

物性研究所 短期研究会 計算物理学



日時：2009年12月10日（木）～11日（金）

場所：東京大学物性研究所本館6階大会議室（A632）

--- プログラム ---

12月10日（木曜）

----- 電子相関 -----

- 10:00-10:25 前園涼（北陸先端大）
“量子モンテカルロ法による電子状態計算”
- 10:25-10:50 獅子堂達也（広大）
“HiLAPW コードの現状と次世代スパコンに期するもの”
- 10:50-11:15 中村和磨（東大）
“第一原理からの物質の低エネルギー有効模型構築”

----- 複雑流体 1 -----

- 11:15-11:40 尾形修司（名工大）
“固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める多階層シミュレーション”

12:40-13:00 --- *Lunch* ---

----- 複雑流体 2 -----

- 13:00-13:25 畝山多加志（京大）
“からみあった高分子のマルチスケールシミュレーションと高速応力シミュレーション”

----- 界面 -----

- 13:25-13:50 大谷実（産総研）
“電極界面における第一原理シミュレーション”

13:50-14:15

小倉昌子（大阪大）

“遮蔽 KKR 法の開発と電子状態／伝導率計算への応用”

14:15-14:35 --- *Coffee break* ---

----- **GPGPU 特別セッション** -----

14:35-15:05

飯高敏晃（理研）

“GPGPU は「次世代スパコン」の敵か味方か”

15:05-15:35

成見哲（電通大）

“GPU を用いた N 体問題の加速”

15:35-16:05

馬路徹（エヌビディア・ジャパン）

“”

16:05-17:30 ポスターセッション

12月11日（金曜）

----- 統計物理学 -----

- 10:00-10:25 藤堂真治（東大）
“”
- 10:25-10:50 鈴木隆史（物性研）
“向き付きループアルゴリズムの改良と量子スピン系への適用”
- 10:50-11:15 富田裕介（物性研）
“双極子相互作用系のモンテカルロシミュレーション”
- 11:15-12:15 --- 戦略拠点 ---

12:15-13:30 --- *Lunch* ---

----- 大規模計算、 $O(N)$ -----

- 12:30-13:55 岩田潤一（筑波大）
“実空間密度汎関数法コード(RSDFT)の開発と応用”
- 13:55-14:20 宮崎剛（物材機構）
“オーダーN法第一原理計算プログラム CONQUEST の開発と応用計算”

14:20-14:40 --- *Coffee break* ---

----- 電子系ダイナミクス、伝導 -----

- 14:40-15:05 小野倫也（阪大）
“ナノスケール電子輸送現象の第一原理計算”

15:05-15:30

矢花一浩（筑波大）

“光と物質の相互作用に対する実時間第一原理計算”

15:30-15:55

曾田繁利（京大）

“”

15:55-16:20

原田健自（京大）

“エンタングルメント繰り込みテンソルネットワークを用いたフラストレートした量子スピン系の計算手法”

--- ポスターセッション ---

- P-01** “カゴメ格子反強磁性体の磁化過程の数値対角化による研究”
坂井徹（原子力機構）
- P-02** “熱ゆらぎ・量子ゆらぎ同時制御型量子アニーリング法の開発”
田中宗（物性研）
- P-03** “分離固定点からのクロスオーバーであらわれる一次相転移”
紙屋佳知（物性研）
- P-04** “パイロクロア格子上の二重交換モデルに対するモンテカルロ法による研究”
求幸年（東大）
- P-05** “カウンターOVモデルのレーン形成とその不安定性”
池田昌浩（京大）
- P-06** “カゴメ格子上ハバードモデルにおける重い電子状態の数値的研究”
宇田川将文（東大）
- P-07** “12H-AIN の第一原理計算と並列化(OpenMP)”
小林一昭（物材機構）
- P-08** “双極子スピンアイスモデルの[111]磁場中秩序相”
内山敦夫（物性研）
- P-09** “量子モンテカルロ法を用いた光格子中における2成分ボーズ原子気体のシミュレーション”
大越孝洋（物性研）
- P-10** “量子モンテカルロシミュレーションによるエンタングルメントエントロピーの計測”
金井龍一（東大）
- P-11** “多項式展開モンテカルロ法における GPGPU”
古川信夫（青山学院大）
- P-12** “マルチフェロイック系 Mn 酸化物における軌道秩序の第一原理計算”
石井史之（金沢大）

- P-13** “粒子数非保存系の量子モンテカルロ法とスピンプイエルス系への応用”
諏訪秀磨（東大）
- P-14** “並列 DMRG 法のスピンラダー系への応用”
五十嵐亮（原子力機構）
- P-15** “流れによる赤血球、脂質ベシクルの変形”
野口博司（物性研）
- P-16** “量子モンテカルロ法による量子クロック模型のスティッフネスの計算”
松尾春彦（東大）

招待講演 1

2009年12月10日(木)

量子モンテカルロ法による電子状態計算

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学 前園涼

量子拡散モンテカルロ法は、電子状態計算手法における一つの代表的手法で[1-3]、特徴的な算法構造を持つ[4]。また近年では、基底エネルギー計算のみでなく、密度行列からの二次加工量計算などが可能となりつつあり[5]、高速計算技術が着実に、手法の可能性を広げつつある。講演では、並列アーキテクチャを用いた当該手法の高速化や、今後の超並列域で予想される現行実装の問題点、今後の課題について述べる。また、高速化のホットスポットについて解説し、グラフィック・プロセッサ利用の可能性についても議論する。

文献

- [1] 「ナノ・クラスタ科学における精密電子状態計算」, 前園涼, ナノ学会会報第3 巻2 号, 87-95 (2005), ナノ学会.
- [2] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs and G. Rajagopal, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001).
- [3] 「量子モンテカルロ法による第一原理計算法」, 前園涼, 固体物理 **39**, 779-790 (2004)、アグネ技術センター.
- [4] 計算工学会編「シミュレーションハンドブック」(丸善; 近刊)、§ 4.5 「量子モンテカルロ法による電子状態計算の実用化」(前園涼)
- [5] "Excitonic Condensation in a Symmetric Electron-Hole Bilayer", S. De Palo et.al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 206401 (2002).

HiLAPW コードの現状と次世代スパコンに期するもの

広大院先端 獅子堂達也

HiLAPW (Hiroshima LAPW)コードは、凝縮系における第一原理電子状態計算を目的とする計算コードであり、精度の高い全電子 FLAPW 法を採用している。密度汎関数法に基づく通常の LDA・GGA 計算が可能である。スカラー相対論的計算のほか、スピン軌道相互作用を取り込んだ計算も可能であり、磁性体の結晶磁気異方性の議論[1]や表面系での Rashba スピン分裂の議論[2]に応用を行ってきた。また Berry 位相の理論を用いた強誘電体の電気分極の計算[3]が可能である。

コードの守備範囲をさらに広げるため、最近、ノンコリニアな（非共線な）磁気構造を扱えるようコードの拡張を行った。これにより広範な磁気秩序の議論が可能となる。いくつかの遷移金属酸化物においてらせん磁性の出現と共に自発的電気分極が観測され活発な研究が行われているが、こうしたいわゆるマルチフェロイクスの分野に今後適用していくことが可能となる。

さらに GW 近似に代表される多体摂動理論に基づく第一原理計算が可能となるよう手法開発・コード開発を行っているところである。局所場の効果を取り入れた誘電関数の計算、Fock 交換相互作用の計算が可能となっている。これらの長波長極限を正確に計算するためには Bloch 関数の k 微分の情報が必要となり、ここでは k - p 摂動法が有用となる。波動関数の展開基底の不完全性を考慮に入れた LAPW k - p 法[4]を確立した。

講演では、HiLAPW コードの開発・改良の現在の状況について概説するとともに、最近の具体的応用例としてカルサイト CaCO_3 の複屈折の微視的メカニズムおよびノンコリニアな磁気構造を持つ導電性三角格子 PdCrO_2 の電子状態等を紹介する。さらにこの現状を踏まえて、我々が次世代スパコンに期するものについても議論したい。本研究は小口多美夫氏との共同研究によるものである。

文献

[1] TS and T. Oguchi, Phys. Rev. B **62**, 11747 (2000); T. Oguchi and TS, Phys. Rev. B **70**, 024412 (2004).

[2] K. Sakamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 156801 (2009); T. Oguchi and TS, J. Phys. Condens. Matter **21**, 092001 (2009); M. Nagano *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **21**, 064239 (2008).

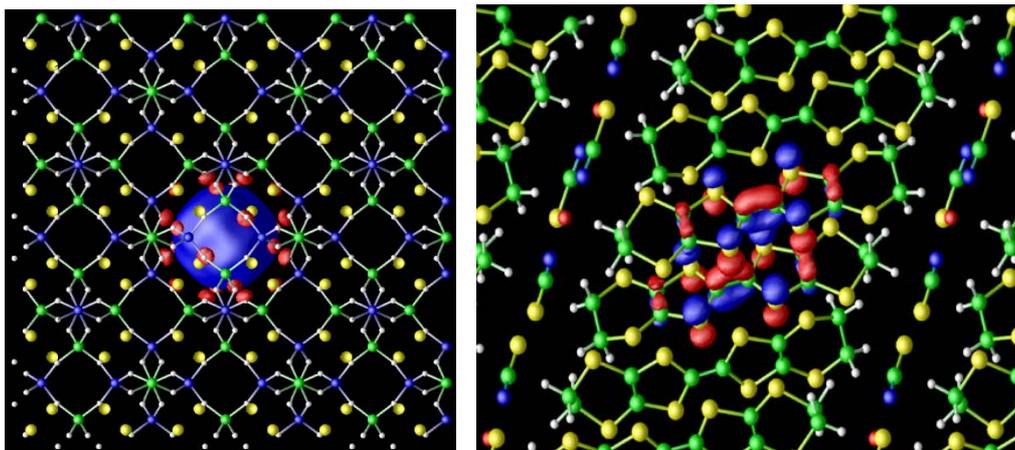
[3] TS *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **16**, S5677 (2004).

[4] TS and T. Oguchi, Phys. Rev. B **78**, 245107 (2008).

第一原理からの物質の低エネルギー有効模型構築

東大工 中村和磨

強相関第一原理計算の基礎的土台としての物質の低エネルギー有効模型を得ることを目的として、これまで開発してきた「第一原理ダウンフォールディング法」とその応用について紹介する。これまで現象論的・経験的になされてきた有効模型導出を完全に第一原理計算に基づかせ、有効模型のパラメータを、単なるパラメータとしてではなく、現実物質を特徴づける微視的因子として捉えることで物質の個性を分析する。遷移金属化合物（鉄系超伝導体）[1]、アルカリクラスター充填ゼオライト [2]、有機化合物 [3] への実証研究を通して、これらの物質群の「差異」の考察、手法の定量的信頼性、将来の検討課題について議論する。本研究は、今田正俊氏、吉本芳英氏、有田亮太郎氏、是常隆氏、小杉太一氏との共同研究である。



第一原理計算より得られた最局在ワニエ関数: (左) アルカリクラスター充填ソーダライト; (右) 有機導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂.

[1] K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 093711 (2008).

[2] K. Nakamura, T. Koretsune, and R. Arita, Phys. Rev. B **80**, 174420 (2009)

[3] K. Nakamura, Y. Yoshimoto, T. Kosugi, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 083710 (2009).

