



シミュレーションが
未来をひらく

計算科学 の世界

K computer Newsletter **NO. 11**
October 2015

物質の中に宇宙が見えてくる

スケールを超える臨界現象を探す



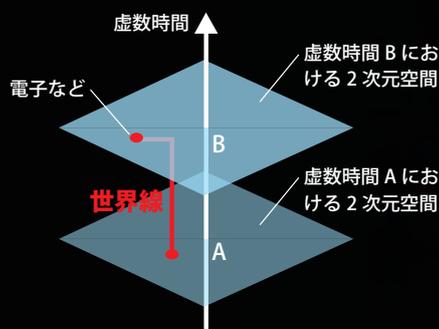
理化学研究所
計算科学研究機構
RIKEN Advanced Institute for Computational Science

物質の中に宇宙が見えてくる

スケールを超える臨界現象を探す

原田健自 Kenji Harada

京都大学大学院情報学研究科 助教



右の図の水平方向は電子などが存在する2次元空間、垂直方向は虚数時間を表す。

虚数時間は、虚数（2乗したときに負になる数）を単位とする。虚数時間は実在しない時間ではあるが、量子揺らぎを表現するために導入されている。

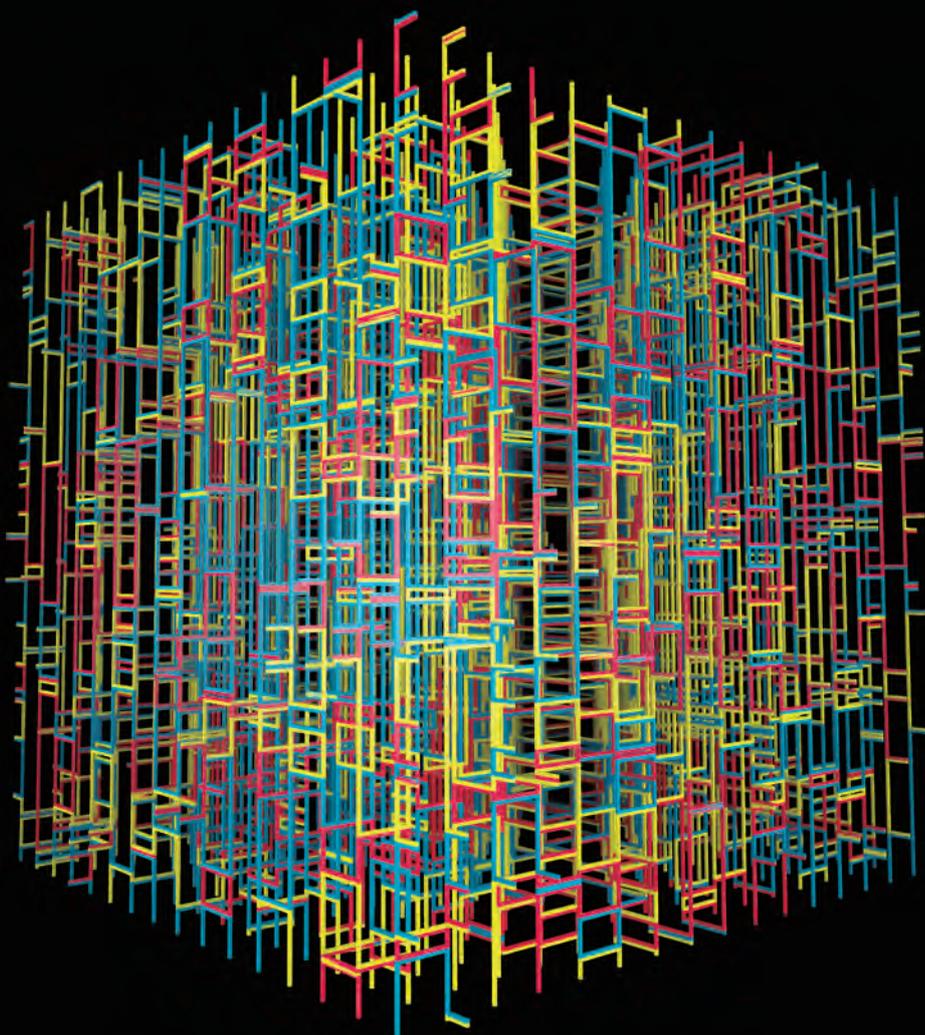


図1 脱閉じ込め量子臨界現象における世界線の状態

色づけられた線は、電子などの時空間における軌跡を示し、「世界線」と呼ばれる。このような世界線から導かれる計算結果に基づき、脱閉じ込め量子臨界現象の検証を行っている。

原田さんたちは、物質の中で起きる新しい臨界現象を

「京」などのスーパーコンピュータを駆使して探しています。

臨界現象とは、ある条件で物質の状態が突然変わる相転移の一種です。

しかも物質の中で起きる臨界現象は、特有のスケールを持たない現象であり、

広大な宇宙から物質の最小単位である素粒子の世界に至るまで、

