフェン、チトクローム c 膜蛋白などでのミュオン状態の解明を行い、共著論文、招待講演という成果に結びついている。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 5 件) (査読なし)

1. 押山淳他、コンピューティクスによる物質デザイン: 複相関と非平衡ダイナミクス平成 22 年度成果報告書 (全 78 頁) (2011).
2. 押山淳他、コンピューティクスによる物質デザイン: 複相関と非平衡ダイナミクス平成 23 年度成果報告書 (全 204 頁) (2012).
3. 押山淳他、コンピューティクスによる物質デザイン: 複相関と非平衡ダイナミクス平成 24 年度成果報告書 (全 201 頁) (2013).
4. 押山淳他、コンピューティクスによる物質デザイン: 複相関と非平衡ダイナミクス平成 25 年度成果報告書 (全 232 頁) (2014).
5. A. Oshiyama et al., ``Materials Design

through Computics: Complex Correlation and Non-Equilibrium Dynamics” (227 pages in total) (2015).

[その他]

領域ホームページ

<http://computics-material.jp/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

押山 淳 (OSHIYAMA, Atsushi)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号: 80143361

### (2) 連携研究者

稲葉 真理 (INABA, Mary)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授

研究者番号: 60282711

高橋 大介 (TAKAHASHI, Daisuke)

筑波大学・情報システム系・教授

研究者番号: 00292714

張 紹良 (ZHANG, Shao-Lian)

名古屋大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号: 20252273

常行 真司 (TSUNEYUKI, Shinji)

東京大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号: 90197749

渡邊 聡 (WATANABE, Satoshi)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号: 00292772

中西 寛 (NAKANISHI, Hiroshi)

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 40237326

倭 剛久 (YAMATO, Takehisa)

名古屋大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 90251587

今田 正俊 (IMADA, Masatoshi)

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号: 70143542

高田 康民 (TAKADA, Yasutami)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号: 00126103

佐藤 和則 (SATO, Kazunori)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 60379097