固体物理と流体物理のスケールギャップを埋める多階層シミュレーション

名工大院・創成シミュレーション工学専攻¹, JST-CREST² 尾形修司^{1,2}, 後藤俊幸^{1,2},
小林亮^{1,2}, 井上洋平^{1,2}

MEMS, 微量計測機器, 燃料電池セル, 微細加工流路, 排気浄化触媒等の実用システムでは, ナノメートルからマイクロ超メートルまでの幅広い空間スケールの階層における過程が複雑に相関し合うことで, その機能を発現している. ナノメートルスケール以下の原子・電子系, マイクロ超メートルスケール以上の構造体・流体系では, それぞれ電子密度汎関数法や有限要素法等により大きな成果を上げてきたが, その中間にある 3-4 桁程度のスケールに対しては, 適切な計算手法がまだ無いと思われる.

多階層スケールを明示的に扱うシミュレーション手法には, 同時並列(ハイブリッド)型とパラメータ授受型の二つのタイプがある. 同時並列型では, 系全体を必要な物理精度に応じて複数の領域に空間分割し, 各領域に適切なスケール階層の計算手法を同時に適用する. パラメータ授受型は, スケール間の分離が近似的に可能な場合に特に有用である. 我々の目的は, 様々な実用システムに見られる複雑形状・動的変形する流体-固体界面近傍での物理的・化学的過程への適用を目ざし, パラメータ授受型の階層的取扱により適用範囲を広げた様々な固体・流体計算法を, 対象系の部分領域に必要なに応じて適用する同時並列型シミュレーション手法を開発すること, 同時並列型であることを活かして大規模計算環境でそれらの実用的シミュレーションを実現することである.

我々は, 対象スケールの小さな順に, 実空間密度汎関数法($O(N^3)$ コードあるいは divide-and-conquer 型の $O(N)$ コード), 古典分子動力学法, 粗視化粒子法, 流体計算用の格子ボルツマン法を主な計算手法とし, 互いに隣接するスケール用の手法を同時並列型にハイブリッド化してシミュレーションコードを作成している. 講演では, (i) これまでに開発した量子-古典領域接続法を用いたハイブリッド量子-古典コードにより, 水分子群を挟んだ状態でダイヤモンドナノチップを Si 表面に押下擦あるいはインデンテーションする例, (ii) Li イオン 2 次電池の陰極に関連してグラファイト層間中の Li イオンの拡散ダイナミクスにハイブリッド量子-古典コードをアダプティブに適用する例, (iii) 独自開発中の原子群を局所熱平衡のもとで粗視化して扱う粗視化粒子法と, 粗視化スケール領域と原子スケール領域との非物理的反射を抑制した接続法を固体結晶の破壊ダイナミクスに適用する例, (iv) 流体部分には格子ボルツマン法, 固体部分には粗視化粒子法を適応し, 埋込境界法を援用して両者を接続することでメゾスケール構造体の振動と流体との動的相互作用をあからさまに取り入れたシミュレーションの例などについて紹介する予定である.

からみあった高分子のマルチスケールシミュレーションと高速応力シミュレーション

京大化研、JST-CREST 畹山多加志、増淵雄一

高分子はモノマーが化学結合によりつながった紐状の巨大分子であり、そのダイナミクスや静的構造は幅広い時間・空間スケールに渡ることが大きな特徴である。高分子の物性は分子の物理的構造 (幾何学的拘束効果) に強く影響され、例えば分子量の大きな高分子同士は互いにすり抜けられない (からみあっている) ため緩和時間が非常に長くなる [1]、といった高分子特有の物性が表れる (Figure 1 参照)。

このような高分子の物性を考える際にはマイクロとマクロの中間のメソスケールが重要であり、これまでに様々な粗視化手法に基づくメソスケールモデルが提案されている。メソスケール粗視化モデルはシミュレーションに必要な計算コストを大幅に削減し、高分子のダイナミクスや構造を効率的に調べることが可能とする。例えば、からみあった高分子に対しては高分子の運動を周囲の高分子が形成する管構造内部での運動として表す管模型 [1] や複雑なからみあい構造を単純な結合点 (スリップリンク) で置き換えるスリップリンクモデル [2-4] 等が提案され、成功を取っている。

これらの粗視化モデルは高分子系の性質を良く捉えているが大胆な仮定や現象論的パラメータが導入されていることが多く、粗視化が定性的・定量的に妥当なものか、モデルの適用範囲はどの程度かといった問題は十分に検証されているとは言えない。さらに、個々の粗視化モデル単体では実際に興味ある現象の時間・空間スケールをカバーしきれず、幅広い時間・空間スケールにわたる高分子のダイナミクスや構造を統一的にシミュレートすることは極めて困難である。幅広いスケールのシミュレーションを行うために、近年では効率的なメソスケールシミュレーション手法やマルチスケールシミュレーション手法が盛んに研究されている。

大規模マルチスケールシミュレーションや種々のシミュレーション手法の妥当性の検証を行うには統計的に十分な量のデータを扱えるだけの計算を行う必要がある。スーパーコンピュータや GPGPU によって可能となる大規模計算・高速計算は、メソスケール粗視化高分子モデルのミクロスケールのモデルとの関係性の解明やマクロスケールのモデルへの接続を行う上で有用となるものと期待される。本講演では、高分子からみあい系でこれまで提案されてきたシミュレーションモデルおよび現在我々が取り組んでいるからみあった高分子のマルチスケールシミュレーション手法 (ミクロスケールの分子動力学モデル [5] とメソスケールのプリミティブチェーンネットワークモデル [3] の接続) とマクロスケールの流体シミュレータへの組み込みに向けた GPGPU を用いた高速メソスケール応力シミュレータの開発について報告する。

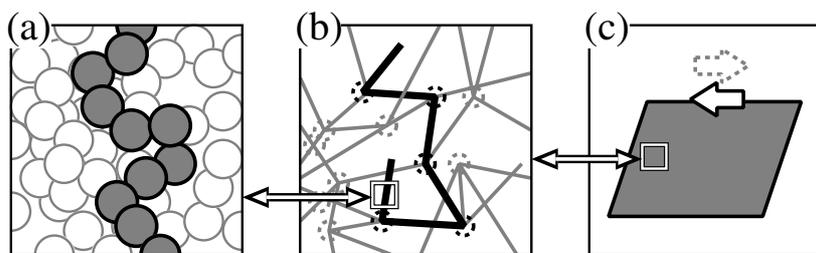


Figure 1: からみあった高分子系のモデルの概念図。(a) ミクロスケールの分子動力学モデル、(b) メソスケールのスリップリンクモデル、(c) マクロスケールの流体 (連続体) モデル。それぞれ特徴的時間・サイズや系の記述方法が大きく異なる。

文献

- [1] M. Doi and S. F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics* (Oxford University Press, Oxford, 1986).
- [2] C. C. Hua and J. D. Schieber, *J. Chem. Phys.* **109**, 10018 (1998).
- [3] Y. Masubuchi, J. Takimoto, K. Koyama, G. Ianniruberto, F. Greco, and G. Marrucci, *J. Chem. Phys.* **115**, 4387 (2001).
- [4] A. E. Likhtman, *Macromolecules* **38**, 6128 (2005).
- [5] K. Kremer and G. S. Grest, *J. Chem. Phys.* **92**, 5057 (1990).

電極界面における第一原理シミュレーション

産業技術総合研究所, 計算科学研究部門 大谷 実

我々のグループでは電極反応のダイナミクスを第一原理分子動力学計算を用いて明らかにする研究を行っている。講演では水の電気分解反応およびリチウムイオン 2 次電池の負極反応のシミュレーションを紹介する。

電極反応を理解することは、高効率でクリーンなエネルギー源と期待されている燃料電池や 2 次電池の研究開発に役立つという応用上の観点に加えて、基礎科学的にも重要である。電極反応は電子移動を伴う化学反応であり、金属電極上に広がった電子が溶媒中のイオンに移動する過程をどう理解するか、水の遅い緩和をどのように扱うか、電気二重層の記述はどうか等、量子力学的な記述が必要となるマイクロな領域から溶液論が必要となるマクロな領域まで広がりそれぞれがオーバーラップしている。

我々はこの複雑に絡み合った問題にここ数年来取り組んでいる。まず、反応の起こる舞台である電極と溶液の界面(固液界面)に電圧を印加し、第一原理分子動力学シミュレーションを行うことを可能にする手法(effective screening medium: ESM 法)を開発した[1]。ESM 法を用いる事により、最も基本的な電極反応である水の電気分解反応の一部のシミュレーションを行った。これにより、電圧が印加された固液界面における水の配向や構造が明らかになり[2-3]、ヒドロニウムイオンからプロトンが白金表面へ吸着するという水の電気分解の負極反応のシミュレーションにも成功した[4]。

講演ではこれらのシミュレーションに加えて、最近行っている二つのシミュレーションを紹介する。一つ目は水の上述の負極反応の対極である正極における反応である。正極反応は 4 電子反応であり負極より複雑であるが徐々に界面でのイオンの拡散の様子などが分かりつつある。二つ目はリチウムイオン 2 次電池の話題である。高容量化を目指した新しい Si 負極と有機溶媒界面におけるシミュレーションを紹介する。

[1] M. Otani and O. Sugino, Phys. Rev. B **73**, 115407 (2006).

[2] O. Sugino, et al, Surf. Sci. **601**, 5237 (2007).

[3] M. Otani, et al, Phys. Chem. Chem. Phys. **10**, 3609 (2008).

[4] M. Otani, et al, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 024802 (2008).

遮蔽 KKR 法の開発と電子状態／伝導率計算への応用

阪大院理¹、パナソニック先端研² 小倉昌子¹、永田徹哉¹、赤井久純¹、四橋聡史²

近年大規模な系を実用的な時間で計算するために様々な $O(N)$ 第一原理電子状態計算手法の開発が進んでいる。本講演で紹介する遮蔽 KKR 法 (screened KKR 法) [1] もそのひとつである。遮蔽 KKR 法は以下のような考えに基づいている。

KKR グリーン関数法では散乱理論に基づいて有効ポテンシャル系でのグリーン関数を計算し、電子状態を求める。通常は参照系として自由空間でのグリーン関数を計算し、ポテンシャルが与えられたときにどのような散乱が加わるかを考えることによって、求めたいポテンシャル系でのグリーン関数を計算する。このとき KKR 行列の逆行列を計算する過程で $O(N^3)$ の計算時間を要する。

参照系は自由空間である必要はなく、任意に選ぶことができる。遮蔽 KKR 法では自由空間の代わりに一定の高さを持った斥力ポテンシャルの並んだ系を用いる。このような斥力ポテンシャル系のグリーン関数は通常電子状態を計算するエネルギー範囲において距離に対して指数関数的に減衰する。ここで 1 次元方向に積み重なったスラブ構造を考えると、KKR 行列がブロック三線対角行列の形を取る。このような行列の逆行列の対角成分を求めることは $O(N)$ の計算時間で実行できる。この手法はアルゴリズムによって $O(N)$ 計算を実現しているので、金属、絶縁体を問わず様々な系に用いることができるという利点がある。

一方で、現在 KKR-CPA 法と久保公式を組み合わせた輸送現象の計算が進んでいる [2]。電子状態を求めるためには KKR 行列の逆行列の対角成分のみが必要なものに対して、輸送現象の計算では全成分の値が必要となる。遮蔽 KKR 法を用いれば、全成分を計算するのも $O(N^2)$ の時間で実行できる。

本講演では遮蔽 KKR 法について解説し、遮蔽 KKR 法を用いた金属／半導体界面の電子状態や GMR 構造の電子状態、電気伝導などについて紹介する。

文献

[1] R. Zeller, P. H. Dederichs, B. Újfalussy, et al.; Phys. Rev. B **52**, 8807 (1995).