あらゆるスケールで起きる可能性があると考えられています。

量子の世界を再現する難しさ

「高校のとき、部活動でコンピュータ・グラフィックスを作成しました」と原田さんは振り返ります。「そのとき、光線が物質に当たり、反射して私たちの目に届く過程を追跡するレイトレーシングという計算手法があることを知りました。当時は計算量の関係でもっと簡単な手法をプログラミングして使ったのですが、計算機の中に光線と物質から成る現実の世界を再現することで、実物と見分けがつかない画像を描くことができることに強い感銘を受けました」

原田さんが今、計算機の中で再現しているのは、物質をつくる原子や電子など、極微の量子の世界です。

「しかし、現在の計算機の中で量子の世界を再現するのは、そもそも無理があります」と原田さんは言います。

「例えば1個の電子でも状態が一つに定まらず揺らいでいます。量子の世界では日常感覚ではイメージがしにくい性質が現れるのです。そのような量子の世界の性質に基づき物質の中で起きる現象を再現する研究をしているのですが、それには膨大な計算量が必要になります。物質を構成する原子の数が10倍に増えたとすると、その物質の状態を再現するための計算量は、10倍ではなく、元の計算量の10乗（元が10なら $10^{10}=100$ 億）に増えてしまいます。そこで私たちは、計算が可能な物質や現象を選び、計算手法などを工夫することで、何とか量子の不思議な世界を再現しています。そこが難しさと同時に面白いところです」

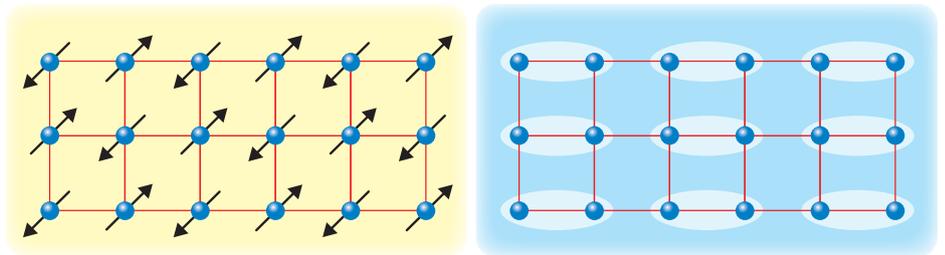
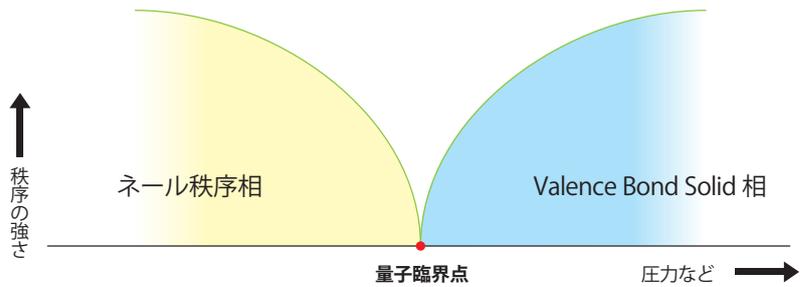


図2 脱閉じ込め量子臨界現象

ネール秩序相では電子スピンの向きが互い違いになっているのに対して、Valence Bond Solid相では電子のスピンがペアを組んでいる。ある操作によって全体の様子が変化しない場合、その操作に関する「対称性がある」という。実際、ネール秩序相では格子を90度回転させても変化がないし、Valence Bond Solid相では電子スピンを一斉に回転させても変化はない。臨界現象は、「対称性の自発的な破れ」と解釈できるので、そのような対称性の観点から見ると、ネール秩序相とValence Bond Solid相間の変化は、二つの臨界現象が融合して同時に起きていていると考えられる。

二つの臨界現象が融合して同時に起きる

原田さんは物質で起きるどのような現象を計算機の中に再現しようとしているのでしょうか。「メインテーマの一つは臨界現象です。臨界現象は相転移の一種です」

まず、相転移とは何でしょうか。「0°Cで水が氷に変わったり、ある圧力と温度で磁力が現れたりするなど、物質の性質が突然変わる現象です」と原田さんは説明します。では、水が氷に変わるような相転移と臨界現象では、どのような違いがあるのでしょうか。

「臨界現象は特有のスケールを持たないという特徴があります。物質の中で起きる臨界現象は、物質の最小の単位である素粒子のスケールや、広大な宇宙スケールでも起きる可能性があると考えら

れているため、研究する価値が高いのです」と原田さんは力を込めます。

物質の中では無数の種類の臨界現象が起き得ると理論上は考えられています。しかし、平面状の2次元や立体的な3次元の物質の中で実際に発見されている臨界現象は数えるほどしかありません。「臨界現象は、見つけることが難しい宝石のようなものです。私たちは今、臨界現象の中でもまれにしか起きない『脱閉じ込め量子臨界現象』の研究を行っています」

それは、マイナス273.15°Cという絶対零度において起きる電子スピンが関係した現象です。電子スピンとは、磁力を生み出す源で、向きを持っています。磁石では、多くの電子スピンが同じ方向を向いているので、磁力が現れるのです。

「脱閉じ込め量子臨界現象では、電子スピンの向き並び方が、ある条件で突

東京大学物性研究所のスーパーコンピュータ「Sekirei」の前で
撮影：STUDIO CAC



原田健自 京都大学大学院情報学研究所 助教

然変わります (図2)。しかもその変化を対称性という観点から見ると、二つの臨界現象が同時に起きていると考えられます。そう言われても、イメージができませんよね。あくまで例え話ですが、磁力を持つ水があったとしましょう。その水に圧力をかけていくと、あるところで氷となり、しかも、同時に磁力を失う現象が起きるようなものです。つまり、**脱閉じ込め量子臨界現象は、無関係だと思われていた2種類の現象が融合して同時に変化する特殊な臨界現象**なのです。従来の臨界現象の理論を超える現象なので、それが本当に起きるのかどうか、研究者の間で大きな論争になっています」

脱閉じ込め量子臨界現象を「京」で検証する

原田さんたちは、あるタイプの物質で圧力などの条件を変えていくシミュレーションを行い、脱閉じ込め量子臨界現象

が起きるかどうか調べる研究を行いました。「すると、小さなサイズでは、脱閉じ込め量子臨界現象と同様の電子スピンの変化が起きることを突き止めました」(図1・図3)

それが本当に臨界現象であることを確かめるには、物質のサイズを大きくしても電子スピンの変化が起きるかどうか調べなければいけません。ただし、物質のサイズを少し大きくするだけで必要な計算量が急増してしまいます。そこで、原田さんたちは世界有数の計算速度を誇る「京」や、東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを用いて研究を続けてきました。