[2] W. H. Butler; Phys. Rev. B **31**, 3260 (1985).

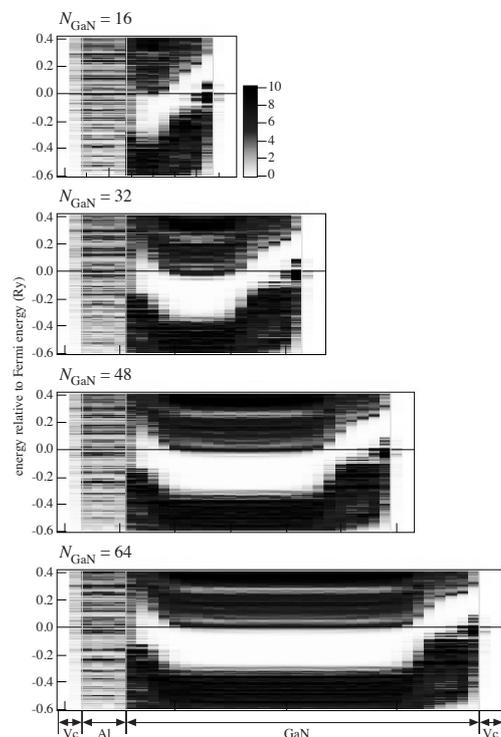


図 1 : Al/n-type GaN の状態密度

GPGPU は「次世代スパコン」の敵か味方か

理研基幹研、飯高敏晃

パソコンやゲーム機に使われる画像処理用素子(GPU; Graphics Processing Unit)を汎用計算に使おうという試み(GPGPU; General Purpose computing on GPU)が注目を浴びている[1,2]。

本講演では、大規模計算に携わる物性研究者を対象に GPU による科学計算の基礎を紹介し、自らの研究において GPGPU とどう付き合えばよいか、GPGPU と「次世代スパコン」との関係とは何かを考える材料を提供する。一例として、 $O(N)$ 量子分子力学計算の GPU による加速[3]、および量子情報理論の概念 LOCC (Local Operation Classical Communication)の応用による $O(N)$ 量子分子力学計算の超並列実装法[4]について解説する。

文献

[1] Harvard-Riken Joint Symposium : Application of GPU Computation to Brain Science, Quantum Science, Astronomy, Fluid Dynamics and other sciences

<http://www.iitaka.org/hariken09.html>

[2] Heisenberg Machine,

<http://www.iitaka.org/gpgpu.html>

[3] T. Iitaka, "GPU-accelerated large-scale quantum molecular dynamics simulation of 3-dimensional C60 polymers".

<http://uk.arxiv.org/abs/0910.4497>

[4] 飯高敏晃、「量子分子動力学の並列 GPU 計算による高速化」、日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会、第8回研究会(2009年11月26日)。

http://www.cs.tsukuba.ac.jp/~sakurai/ag_workshop8.html

GPU を用いた N 体問題の加速

電通大¹、長崎大²、Bristol 大³、理研⁴、慶大⁵
成見哲¹、濱田剛²、横田理央³、似鳥啓吾⁴、坂牧隆司⁵

GPU は科学技術計算を加速するアクセラレータの一種として様々な分野で使用されるようになってきた。ここでは「分子動力学シミュレーション」「渦法による乱流計算」「重力多体シミュレーション」の三つの N 体問題に関し GPU で加速した例を述べる。

分子動力学シミュレーションに関しては、何十年も前からアクセラレータによる加速が行われてきた。中でも GRAPE プロジェクトによって GRAPE-2, MD-GRAPE, MDGRAPE-2, MDGRAPE-3 などの専用計算機が開発されてきた。しかし近年の ASIC (Application Specific Integrated Circuit) の開発費の高騰によりなかなか専用のプロセッサを開発するのが難しくなっている。一方 NVIDIA の CUDA が登場して以降、GPU での報告が多くなり並列化やフル GPU の例も増えている。我々は、分子動力学シミュレーションプログラムとして世界的に使われている CHARMM を GPU に移植し $O(N \log N)$ の PME (Particle Mesh Ewald) 法による計算を加速した。残念ながら他の報告に比べて高速という訳ではないが、GPU 一枚で 10 倍前後の加速が得られている。また、単精度だけでは十分な精度が得られない力の積算部分などには高速な擬似倍精度演算方式を開発した。

渦法による乱流計算では、FMM (Fast Multipole Method) を使った $O(N)$ の高速な手法を GPU に移植して加速した。粒子同士の相互作用だけでなく、multipole 同士の相互作用も GPU 上に実装することで効率を高めた。 10^7 要素を用いた一様等方性乱流の計算では、GPU 一枚で dual core CPU の 80 倍程度の加速、GPU を 256 枚使うことで更に 90 倍の加速、合計で 20Tflops の実効速度を達成した[1]。計算精度的にもこれまでのスペクトル法などと比較して遜色なく、従来の FFT を使う $O(N \log N)$ の手法よりも将来速くなる可能性を秘めている。

重力多体問題では、長崎大の 380 枚の GPU (プロセッサとしては 760 個) を使用し、 4.5×10^9 粒子を用いた宇宙の構造形成のシミュレーションを $O(N \log N)$ の Tree 法を用いて行い、158Tflops の速度を達成した[1]。これは換算方法によるが、少なくとも見積もっても 57Tflops 相当の計算速度に対応し、コストパフォーマンス部門でゴードンベル賞を受賞した。電力効率でも 2009 年 6 月時点の green500 リストの top よりも良い値を示した。

文献

[1] T. Hamada, R. Yokota, K. Nitadori, T. Narumi, K. Yasuoka, M. Taiji, K. Oguri, “42 TFlops Hierarchical N-body Simulations on GPUs with Applications in both Astrophysics and Turbulence”, In Proc. of SC09, Portland, USA, USB memory, (2009).

招待講演 2

2009 年 12 月 11 日 (金)

量子モンテカルロ法の大規模並列化

東大院工 藤堂眞治

一般に量子モンテカルロ法は、厳密対角化など他の手法と比較すると、少ないメモリ使用量でかなりの大規模な系を扱うことができる。一方、計算量に対する物理量の収束は遅い。そのため通常は、異なる乱数系列を用いた独立な計算を多数並列に行なうのが最適な戦略となる。しかしながら、系の緩和時間が非常に長い場合、あるいは1ノードのメモリに収まらない巨大な系のシミュレーションを行なう場合など、多くの困難な問題に対しては、非自明な並列化が必要となる。例として、光学格子中の冷却原子系の実験との直接比較、脱閉じ込め臨界現象の検証、長距離相互作用系における臨界現象、スピンと格子などの複合自由度系、フラストレーションやランダムネス、強い非等方性のある系などが挙げられる。本講演では、量子スピン系、格子ボゾン系に対するループアルゴリズム量子モンテカルロ法を中心に、我々の進めている大規模並列化について現状を報告する。特にMPIとOpenMPによるハイブリッド並列化や多レベル並列化など、次世代スーパーコンピュータの性能を十分に発揮し、上記の問題に取り組むための最近の試みについて詳しく紹介する。また、拡張アンサンブル法や向き付きループアルゴリズムなど様々なモンテカルロアルゴリズムの並列化における問題点や今後の方向性についても議論したい。

向き付きループアルゴリズムの改良と量子スピン系への適用

東大物性研 鈴木隆史、富田裕介、川島直輝

量子スピン系やボーズ系の格子モデルで実現する秩序相や相転移現象を議論する上で、経路積分表示にもとづく量子モンテカルロ法は非常に強力な数値的手法の一つである。その中で向き付きループアルゴリズムは、適用可能な系の数が多い汎用的なアルゴリズムの一つとして知られている[1]。しかし、非常に希薄なボーズ気体を扱う場合やハミルトニアン^oの対角項相互作用にフラストレーションを持つ場合には計算の効率が著しく低下する問題点がある。これまで我々は(1)の問題に対して効率よく計算できるよう本アルゴリズムを改良してきた[2,3]。今回(1)に加えて(2)の問題点に関して、長距離相互作用を持つ古典スピン系に対する計算で提案されているO(N)モンテカルロ法[4,5]で用いられたアイデアをもとにアルゴリズムの改良を行った。

本講演では向き付きループアルゴリズムにもとづく量子モンテカルロ法を用いて、シャストリーサザランド格子上 $S=1/2$ 反強磁性 Ising-like XXZ モデルの磁場中有限温度下の振る舞いについて調べた結果を紹介する。このモデルは希土類金属 TmB_4 の極低温領域における磁性を記述する有効モデルと考えられており、有効モデルハミルトニアンの非対角項が強磁性的である特徴を持つ。近年 TmB_4 に対する低温磁化過程に対する測定が行われ、飽和磁化の $1/2$ のところに大きな磁化プラトー領域を持つことが報告されている[6]。これまで、有効モデルに対する解析が行われたがこの $1/2$ 磁化プラトーの起源については明らかになっていない。 TmB_4 の磁性モーメント間の相互作用の起源として RKKY 相互作用が予想されており、長距離相互作用がその磁性を支配すると予想される。このような背景から我々は、上記の有効モデルが長距離相互作用を持つ場合の磁気的性質について調べた。その結果、弱い第3近接、第4近接相互作用を考慮すると $1/2$ 磁化プラトー状態が安定化することがわかった。また $1/2$ 磁化プラトー状態への有限温度転移は2回の2次転移が逐次的に起こり、中間相はスピンの partial disorder 相になっていることがわかった[7]。

文献

- [1] O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **66**, 046701 (2002).
- [2] Y. Kato, T. Suzuki, N. Kawashima, Phys. Rev. E **75**, 066703 (2007).
- [3] Y. Kato and N. Kawashima, Phys. Rev. E **79**, 021104 (2009).
- [4] K. Fukui and S. Todo, J. Comp. Phys. **228**, 2629 (2009).
- [5] Private communication with H. Suwa and S. Todo.
- [6] Siemensmeyer, et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 177201 (2009).
- [7] T. Suzuki, Y. Tomita, and N. Kawashima, Phys. Rev. B **80**, 180405(R) (2009).

双極子相互作用系のモンテカルロシミュレーション

東大物性研 富田裕介

双極子相互作用は電気・磁気を問わず分極した物質中では必ず存在する相互作用である。しかしながらモンテカルロシミュレーションにおいて双極子相互作用が主要な相互作用として扱われることはこれまでほとんどなかった。その理由として、双極子相互作用が交換相互作用などの他の相互作用に比べて非常に小さいことや、近接相互作用系の計算が $O(N)$ の計算量で行われるのに対し、双極子相互作用系では $O(N^2)$ に比例することなどが挙げられる。

これまで影響が小さいと考えられてきた双極子相互作用だが、近年の実験技術の進展により、分子磁性体、極低温原子ガス、スピナイス物質など双極子相互作用が主要な役割を果たす系が次々と見出されて来ている。

また数値計算上の困難は、福井・藤堂による $O(N)$ モンテカルロ法の開発 [1] により、これまで $O(N^2)$ 必要だった計算量が $O(N)$ で計算することが可能となっており、実験だけでなく数値計算の面においても双極子相互作用系を調べる環境が整いつつある。

そこで今回は $O(N)$ モンテカルロ法を用いて、双極子相互作用のみが働いているいくつかの2次元格子についてその臨界現象について調べた。双極子相互作用は格子の幾何学的形状に依存する相互作用であるため、低温で格子に依存した秩序相を形成するが、その臨界現象についても格子に依存することを確認した [2]。

また応用としてリラクサー強誘電体のモデルを構築し、双極子相互作用系におけるランダムネスの影響についての研究を行った。リラクサーは数万におよぶ巨大な誘電率と 100°C に及ぶ誘電率のピークを持つため、安定した誘電素子として近年注目を集めている誘電体である。 ABO_3 型ペロフスカイト構造を持つリラクサーでは、熱処理によりBサイトのランダムネスを制御できることがあり、Bサイトのイオンが規則的な試料では通常の誘電性を示し、不規則な試料ではリラクサー的な強誘電性を示すことからBサイトのランダムネスとリラクサー特性の発現は強い相関を持っていると考えられている。今回我々は、リラクサー $\text{Pb}(\text{In}_{1/2}\text{Nb}_{1/2})\text{O}_3$ を記述するモデルを構築しそのシミュレーションを行い、実験をよく再現する結果を得た [3]。

本講演では、双極子相互作用系として2次元双極子格子における新奇な相転移と、ミニマムモデルを用いたリラクサー強誘電体のシミュレーションについて発表を行う。

[1] K. Fukui and S. Todo: J. Comput. Phys. **228** (2009) 2629.

[2] Y. Tomita: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 114004.

[3] Y. Tomita, T. Kato and K. Hirota: arXiv:0911.1839.

実空間密度汎関数法コード (RSDFT) の開発と応用

筑波大数理物質、計科セ 岩田潤一

密度汎関数法に基づく物性第一原理計算は、局所密度近似あるいは一般化勾配近似というシンプルな近似を採用することで、比較的少ない計算量で交換相関効果を取り込んだ、そこそこ定量性のある物性予測・物性解明を可能にし、現在では物性物理で使われるのみならず、半導体デバイスや様々な材料開発の現場においても、第一原理計算から得られる知見を設計指針として採用するという事が増えている。ところで、そのような第一原理計算による知見は、通常は数百原子程度の比較的小さなモデルに対する計算結果に物理的考察を交えて導かれるものであり、より現実に近いモデル、すなわちより大きいモデルを用いた計算によって、「結果が定量的に変わる」、「物性発現のメカニズムとされていた筋書きが変わる」、「予想外の現象が起こる」、というような可能性を常に孕んでいる。

そこで、より現実的なモデルを構築し、より精度の高い物性予測を行うためには、現実の複雑な状況を十分取り込めるような大きな原子モデルを扱える大規模第一原理計算手法が必要となる。我々はこれまで、今後ますます広がるであろう超並列計算機の積極利用を念頭において、実空間差分法[1]に基づく大規模第一原理電子状態計算コード - RSDFT - の開発を行ってきた[2]。理論的には従来法と同じ $O(N^3)$ のKohn-Sham理論に基づいており、これによって、波動関数を見るなど、現状と全く同じ解析が可能となる。また大規模計算の実現を、計算機工学あるいは情報工学の研究者との共同研究によって、数値計算技術やアルゴリズムの改良のみによって行っているため、RSDFTの開発で培われた技術は他の第一原理計算手法に応用することが期待できる。

RSDFT を用いて、これまで 1000 Si 原子系の構造最適化[3]、10,000 原子を越える Si ナノドットおよび Si ナノワイヤの電子状態計算[2]を達成している。本講演では、これまで開発を行ってきた RSDFT の中身と、RSDFT を用いたいくつかの Si ナノ構造に対する応用計算についてお話する。また、RSDFT の次世代スーパーコンピュータへの展開を目指して現在進めているさらなるコードの改良等についても可能な限りご紹介したい。

文献

[1] J. R. Chelikowsky, *et al.*; Phys. Rev. B **50**, 11355 (1994).

[2] J.-I. Iwata, *et al.*; J. Comp. Phys., accepted.

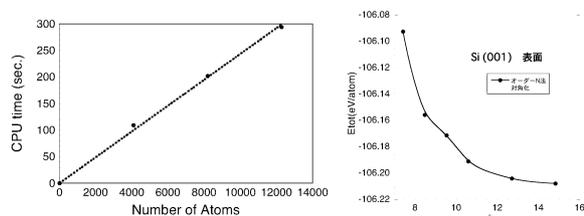
[3] J.-I. Iwata, *et al.*; Phys. Rev. B **77**, 115208 (2008).

オーダーN 法第一原理計算プログラム CONQUEST の開発と応用計算

物質・材料研究機構¹、University College London²

宮崎 剛¹、D. R. Bowler²、M. J. Gillan²

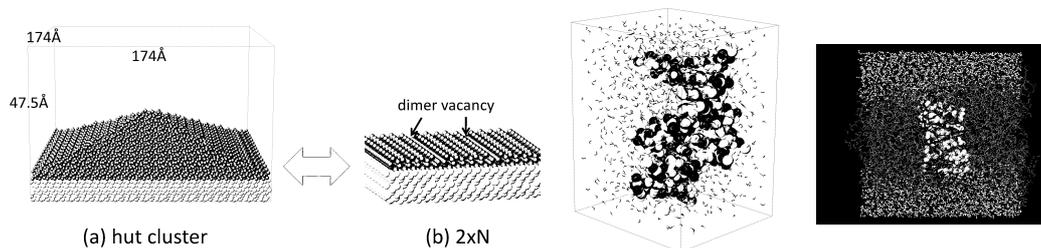
我々が開発してきたオーダーN 法第一原理計算プログラム CONQUEST は、計算に必要なメモリ量、演算量が系の原子数 N に比例し（下図左）、超大規模系に対する第一原理シミュレーションの実現を可能とする。CONQUESTは、オーダーN法を実現する為に密度行列最適化手法を用いている。この手法は変分法であり、密度行列の切断半径によって計算精度を制御でき（下図右）、全エネルギーや力の計算が安定して行えるという利点を持つ。また CONQUESTは、i) 並列化効率が高いこと、ii) 局在基底として2種類の基底を準備している事、iii) 精度の異なった第一原理手法を選択できる事などの特長を持ち、実際の興味深い系に対する応用計算を可能としている。



本講演では、プログラムの計算手法の概要、実際の効率などを最初に説明する。その後、CONQUESTを用いた研究例として、半導体ナノ表面構造と生体系に対する計算（下図）を紹介する。前者では、

Si (001) 表面上にヘテロエピタキシー成長したGeの3次元島構造に対して、2万原子を越える系の第一原理計算構造最適化に我々は成功している[1]。後者に対しては、密度行列最適化手法が、水溶液中の DNA の系に対して極めて高い精度を持つ事を我々は示している[2,3]。DNA以外の生体系に対する計算例も含めて簡単に紹介する。また、今後のさらなる大規模系への理論研究などを実現する為に、現在行っているプログラム開発と今後の計画についても議論する。

本研究は、A. S. Torralba, M. Todorovic, 大野隆央、大塚教雄、V. Brazdova との共同研究で行われている。



[1] T. Miyazaki, D. R. Bowler, M. J. Gillan, T. Ohno: J. Phys. Soc. Jpn. 77, 123706 (2008).

[2] T. Otsuka, T. Miyazaki, T. Ohno, D. R. Bowler, M. J. Gillan: J. Phys. : Condens. Matter 20, 294201 (2008).

[3] 宮崎剛、大塚教雄: 固体物理(特集号「生物物質科学」) Vol. 43, p. 489 (2008).

ナノスケール電子輸送現象の第一原理計算

阪大工、小野倫也

半導体デバイスや光通信デバイスの微細化や高機能化にともない、デバイスを構成する素子がナノメートルのサイズに近づきつつある。次世代のナノデバイスの候補として、フラーレンやナノチューブを用いた分子デバイス、現在のシリコン系トランジスタをさらに微細化したデバイスやゲルマニウム系の半導体を用いたデバイスなどが提案されている。このようなサイズの素子を持ったデバイスを作製するには、原子・分子の一つひとつの性質に加え、組織化されたナノ構造体の性質までを明らかにし、得られた知見をもとにしてデバイスの設計を行わなければならない。ところが、原子・分子レベルの物理・化学現象は実験方法や実験条件に左右されることが多いため、正確な物理・化学現象解明のためには、実験による解析に加えて理論計算による解析も必要である。

このような背景から、これまでに電子輸送特性を量子力学の第一原理に基づいて高速かつ高精度に計算する計算手法が数々提案されてきた。我々のグループでも、**Overbridging boundary-matching(OBM)**法[1]と呼ばれる散乱波を直接計算することにより輸送特性を求める方法を開発した。この方法は、全ての計算を波数空間ではなく実空間で行うスキームになっており、この計算手法に基づいて開発された第一原理計算コードは、従来の計算手法に比べてCPU間でのデータ転送をほとんど必要としない。そのため、次世代の超並列計算機を用いた高速計算に適したアルゴリズムになっている。近年の計算機の発達にともない、100原子を超える系に対して第一原理に基づいた電子輸送計算も可能になっている。本講演では、この計算手法と最近のアプリケーションの紹介を行う。たとえば、フラーレン分子架橋の電子輸送特性[2]、金の **Break Junction(BJ)**だけでなく白金やイリジウムの **BJ**を引き延ばして行ったときに見られるコンダクタンストレースの振動の解析[3]、**Si/SiO₂**ゲートスタック構造の界面欠陥とリーク電流の相関[4]について紹介する。

また、最後に前述の電子輸送特性計算手法に加え、本研究グループで開発している新しい輸送特性計算手法の紹介を行う。本講演で紹介した計算手法が確立できれば、次世代の計算機を用いて、電子デバイスの機能評価やデザインにおける強力なツールに発展するものと期待している。

文献

- [1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: *First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures* (Imperial College Press, London, 2005).
- [2] T. Ono and K. Hirose: *Phys. Rev. Lett.* **98** 026804 (2007).
- [3] T. Ono: *J. Phys. Chem. C* **133** 6256 (2009).
- [4] T. Ono: *Phys. Rev. B* **79** 195326 (2009).