「その結果、**私たちが計算機の中で見つけた変化が脱閉じ込め量子臨界現象である確率が8割、そうでない確率が2割といった状況**です。変化が起きる瞬間(量子臨界点)において、それまで自由に動けず閉じ込められていたスピノンという

仮想的な粒子が物質全体を自由に動き回る“脱閉じ込め”が起き、スピノンが2種類の異なる現象を融合させて同時に変化を引き起こすと考えられています。私たちは、計算機の中でスピノンを再現して、それが自由に動き回るかを調べることで、脱閉じ込め臨界現象の検証を続ける計画です」

素粒子物理学や宇宙論にも貢献

臨界現象の研究には、どのような意義があるのでしょうか。「妻に“あなたの研究は何に役立つの?”と聞かれると、いつも答えに詰まってしまいます」と原田さんは苦笑します。

特に、脱閉じ込め量子臨界現象は絶対零度で起きる現象なので、その研究成果を直接、装置や材料の実用化へ役立てることは難しいと考えられます。しかし、**物理学全体に大きなインパクトを与えるはず**です。

「脱閉じ込め量子臨界現象は、もともと素粒子の世界で起きると考えられてきました。ただし最先端の素粒子理論の計算は、物質の計算よりもさらに難しいため、本当に起きるかどうか立証できません。私たちが物質の中で脱閉じ込め量子臨界現象が起きることを確かめることができれば、その現象は素粒子から宇宙までスケールを超えて起きる可能性があると考えられ、物質の起源を探る素粒子物理学や、宇宙誕生を研究する宇宙論に大きく貢献することになります。臨界現象の魅力の一つは、物質の中に宇宙が見えてくることです」

```
common.h
void flip() { type = (type == diagonal ? offdiagonal : diagonal); }
void flip(int N, int k) {
  if (k >= 0)
    type = (type + k) % N;
  else {
    type = N - ((N - k - type) % N);
    if (type == N) type = 0;
  }
}

sstructure.h
boost::tie(qx, qy) = lmmnt.momenta[q].first;

loop_mpi.h
Interval_ = params.defined("INTERVAL")
? static_cast<int>(alps::evaluate("INTERVAL", params))
: 1;

int num_processes, process_id;
MPI_Comm_size(comm, &num_processes);
MPI_Comm_rank(comm, &process_id);
tau0 = 1. * process_id / num_processes;
tau1 = 1. * (process_id + 1) / num_processes;

#ifdef LOOPER_OPENMP
int num_threads = omp_get_max_threads();
#endif

// lattice
lattice_.init(length_x_, length_y_);
#ifdef LOOPER_OPENMP
sharing_.init(lattice_);
#endif

// vector of operators
operators_g_.resize(num_threads);
operators_pg_.resize(num_threads);
times_g_.resize(num_threads);
#endif

#ifdef LOOPER_OPENMP
choice_g_.resize(num_threads);
total_weights_g_.resize(num_threads);
#pragma omp parallel
{
  start;
  ex_type(0, 0);

  et_thread_num();
  tid_.reset(new std::vector<double>(N, 0));
  tid_.reset(new std::vector<double>(N, 0));

  e(static) reduction(+: x_r, x_i)
  {
    s < num_sites; ++s) {
      phase(q, s).real();
      phase(q, s).imag();
    }

    e(static)
    {
      s < num_sites; ++s) {
        eal[tid_][spins[s]] += lmmnt.phase(q, s).real();
        mag[tid_][spins[s]] += lmmnt.phase(q, s).imag();
      }

      e(static)
      {
        i < N; ++i

```

図3 脱閉じ込め量子臨界現象を検証するための計算プログラムの一部 (ALPS/looperをベースに開発)

(取材・執筆：立山 晃/フotonクリエイト)