光と物質の相互作用に対する実時間第一原理計算

筑波大計算科学研究センター 矢花一浩

時間依存密度汎関数理論による電子ダイナミクス計算の現状と、大規模計算の展望について紹介したい。

時間依存密度汎関数理論は、電子基底状態に限られていた密度汎関数理論を励起状態や電子ダイナミクスに拡張する枠組みとして、最近10年の間に長足の進歩を遂げた。我々が開発している実時間・実空間計算法では、基底状態計算が $O(N^3)$ であるのに対して電子ダイナミクス計算は軌道関数の直交化を要しないことから $O(N^2)$ のスケーリングを示し、大規模計算に向けた方法となっている。一方、同じサイズの物質を考えると、基底状態計算に比べて2桁程度余計に計算時間を要することから、現時点で計算可能な物質のサイズは数百原子程度の物質に限られている。現時点では、線形光応答に対しては様々なサイズの分子の光吸収スペクトルを高い精度で記述することが可能であり、さらに強レーザー場や超高速パルス光など、レーザー科学のフロンティアで問題となるフェムト秒からアト秒スケールのダイナミクスに対する研究が展開している。

今後の計算機の高速化による展望として、まずは現時点では単純な分子や結晶に限られている3次元的な電子ダイナミクス計算を、より複雑な物質に拡張することが挙げられる。また、核と電子のダイナミクスを同時に解き進めるシミュレーション法、緩和や電子衝突を考慮した電子ダイナミクス計算などでは、現時点での時間依存 Kohn-Sham 方程式に基づくスキームには限界があると思われるため、計算機能力の発展を念頭におきつつ新たな理論構築を行う必要があると考えている。

低温領域に対応した有限温度密度行列繰り込み群法の開発とその応用

京大基研 曾田繁利、遠山貴己

密度行列繰り込み群(DMRG)法[1]は、低次元強相関電子系に対して非常に効果的な計算手法の一つである。このDMRG法は、数値繰り込み群法の一つであり、系は環境との量子ゆらぎの効果を考慮されつつDMRG法の手順に従って拡張される。ただし、系はその大きさにかわらず任意の次元で表現される。これは、まずDMRG法のターゲット状態から作られる密度行列を対角化し、その固有値の大きなものから順に任意の数だけ選ぶ。そして、この固有値に対応する固有状態による系の表現を得ることで実行される。このDMRG法のターゲット状態は、例えば絶対零度の場合には基底状態である。そこで、本手法[2]ではこの手法の有限温度への素直な拡張としてボルツマン分布に従ったターゲット状態

$$|\tilde{\xi}\rangle \equiv e^{-\beta\hat{H}/2} |\xi\rangle = \sum_n e^{-\beta\epsilon_n/2} a_n |n\rangle$$

を採用する。ここで ϵ_n はハミルトニアン \hat{H} の n 番目の固有値で、 $|n\rangle$ は対応する固有状態、 β は逆温度、また $|\xi\rangle$ は任意の状態、 a_n は $|n\rangle$ による $|\xi\rangle$ の展開の係数である。このターゲット状態は、全ての a_n について $a_n^2=1$ を満たす場合、その内積が分配関数を与える。したがって、有限温度の計算に対するターゲット状態として適当なものであると考えられる。しかしながら、このターゲット状態は全ての固有状態を必要とする。そこで本手法では直交多項式展開法[3]を用いてこのターゲット状態を直接算出する。ただしここで用いられる直交多項式展開法はこの手法で問題となるギブス振動に対する処理を行った方法である。

本手法では、物理量の期待値を $|\tilde{\xi}\rangle$ から計算する。ただし、分配関数を得るためには、全ての a_n について $a_n^2=1$ を満たさなければならない。さらに、ハミルトニアンと非可換な物理量について $|\tilde{\xi}\rangle$ で期待値をとると非対角項が現れる。そこで本手法では、任意の状態 $|\xi\rangle$ を乱数で与え、それにより得られた $|\tilde{\xi}\rangle$ による期待値のサンプルを採る。この処理は、 $a_n^2=1$ と非対角項を打ち消す効果を生み出す。したがって、 $|\tilde{\xi}\rangle$ から物理量の期待値の算出が可能となる。さらに、本手法は、基底状態に対するDMRG法の簡便な拡張であり、動的DMRG法への拡張も、基底状態に対するDMRG法と同様のアルゴリズムで拡張される。

本手法は、低温側で効果的な適用が可能な有限温度密度行列繰り込み群法である。これは、これまでの有限温度密度行列繰り込み群法が低温で計算が難しくなる傾向があったことに対して大きな特徴であると言える。さらに長距離相互作用が含まれる系など、これまでの有限温度密度行列繰り込み群法で取り扱いが難しかった系についても取り扱いが可能であることから、様々な低次元強相関電子系における問題に適用されることが期待される。本研究発表では、この手法の応用例として、spin-1/2 zigzag XY model のスピンベクトルカイラリティに対する計算結果を示し、本手法について議論する。

[1] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).

[2] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **78**, 113101 (2008).

[3] S. Sota and M. Itoh, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 054004 (2007).

エンタングルメント繰り込みテンソルネットワークを用いた フラストレートした量子スピン系の計算手法

京大情報¹, 東大物性研² 原田健自¹, 川島直輝²

フラストレーションのある量子多体系は、一般に平均場を超える解析的アプローチが困難であるだけでなく、計算物理的な観点からも見ても、既存の数値的手法を寄せ付けない。この事がフラストレーションのある量子多体系の理論的な解明を妨げている。例えば、強力な数値的手法である量子モンテカルロ法を適用しても、サンプリング確率が負になる事による桁落ちによって精度の高い結果を示す事は難しい(負符号問題)。このような問題を克服するために様々な新しい試みが行われてきたが未だに解決されていない。

我々は、フラストレーションのある量子多体系の為の数値的手法に、量子情報の分野における最新の研究成果、特に、Vidalが提案した**テンソルネットワーク上のエンタングルメント繰り込み**というアイデア [1] を導入した [2]。

テンソルネットワークは、構造をもった波動関数の性質を一般的に議論するための理論的な道具であり、量子情報の分野でよく用いられる。各サイトの基底を固定すると、実空間波動関数 $\Psi(i_1, \dots, i_n)$ は各サイトの状態を表す添字 $\{i_1, \dots, i_n\}$ をもつテンソル $T_{i_1 \dots i_n}$ (図1中央) と見なす事ができる。テンソルネットワークとは、このテンソル T を小さな部分テンソルの集合 $\{T^\alpha\}$ のテンソル積により導出される合成テンソルに置き換えた物であり、特定の構造をもった波動関数のクラスを表す。そして、テンソル積をとる部分テンソルの添字(足)同士を線で結ぶ事で視覚的に表現する事ができる: 例えば、図1(a)は密度行列繰り込み群法(DMRG)、図1(b)は数値実空間繰り込み群法の変分波動関数に対応するテンソルネットワークを表した物である。

Vidalの提案したエンタングルメント繰り込みとは、“**局所的なエンタングルメントを弱めて行う実空間繰り込み**”の事であり、このエンタングルメント繰り込みを全てのスケールに適用したテンソルネットワーク(図1(c))が量子多体系の量子状態を効率よく表現できるという仮説“Multi-scale entanglement renormalization ansatz”(MERA)が提案されている。

我々は、このようなエンタングルメントを考慮したテンソルネットワークを用いた量子状態の記述をベースに、量子多体系の新しい計算方法の探求に取り組んでいる。本報告では、我々が提案する三角格子に適したテンソルネットワークを用いた三角格子上的 $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグモデルの基底状態計算について報告する [2](特に計算量についても詳しく述べる)。

MERA テンソルネットワークを用いた数値計算では部分テンソルの足のインデックスのサイズ m に対してベキ的に増加する計算量が生ずる。我々のテンソルネットワークでは三角格子で $O(m^{14})$ にまで計算量を低減する事ができるが現在の計算環境では m を大きくする事は容易ではない。講演では次世代スパコンも視野に入れた今後の展開についても触れる予定である。

文献

[1] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **101**, 110501 (2008).

[2] 日本物理学会 年次大会 (2009年3月, 講演番号 30pTJ-10), 秋季大会 (2009年9月, 講演番号 26QK-8).

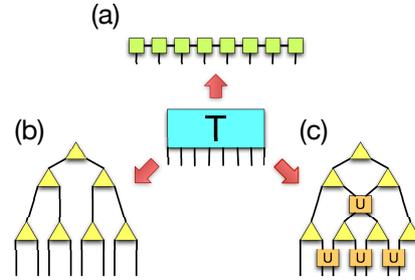


図 1: 8 サイト系の波動関数を表すテンソルネットワーク例。

ポスターセッション

2009年12月10日(木)

カゴメ格子反強磁性体の磁化過程の数値対角化による研究

兵庫県立大物質理¹、原子力機構 Spring-8² 中野博生¹、坂井徹^{1,2}

磁氣的にフラストレーションを有するカゴメ格子反強磁性体は、計算科学的手法を用いても計算が困難な系で、その性質についての十分な理解には至っていない。磁化過程についても、最近報告されている実験結果には、これまで報告されている数値対角化の研究成果からは解明されていない振舞いが見られる。

本研究では、これまでの数値対角化の結果の再検討を行い、実験と理論計算の食い違いについて議論する。とくに今回は、これまでの理論予測では、その存在が確実視されてきた、カゴメ格子の3分の1磁化プラトー[1, 2]に焦点を絞り、36スピンのクラスターまでの数値対角化と有限サイズスケールングによる解析により、わかってきた新たな事実[3]について報告する。

文献

- [1] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 3673.
- [2] A. Honecker et al. J. Phys. : Condens. Matter 16 (2004) S749.
- [3] 中野、坂井：日本物理学会 2009年秋季大会、熊本大

熱ゆらぎ・量子ゆらぎ同時制御型量子アニーリング法の開発

東大物性研¹、東大院情報理工²、Google³、
東大情報基盤センター⁴、東大院理⁵、CREST-JST⁶
田中宗¹、佐藤一誠²、栗原賢一³、中川裕志⁴、宮下精二^{5,6}

数値計算物理の一つの中心課題として、与えられた系の平衡状態の性質を調べる、という問題がある。しかし系が与えられたからといって、必ずしも平衡状態を容易に得られるわけではない。例えばランダム系やフラストレーションのある系など複雑な系では、平衡状態になかなか到達しないという問題（遅い緩和現象）がしばしば生じる[1,2]。そこで熱揺らぎを巧みに制御することにより平衡状態を得る方法として、シミュレーテッド・アニーリングと呼ばれる手法[3]、及び交換モンテカルロ法[4]と呼ばれる手法が開発され、幅広い分野において用いられている。熱揺らぎの代わりに量子揺らぎを導入することにより系の安定状態を得る方法として、量子アニーリング法と呼ばれる手法が開発された[5]。量子アニーリング法は、量子モンテカルロ法、厳密対角化による実時間発展追跡、あるいは実験的に実装することが可能であり、新しい最適化問題へのアプローチ方法として近年非常に期待されている方法である[6,7,8]。我々はクラスタ分析と呼ばれる、安定状態を求めることが非常に難しい情報工学の問題について、量子アニーリング法の有用性を示した[9,10]。また変分ベイズ推定法について、量子アニーリング法を組み合わせた新しい手法を開発し、情報工学における困難な問題に対し、量子アニーリング法の有用性を示した[11]。

文献

- [1] 田中宗、轟木義一、熱測定、**36** 91 (2009)
- [2] S. Tanaka and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **78** 084002 (2009).
- [3] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, Jr., and M. P. Vecchi, Science, **220** 671 (1983).
- [4] K. Hukushima and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn. **65** 1604 (1996).
- [5] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E. **58** 5355 (1998).
- [6] S. Tanaka and S. Miyashita, J. Magn. Magn. Mater. **310** e468 (2007).
- [7] S. Miyashita, S. Tanaka, H. de Raedt and B. Barbara, J. Phys. Conf. Ser. **143** 012005 (2009).
- [8] S. Tanaka, M. Hirano and S. Miyashita, to appear in Lecture Note in Physics (Springer) "Quantum quenching, annealing, and computation".
- [9] K. Kurihara, S. Tanaka and S. Miyashita, Proceedings of The 25th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, (2009), arXiv:0905.3527.
- [10] 田中宗、栗原賢一、宮下精二、科研費特定領域研究「情報統計力学の深化と展開」研究会「情報統計力学の広がり：量子・画像・そして展開」講演概要集 (2009).
- [11] I. Sato, K. Kurihara, S. Tanaka, H. Nakagawa and S. Miyashita, Proceedings of The 25th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, (2009), arXiv:0905.3528.

分離固定点からのクロスオーバーであられる一次相転移

東大物性研¹、LANL² 紙屋佳知¹、川島直輝¹、Cristian D. Batista²

面間フラストレーションをもつ3次元XYモデルの相転移は

$$H_{LGW} = \int \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi_A \cdot \partial_\mu \phi_A + \partial_\mu \phi_B \cdot \partial_\mu \phi_B) + t(|\phi_A|^2 + |\phi_B|^2) + u(|\phi_A|^4 + |\phi_B|^4) + \lambda(\phi_A \cdot \phi_B)^2 + g|\phi_A|^2 |\phi_B|^2 \right]$$

という Landau-Ginzburg-Wilson (LGW)モデルで記述されると考えられる。これまでの数値計算によって u 軸上 ($\lambda = g = 0$) の「分離固定点」の臨界指数が確認されているが、一方スケールリング解析によりこの固定点は不安定であることがわかっている[1]。これは転移点の最近傍でクロスオーバーがあらわれるはずであるということの意味している。しかし、このクロスオーバーによって分離固定点からどのような相転移現象に移り変わるのかは未解明であった。

今回我々は、この LGW モデルに帰着する別のスピン系として

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i^A \cdot \mathbf{S}_j^A + \mathbf{S}_i^B \cdot \mathbf{S}_j^B) - \lambda J \sum_i (\mathbf{S}_i^A \cdot \mathbf{S}_i^B)^2$$

というモデルを考えた。そしてその性質をクラスターアルゴリズムのモンテカルロ法によって調べた。その結果、1) λ の大きい領域において一次相転移を意味するエネルギーヒストグラムのダブルピーク構造が確認された。さらに、2) λ の小さい領域では転移が見かけ上連続的になるものの、無次元スケールリング変数のモンテカルロくり込み群の流れには固定点がないことが分かった。流れは一次転移が直接観測可能な λ の大きい領域へ系統的に向かっている。このような流れの構造は、すべての有限の λ において相転移が一次であることを示唆している。

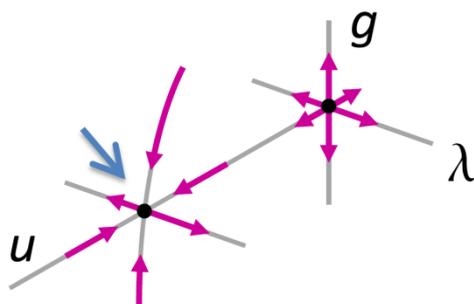


図: 有効ハミルトニアン分離固定点 (矢印) 付近のくり込み群の流れの概念図。 λ が小さい系の転移点から少し離れたところでは分離固定点のスケールリング則が観測されるが、さらに近づくと一次転移が起こる。

文献

[1] Y. K., N. Kawashima, and C. D. Batista; J. Phys. Soc. Jpn., **78**, 094008 (2009).

[1] Y. K., N. Kawashima, and C. D. Batista; unpublished.

パイロクロア格子上的二重交換モデルに対するモンテカルロ法による研究

東大院工¹、青学大理工²、ERATO-MF³ 求 幸年¹、古川 信夫^{2,3}

近年、遷移金属化合物や分子性導体などの広い物質群を対象にした精力的な研究を通じて、伝導電子を含む強相関電子系におけるフラストレーションの効果が注目を集めている。強相関電子系では、電子のもつスピンと電荷の自由度の間の強い結合を通じてフラストレーションが磁性と伝導性の両方に影響を及ぼし、非自明な磁気秩序や金属絶縁体転移、超伝導や異常磁気伝導現象などの興味深い現象が期待される。スピンと電荷の自由度の絡み合いを通じてどのようにフラストレーションの効果が発現するのか、特にフラストレーションの下での強い揺らぎがどのような競合や協調現象を引き起こすのかは、未解明で興味深い問題である。

本研究では、こうしたフラストレーション系におけるスピンと電荷の自由度の絡み合いの効果を明らかにする目的で、両自由度の結合を記述する強相関モデルのひとつである二重交換モデルをとりあげ、強いフラストレーションをもつ3次元パイロクロア格子上で、その性質を主にモンテカルロ法を用いた数値計算により調べた。伝導電子系において特に問題となる、波数の離散性に起因した有限サイズ効果を抑えるために、ひねった境界条件に関する平均をとるシミュレーションを行った。その結果、伝導電子と局在スピンの間に働くフント結合から生じる強磁性的な二重交換相互作用と、局在スピン間に働く反強磁性的な超交換相互作用の拮抗により、興味深い相変化とそれに伴う異常な磁気伝導現象を見出した。具体的には、反強磁性的な超交換相互作用を強くするにしたがって、強磁性金属相が徐々に不安定化し、反強磁性的な短距離相関を伴った常磁性金属相にとって変わられ、その際低温で、強磁性金属相と常磁性金属相の間の相分離状態が発現することを見出した。強磁性金属転移温度がゼロに近づく臨界領域では、磁性、伝導性ともに温度にほとんど依らない振る舞いを示すことが明らかとなった。そこでは強いスピン揺らぎが低温まで残ることから、残留エントロピーによる重い電子的な挙動や非フェルミ流体的な挙動が期待される。これらの振る舞いは、マンガン酸化物系を対象としたフラストレーションがない場合において得られていた結果とは全く異なるものである。発表では、これらの結果と、パイロクロア酸化物 $R_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ が圧力下で示す興味深い現象[1]との関連も議論する。

[1] S. Iguchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 136407 (2009).

カウンターOVモデルのレーン形成とその不安定性

京大基研 池田昌浩、早川尚男

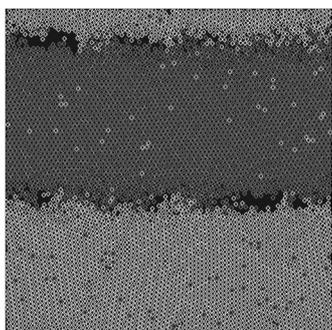
互いに対面する二方向の流れが共存するとき、同じ方向に流れるもの同士が進行方向に列を作るレーン形成という現象が知られている。この現象は歩行者の流れや電荷を帯びたコロイドの運動などで見ることができる。[1]

ところが、駆動力に対して垂直な成分の散逸がないカウンターOVモデルでは、対向する駆動力があるにもかかわらず安定したレーンは形成されず不安定な動きを見せる。

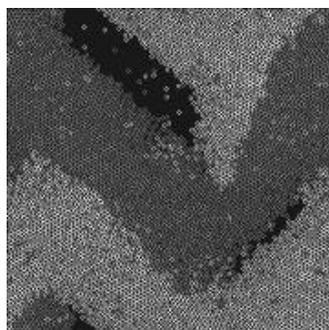
我々は Lennard-Jones 系の粒子を 2 グループに分け、対向した最適速度に緩和するような駆動力を加えたモデルで分子動力学シミュレーションを行った。散逸については、等方的な散逸を持つ場合から駆動力に垂直な散逸が無い場合まで、駆動力に垂直な散逸の大きさを变化させた。

その結果、等方的に散逸がある場合には定常的なレーンを見せるが[図1]、駆動力に垂直な散逸を減らしていくとレーン界面のゆらぎに対して不安定になり間欠的なレーンの崩壊が見られ[図2]、さらに駆動力に垂直な散逸を減らしていくと、もはやレーンは形成されず不安定な動きを見せる[図3]ことが分かった。

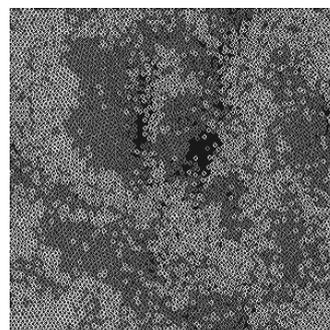
また、この様子は周期境界条件のサイズを変えても見られることを示し、さらに、L-J ポテンシャルと違って引力の効果がない Weeks-Chandler-Andersen(WCA) ポテンシャル[2]を用いたシミュレーションとの比較も行う。



[図1]
等方的に散逸がある場合、
駆動力の向き（横向き）に
レーンが形成されている。



[図2]
駆動力に平行な成分の散逸
に対して駆動力に垂直な成
分の散逸が 40%の大きさ場
合における、レーンが崩壊
する様子。



[図3]
駆動力に垂直な成分に散逸
がない場合、レーンは形成
されず、不安定な動きを見
せる

文献

[1] J. Dzubiella, G. P. Hoffmann, and H. Löwen, Phys. Rev. E 65, 021402 (2002).

[2] John D. Weeks, David Chandler, and Hans C. Andersen, J. Chem. Phys. 54, 5237 (1971)

カゴメ格子上ハバードモデルにおける重い電子状態の数値的研究

東大院工 宇田川 将文、求 幸年

近年、 LiV_2O_4 、 $(\text{Y}_x\text{Sc}_{1-x})\text{Mn}_2$ 、 $\beta\text{-Mn}$ などの遷移金属化合物が示す重い電子挙動に大きな関心が寄せられている。典型的な重い電子系である希土類化合物と異なり、局在スピンのようなエントロピーの担い手をあらわには持たない遷移金属化合物が重い電子挙動を示す理由についてはいくつかの理論的提案がなされているものの、完全な理解には至っていない。このような挙動には強い電子相関、軌道縮退、幾何学的フラストレーションといった物性物理における重要な課題が深く関係しており、その本質を捉える上で何らかの単純化されたモデルに基づいた解析が有効と考えられる。我々はそれらの要素のうち、幾何学的フラストレーションに注目し、その役割を調べる目的で、カゴメ格子上ハバードモデルのハーフフィリングの状態について、クラスター動的平均場理論を適用し、不純物ソルバーとして、連続時間量子モンテカルロ法を用いた解析を行った。とりわけ、不純物クラスターサイトにおける密度行列を詳しく調べて局所的な状態の性質を理解すると共に、比熱や帯磁率といった熱力学量や一粒子スペクトルなどの動的な量の解析を通じて多角的に準粒子状態の性質を調べた。その結果、フラストレーションの無い正方格子の場合などと異なり、この系では金属絶縁体転移近傍の広い金属領域にわたって、低温に向けて成長する準粒子ピークが安定に存在し、またこの準粒子状態の形成が、スピン・カイラリティーモーメントの遮蔽に深く関係している事を見出した。本発表では特に、従来のHirsch-Fyeのアルゴリズムでは精度の良い取り扱いが難しかった比熱及びエントロピーの計算結果を紹介する。虚時間方向の離散化が計算時間のボトルネックであったHirsch-Fyeの方法とは対照的に、我々が今回用いた連続時間量子モンテカルロ法では虚時間方向の分割を数値精度を保つ範囲で任意に細かくとれるため、従来は計算が困難だった低温における比熱及びエントロピーを高精度で求めることが可能になった。その結果、電荷やスピンの揺らぎに関連する特徴的な温度より低温で比熱が鋭いピークを示し、そこで解放されるエントロピーがカイラリティー自由度の縮退度($\log 4$)とほぼ一致する事を示す事が出来た。これらの結果に基づき、カイラリティー機構による重い電子状態形成について議論する。

12H-AINの第一原理計算と並列化(OpenMP)