ポスト「京」が目指すこと 第1回

「京」の計算速度を大きく超えるポスト「京」の開発が、2020年の完成を目指して進められています。ポスト「京」ではいったいどんなシミュレーションが行われるのでしょうか。9つの重点課題からピックアップして紹介します。

地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 (課題3)

2011年の東日本大震災の大きな教訓は、過去の経験からでは予測が困難な想定外の地震・津波に備える必要があることです。想定外を減らすためには、季節や時間、場所、天気、地震・津波の規模など、さまざまな条件のシナリオについて、どのような被害が起きるのか統合的な予測を行う必要があります。「京」であっても、一つ

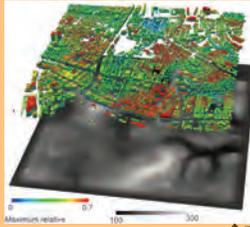
のシナリオの予測にもかなりの計算時間がかかるため、ポスト「京」の登場に期待が寄せられています。将来は、ポスト「京」で築いた地震・津波の統合的予測システムを、国や自治体などが防災や災害復旧に有効利用できるように実用化を進めようとしています。

地震・津波の災害被害予測の実用化研究

統合的予測のための社会科学シミュレーションの開発

都市全体の津波の遡上現象を3次元で解析(「京」では困難)

「京」で行われている建築建物への被害予測に加えて、橋や道路、ライフラインなどの社会基盤施設の被害予測



複数の被害シナリオで、徒歩・自動車などを使った100万人を超える群集の避難シミュレーション(「京」では10万人規模)



想定外を減らすため1000以上の地震シナリオでシミュレーション

地震被害がもたらす交通障害シミュレーションおよび復旧に伴う地域やその周辺での経済活動の回復シミュレーション(「京」では未実施)

次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成 (課題7)

私たちの暮らすIT社会は、数多くのデバイスや材料に支えられています。より健康で安心・安全な省エネ社会を目指すため、「京」では特に今後重要となるデバイスや材料のもとになる物質について、かつてない1000から1000万クラスの原子数のシミュレーションを行い、機能や性能の向上と電子状態の関係を調べてい

ます。ポスト「京」では、さらに複雑な構造や組成も考慮した現実に近いシミュレーションにより、産業化が可能な新しいデバイスや材料の設計を目指します。また、膨大な実験データとシミュレーションを融合させた新しい材料設計手法の開発にもチャレンジします。

高信頼性構造材料
火力発電所などプラントの高効率・長寿命化や、橋・ビル、船舶・航空機・鉄道・自動車などの高強度・軽量化を実現する金属材料



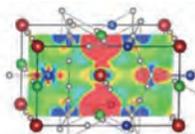
鋼鉄材料組織

高性能半導体デバイス
省エネ社会の基盤を構築する化合物系半導体デバイス

光・電子融合デバイス
超高速低消費電力通信技術を実現するデバイス

次世代機能性化学品
工場排水の浄化や海水淡水化、人工腎臓に用いる高性能の分離膜

高性能永久磁石・磁性材料
ハイブリッドカーなどで使われるモーターや発電機用の小型で希少元素を使わない強力な永久磁石



磁石材料

超伝導・新機能デバイス材料
新しい動作原理による超省電力な情報処理装置・メモリー

共通基盤シミュレーション手法
上記の材料開発に共通して必要な基盤的なシミュレーション手法の開発

雲に魅せられて——自然豊かな街に生まれ、勉強よりも遊び・スポーツっ子だった佐藤さん。やがて都会に出た彼の中で、子どものころから感じていた「目の前の物事を解明したい」という思いが強くなっていき、気象研究を始めました。雲の性質に関わるエアロゾル^{*}に焦点を当てて「京」でシミュレーションを行い、エアロゾルが雲に与える影響を理解しようとしています。32歳と研究所の中では若く、親しみやすい人柄でもある、気象科学の将来を担う佐藤さんにお話をお伺いしました！