物質・材料研究機構 小林一昭、小松正二郎

筆者等はこれまで第一原理分子動力学手法を用いて、AINポリタイプ構造の構造最適化とその電子状態を求めてきた[1]。既に10HのAIN構造の計算を行っている[2]。今回更に単位胞当りの原子数が多い12Hポリタイプ構造(原子数24個)の計算を行っている。12Hポリタイプ構造は、58種類の異なる構造[3]が存在する。全ての構造を扱うことは出来ないため、構造を選ぶ必要がある。AINは、2H-AIN(ウルツ鉱構造)のバンド構造が直接遷移型のバンドギャップとなる。4H、6Hポリタイプ構造でも直接バンドギャップを持つという第一原理計算の報告[4][5]があるが、筆者等の計算では直接バンドギャップにならず、間接遷移型のバンドギャップとなる結果が得られている[1]。筆者等の計算では、10Hポリタイプ構造でも直接にならない[2]。ただ、4H,6H,10Hとなるにつれ、最小の間接バンドギャップと最小の直接バンドギャップとの差は縮まっていく。従って12Hポリタイプ構造では直接遷移型のバンドギャップになる可能性があり、58種類ある12Hポリタイプ構造から最もその可能性の高いと思われる構造を選んで現在計算を行っている。AIN以外にBN、SiCの計算も行っており、それについても合わせて言及する予定である。

2009年4月筆者の所属する物質・材料研究機構のスーパーコンピュータ(材料数値シミュレータ)が更新され、**SGI Altix ICE8200E**(分散メモリ型)及び**SGI Altix 4700**(分散共有メモリ型)となった。これを機会に筆者も計算コードの並列化を行った。過去に富士通のVPP上での並列化(VPP独自の注釈行形式)の経験はあるが、今回は同じ注釈行形式であるが内容は全く異なる、OpenMPによる並列化を試みた。OpenMPは共有メモリ下で並列実行されるので、**SGI Altix ICE8200E**では1ノード(8並列)でのみ実行される。並列化は完全ではないが、8並列で4.7倍程度の高速化が出来ている(予備段階、あんまり高速化出来ていない)。**SGI Altix 4700**ではもっと大きい並列化が可能であるが、分散共有なので効率はあまり良くない。データの分割(メモリ)に関してはあまり効率化されておらず、大きな計算ではメモリ不足で止まってしまうのが現状である。

文献

- [1] K. Kobayashi and S. Komatsu: J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) [084703](#).
- [2] K. Kobayashi and S. Komatsu: J Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) [044706](#).
- [3] J. E. Iglesias: *Acta. Cryst.* **A62**(2006) 178.
- [4] Y. C. Cheng, H. T. Chen, X. X. Li, X. L. Wu, J. Zhu, S. H. Li, and Paul K. Chu: *Journal of Applied Physics* **105** (2009) 083511.
- [5] Y. C. Cheng, X. L. Wu, S. H. Li, and Paul K. Chu: *Applied Physics Letters* **95** (2009) 121902.

双極子スピンアイスモデルの[111]磁場中秩序相

東大物性研、 内山敦夫、 富田裕介、 川島直輝

$\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ は磁気モーメントがパイロクロア格子を組んでいる。四面体の各頂点における磁気異方性は四面体の中心に向かった容易軸異方性となっており、この異方性が大きいことからイジングスピン系とみなされている。このような異方軸を持つイジング系は、ひとつの四面体ではスピンの二つ内側を向き、二つが外側を向くというアイスルールに従った状態が基底状態となる。最近接相互作用のみを考えると、アイスルールを満たす状態は全て縮退しており、低温において巨視的なエントロピーが残ったスピンアイス状態となる。しかし、これらの物質は大きな磁気モーメントを持ち、双極子相互作用が無視できない大きさとなっている。双極子相互作用を加えたモデルにおいては、アイスルールを満たす状態のなかにさらにエネルギー的に安定な状態が生じる[1]。

これらの物質は四面体の各頂点ごとに異なる磁気異方軸を持つため、磁場の方向に対して様々な相が出現することが知られている。[111]方向に磁場を印加すると2/3磁化プラトーが観測される。このプラトー領域では磁場に平行な異方軸をもつスピンの固定され、残りのスピンのアイスルールに従うが、巨視的なエントロピーが残ったカゴメアイス状態になっていることがエントロピーの測定によりわかった[2]。我々は双極子スピンアイスモデルをモンテカルロシミュレーションによって調べ、カゴメアイス領域の低温において、スピンのアイスルールを満たしながら長距離オーダーしている相を発見した。

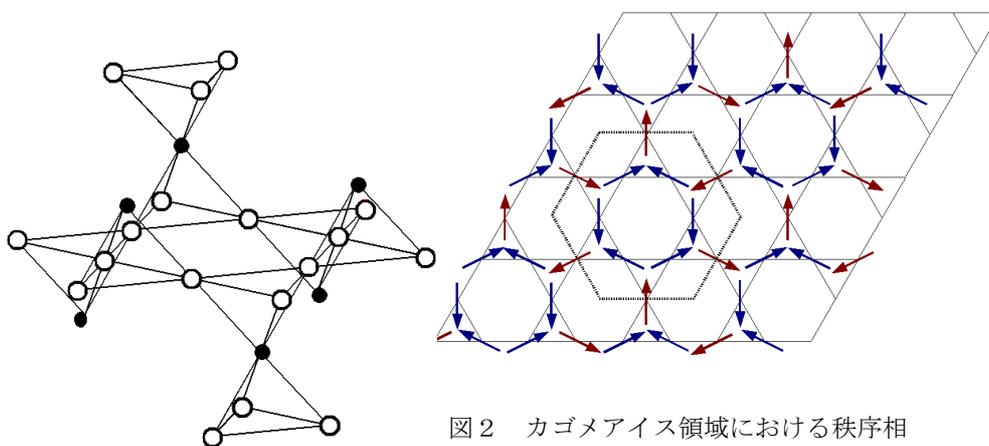


図1 カゴメアイス状態の模式図

黒丸であらわした三角格子を形成するスピンの磁場により固定され、白丸であらわしたカゴメ格子を構成するスピンは巨視的なエントロピーを持つ
文献

[1] R. Melko, M. J. P. Gingras, *J. Phys: Condens. Matter* **16**, 1277 (2004).

[2] K. Matsuhira, et al., *J. Phys: Condens. Matter* **14**, 559 (2002).

量子モンテカルロ法を用いた 光格子中における2成分ボーズ原子気体のシミュレーション

東大物性研 大越孝洋、川島直輝

光格子中にトラップされたボーズ原子気体の超流動・モット絶縁体転移が観測されて以来 [1]、光格子を用いた実験により、それまで格子モデルに対する理論的研究で指摘されていた様々な現象を検証することが可能になり、盛んに研究が行われてきた。近年では、スピン自由度を持つ粒子や同時に異種粒子をトラップすることで多自由度を持つ系を実現できるようになり、多自由度に起因した数々の新奇な現象が報告されている [2]。

光格子中の2成分ボーズ原子気体は2成分ボーズ・ハバードモデルによって記述される。このモデルでは、全粒子数がコメンシユレートなフィリングでかつ、各成分の粒子数が同数である場合、異種粒子間の斥力相互作用が強い領域で、対超流動 (Super Counter Fluid) と呼ばれる新奇な基底状態が現れることが知られている [3]。この相は、オーダーパラメータ $\langle a^\dagger b \rangle \neq 0$, $\langle a \rangle = 0$, $\langle b \rangle = 0$ で特徴づけられる相 (a, b はそれぞれ成分 A, B の消滅演算子) で、A 成分ボゾンと B 成分ホールが対を形成して動き回るため、全体としての粒子の流れはない状態となっている。このように興味深い性質を見せる2成分のモデルであるが、有限温度も含め、まだ明らかにされていない相図領域が広いので、さらなる研究が望まれる。

このような背景により、我々は2成分ボーズ・ハバードモデルの静的な性質を明らかにするため、量子モンテカルロ・シミュレーションによる研究を行った。用いた量子モンテカルロ法は、最も適用範囲の広いアルゴリズムの一つである、向き付きループアルゴリズムである。しかし、従来の向き付きループアルゴリズムを用いると、Super Counter Fluid 相でのシミュレーション効率が著しく悪くなるという問題が起こる。さらに、対相関関数 $\langle a_i^\dagger b_j b_j^\dagger a_i \rangle$ が測ることができないので、シミュレーションによる先行研究においても、Super Counter Fluid 状態であることは、巻き付き数に関する量を見ることで、間接的に判定することしかできなかった [4][5]。この問題に対し、我々はアルゴリズムに改良を行うことで、この相でのシミュレーション効率の改善と同時に、それまで測れなかった対相関関数を測定することに成功した。

文献

- [1] M. Greiner et al., *Nature* **45**, 39 (2002).
- [2] J. Catani et al., *Phys. Rev. A* **77**, 011603 (2008).
- [3] A. B. Kuklov and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. Lett* **90**, 100401 (2003).
- [4] A. B. Kuklov, N. Prokof'ev and B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett* **92**, 050402 (2004).
- [5] Soyler et al., *New Journal of Physics* **11**, 073036 (2009).

量子モンテカルロシミュレーションによるエンタングルメントエントロピーの計測

東大院工¹、CREST-JST² 金井龍一¹、藤堂 眞治^{1,2}

量子もつれとは量子系特有の性質であり、量子コンピューターではこのもつれ状態を経由して量子計算を実行する。このように量子情報の分野ではもつれ状態は重要な意味を持ち、もつれの指標の1つであるエンタングルメントエントロピーが注目されている。エンタングルメントエントロピーは多体系の一部がどの程度の混合状態を含むかという「不確かさ」を測る指標であり、系をサブシステム A と B に分けた時に、以下の式で表される。

$$S_A = -\text{tr}_A \rho_A \log \rho_A$$

$$\rho_A = \text{tr}_B e^{-\beta \mathcal{H}}$$

ここで、 tr_B とはサブシステム B に関する部分トレースであり、 ρ_A はサブシステム A の縮約密度行列である。このエンタングルメントエントロピーはもつれていない状態（それぞれの部分系の状態の直積で全系の状態が表せる時）では0となり、最ももつれている状態で最大値をとる。

エンタングルメントエントロピーは厳密対角化等で計算することは出来るが、計算可能な系の大きさは限られている。一方で、モンテカルロシミュレーションにより大きな系を扱おうとしても、现阶段ではモンテカルロシミュレーションによる計測手法は確立されておらず、計算することはできない。

本研究では、2000年代に入ってから考案された Wang-Landau 法 [1] を量子モンテカルロシミュレーションに適用した手法 [2] を元に、モンテカルロシミュレーションによりエンタングルメントエントロピーを求める新たな手法を開発した。本手法では、まず $\log \rho_A$ を Taylor 展開することで、エンタングルメントエントロピー $-\text{tr}_A \rho_A \log \rho_A$ を $\text{tr}_A \rho_A^n$ の線形和で表す。これにより、n 個のレプリカが特殊な境界条件で結ばれている系の分配関数を計算する事で各 $\text{tr}_A \rho_A^n$ が求まり、エンタングルメントエントロピーを計算することができる。さらに、レプリカ同士の境界条件に対して古典 Wang-Landau 法を用いる事でより効率的に計算できる事を示した。本発表では、この手法についての説明を行い、モンテカルロシミュレーションによって計測した量子スピン系のエンタングルメントエントロピーのデータを紹介する。

[1] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001); Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

[2] M. Troyer, S. Wessel and F. Alet, Phys. Rev. Lett, **90**, 120201 (2003).