^{*}エアロゾル：大気中に漂う、ちりなどの小さな粒子。雲をつくる水滴の核となる。



複合系気候科学
研究チーム
さとうようすけ
佐藤陽祐
基礎科学特別研究員

岐阜県立関高等学校卒業。名古屋大学理学部卒業後、東京大学大学院修士課程修了。東日本旅客鉄道株式会社を入社1年後に退職し、東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻博士課程修了。趣味はバスケットボール。

第3回

兵庫県立洲本高等学校有志

研究者に聞いてみよう！

Q なぜこの職業を選んだのですか？

A 高校時代に物理が得意でした。普段見ている空や雲などの景色に覚えた疑問を解き明かして、さまざまな人に知ってほしいと思っていました。一時期は教師を目指していたこともあります。研究したいという気持ちも強く、研究者になりました。

Q 一般人に知ってほしい研究者の苦労はどのようなものですか？

A 基本的には、苦労や努力を知ってほしいとは思いません。ですが、研究に限らずどんな世界でも陰で頑張っている人は大勢います。その人たちがいるからこそ僕たちの生活が成り立っているということ、自分の力で調べ、知ってほしいです。自分の力で得た情報にこそ、意味があると思います。

Q 研究職で知られていないことは何ですか？

A 世間からは、変な人がたくさんいるかのように思われていますが、そんな人たちはほんの一部だと思います(笑)。

Q 失敗談はありますか？

A 英語をもっと勉強しておくべきでした。他国の研究者と話すときや論文の読み書きに、英語力は必須です。高校時代に国語や英語といった語学の勉強を怠ったことが、

論文を書くときに大きな支障になったので、理系科目以外もしっかり勉強してください。

Q 好きな言葉は？

A 「日はまた昇る」。理由は、「つらいことがあっても、また日は昇って明日になる」という意味だけでなく、「何もなくても日は昇っていく」。つまり「何もなくても世界は動いていく、そんな中で何もしないままではもったいない」という意味もあるからです。

Q 仕事で得たものは何ですか？

A 研究者は2、3年で転勤することも多いですが、その中でさまざまな研究をしている人と出会い、新たな知識やつながりを得ることができました。

Q 研究の最終目標は何ですか？

A エアロゾルはCO₂のような温室効果ガスによる温室効果を打ち消す効果があるといわれています。その一方で、排気ガスなどのように人為的に生まれることもあるので、人間活動によって地球のエネルギー循環を変化させる効果もあります。そういった未解明の効果を明らかにして、広く社会に知らせることで、大気汚染の低減に役立てられたらいいと考えています。

Q 研究のプロフェッショナルとは何ですか？

A プライドと責任を持って仕事に臨むことです。研究職では自分しかその研究をしていないことが多いですが、それを孤独に感じることなく、世界でこの研究をしている人は数少ないんだという誇りと責任を持って一人でやり切る強さは大切です。それと、自分の研究が過失を犯してしまったとしてもそれにきちんと責任を持つことも、大人として、プロとして大事です。



インタビューを終えて

普段お会いする機会がない研究者へのインタビューを通して貴重なお話を聞くことができ、有意義な体験ができました。僕たちが思い描いていた研究者像と違って、研究の紹介にユーモアを交えて話してくださいたりする親しみやすい人柄に、意外な一面を感じました。「日はまた昇る」という言葉は、希望とともに、大切な日々を悔いなく生きるように戒める言葉であり、大事をなすには自分の信念を持って日々コツコツと目標に向かって努力することが大切なのだと感じました。最後に、今回の取材に携わってくださった方々に感謝致します。お忙しい中、時間を割いていただき、本当にありがとうございました。

(取材・執筆：青木淳一郎、陸山信二、亀田航平、仙崎直輝、谷上周、玉置幹、萩原健登、松原宏太)