多項式展開モンテカルロ法における GPGPU

青学大理工 古川信夫

GPGPU (Graphic Processing Unit による汎用計算) は、今後の HPC (High Performance Computing) において重要な役割をなすことが期待される。本発表では、多項式展開モンテカルロ法の計算の一部を GPU にて行う場合の性能を検証するため、CUDA を用いたプログラミングを行いベンチマークを取った結果を示す。

多項式展開モンテカルロ法とは、電子系と古典場 (スピン、格子歪みなど) が結合した模型 (例として二重交換模型や電子格子系など) の熱力学的状態を計算する時に用いられる方法の一つである。このような系において、古典場の配置をモンテカルロ法で計算する場合、作用 S を $S = -Tr \log(1 + \exp(-\beta(H - \mu)))$ で定義してボルツマン因子 P は $P \propto \exp(-S)$ で表される。ここで H はハミルトニアン行列、 β は温度の逆数、 μ は電子系の化学ポテンシャルである。行列の \exp や \log を含む式を評価する最も素直な方法は行列を対角化することであるが、モンテカルロ法においてボルツマン因子の計算は何度も繰り返されるため、ここが計算時間の律速段階となっている。多項式展開モンテカルロ法とは、行列の対角化をする代わりに、関数 $f(x) = \log(1 + \exp(-\beta(x - \mu)))$ を多項式展開することによってハミルトニアン行列の多項式の計算からボルツマン因子を計算する方法である [1]。この方法の特徴は、単純な行列計算 (積、和、跡など) のみで処理されること、したがって SIMD 型データ処理において並列化計算が高効率で行えること [2] などであり、GPGPU に適していると考えられる。

本研究では、与えられたハミルトニアン行列に対してボルツマン因子を計算するルーチンを取り上げ、GPGPU による計算の加速を測定した。GPU としては一般向けグラフィックボードである NVIDIA GeForce GTX 200 シリーズ (processor 数=240) を採用し、CUDA [3] を用いてプログラミングを行った。発表では、ブロックの切り方、シェアードメモリの採用などによる計算速度の変化についてのベンチマークを通じて、物性物理学における GPGPU の現状の一例として報告する。

文献

- [1] Y. Motome and N. Furukawa, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999).
- [2] N. Furukawa, Y. Motome, H. Nakata, Computer Phys. Comm. **142** (2001) 410.
- [3] http://www.nvidia.co.jp/object/cuda_home_jp.html

マルチフェロイック系 Mn 酸化物における軌道秩序の第一原理計算

金沢大理工¹, 金沢大自然² 石井史之^{1,2}, 澤田啓介²

近年、磁性と強誘電性を同時に示すマルチフェロイックス RMnO_3 ($R = \text{Tb}, \text{Dy}$ 等) における磁気構造が、スパイラル長周期ノンコリニア磁気構造であることが報告されている[1]. 実験的に RMnO_3 の安定な磁気構造は、格子歪みの増大に従って、A 型反強磁性構造 \rightarrow 磁気的不整合(らせん磁性構造) \rightarrow E 型反強磁性構造と変化する[2]. 過去の第一原理計算によると、面内における最近接 Mn サイト間の強磁性的な交換相互作用は、格子歪みの増大に従い、減少してゼロに近づく一方で、第二近接 Mn サイト間の反強磁性的な交換相互作用はほぼ一定であり、これによって面内でスピンプラストレーションが起こり、磁気構造が変化すると予言している[3]. しかしながら e_g 軌道と t_{2g} 軌道における交換相互作用の寄与等、詳細な電子状態の解析はされていない. また、電荷・軌道秩序系のマルチフェロイックス $\text{Pr}(\text{Ca}, \text{Sr})_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ については、電荷秩序・軌道秩序相で強誘電性が生ずると考えられており[4], Jahn-Teller 歪みの解析が X 線回折によっておこなわれている[5]. しかし、強誘電性と電荷秩序・軌道秩序の関係についてはまだ明らかとなっていない.

本研究では、ペロブスカイト型 Mn 酸化物について、第一原理計算によって電子状態と電荷秩序・軌道秩序の定量的な解析をおこない、磁性・誘電性との関連を明らかにする. 具体的には(i) RMnO_3 系について R を変えて、最近接の Mn サイト間と第二近接の Mn サイト間における交換相互作用を計算し、ノンコリニア磁気構造の出現可能性と強誘電性の相関について考察する. (ii) 層状 Mn 酸化物, 人工超格子系について、密度行列から得られる各軌道の占有数の格子歪み依存性、エネルギー分解された交換相互作用等の詳細な電子状態の解析を行い、界面における磁性・誘電性と電荷・軌道秩序の関係について考察する. 以上の考察によって得られた知見から、機能性の高い Mn 酸化物人工超格子の設計指針を構築する.

文献

- [1] T. Arima et al., Phys. Rev. Lett. 96, 097202 (2006).
- [2] T. Kimura et al., Phys. Rev. B 68, 060403(R) (2003).
- [3] K. Yamauchi et al., Phys. Rev. B 78, 014403 (2008).
- [4] Y. Tokunaga et al., Nat. Mater. 5, 937(2006).
- [5] D. Okuyama et al., Phys. Rev. B 80 64402(2009).

粒子数非保存系の量子モンテカルロ法とスピンパイエルス系への応用

東大院工¹, CREST-JST²,

諏訪秀磨¹, 藤堂眞治^{1,2}

量子モンテカルロ法は量子多体問題の臨界現象に対して非常に強力な解析手段である。近年特に、スピン系、ボゾン系に対して、ループアルゴリズム [1] やワーム (向き付きループ) アルゴリズム [2] といった世界線量子モンテカルロ法を用いた効率的な手法が考案されてきた。しかしこれらの方法は粒子数非保存系、スピンの全 S^z やボゾンの全占有数がハミルトニアンによって保存されない系、に対しては有効でない。我々はこれらの系に対しても有効かつ、全く近似を用いない量子モンテカルロ法を開発した。我々の手法は鈴木・トロッター分解による誤差が入らない連続虚時間経路積分表示を用い、長距離相互作用を $O(N)$ の計算コストで厳密に取り入れることができる。また従来のワーム (向き付きループ) アルゴリズムを拡張し、エルゴード性を満たしつつ非保存系特有の相関関数をはかることができる。我々はこの手法を、スピンと格子という2つの異なる自由度が競合する次のようなスピンパイエルスハミルトニアンに応用し、3次元系の相図を初めて示した (図1)。

$$H = \sum_{\vec{r}} [J_x S_{\vec{r}+\vec{e}_x} S_{\vec{r}} + J_y S_{\vec{r}+\vec{e}_y} S_{\vec{r}} + J_z (1 + \alpha q_{\vec{r}}) S_{\vec{r}+\vec{e}_z} S_{\vec{r}}] + \sum_{\vec{r}} \left[\frac{p_{\vec{r}}^2}{2m} + \frac{C}{2} (2q_{\vec{r}}^2 + \gamma_x (q_{\vec{r}+\vec{e}_x} - q_{\vec{r}})^2 + \gamma_y (q_{\vec{r}+\vec{e}_y} - q_{\vec{r}})^2) \right].$$

さらに実験的にスピンパイエルス物質 CuGeO_3 に非磁性不純物を加えると、低温で量子的ダイマー状態と古典的ネール状態が共存するという結果が報告されている [3,4]。我々はこのような不純物を含むときの2種類の異なる長距離秩序が共存する状態の物理を明らかにするため解析を行った。その結果、磁性を担う実効的なスピンはスピン鎖の上を動き回っており不純物サイトに局在していない場合があり、同時にスピン鎖の別の部分でシングレットペアが系全体にネットワークを組んでいるという描像を明らかにした。

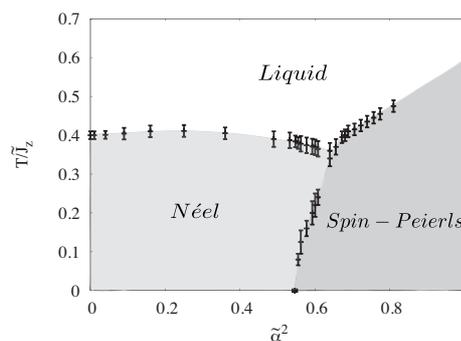


Figure 1: 3次元スピンパイエルス系のスピンフォノンカップリングと温度に対する相図。

[1] H. G. Evertz, Adv. Phys. **52**, 1 (2003).

[2] Olav F. Syljuåsen and Anders W. Sandvik, Phys. Rev. E **66**, 046701 (2002).

[3] M. Hase, I. Terasaki, Y. Sasago, K. Uchinokura, H. Obara, Phys. Rev. Lett. **71**, 4059 (1993).

[4] S. B. Oseroff, S.-W. Cheong, Aktas, M F. Hundley, Z. Fisk, L.W. Rupp, Jr, Phys. Rev. Lett. **74**, 1450 (1995).

並列 DMRG 法のスピラダー系への応用

原子力機構シシセ¹, JST-CREST² 五十嵐 亮^{1,2}, 奥村 雅彦^{1,2}, 山田 進^{1,2}, 町田 昌彦^{1,2}

我々のグループで開発している並列 DMRG 法 [1, 2] をスピラダー系に応用した結果を報告する。我々のグループでは DMRG を 2 次元格子に拡張するとき、leg 数分の格子を同一に扱うことで、1 次元系に近い精度を保つことができている。 $S = \frac{1}{2}$ の系では並列化効率の高さから、6-leg までは物性研システム B で計算することができた。スピギャップが空く系では $m = 512$ まで計算することで、基底状態のエネルギー固有値の精度は少くとも 8 桁あるところまで計算ができた。また、leg 数を変えて系統的に調べることで、3-leg および 5-leg の系ではギャップレスで、4-leg および 6-leg の系ではスピギャップが空くという、Haldane の予想および量子モンテカルロ法での計算結果と一致する結果を得た。

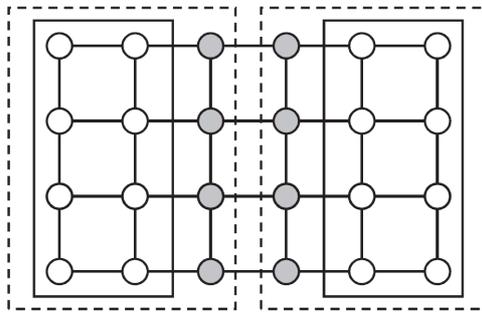


図1 梯子系での DMRG の superblock の取り方 [2]

参考文献

- [1] M. Machida, et al., Phys. Rev. A **77** 033619 (2008).
- [2] S. Yamada, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **78** 094004 (2009).

流れによる赤血球、脂質ベシクルの変形

東大物性研¹、Forschungszentrum Juelich²、野口博司¹、G. Gompper²

赤血球は変形することで自身の直径より細い毛細血管をながれることができる。糖尿病などの病気等で赤血球の変形能が落ちると血流に支障が生じる。従って、細胞の変形と運動の仕組みを理解することは、医学的な見地からも重要である。そこで、粒子猫像の計算手法のひとつである multi-particle collision dynamics (MPC) を用いて、流れによる赤血球、脂質ベシクルのダイナミクスを研究した。

単純せん断流において、せん断強度、膜の粘度、ベシクルの体積などに依存して、脂質ベシクルの運動状態 (tank-treading, tumbling, swinging) が変わると共に、ベシクルの形態転移が起こる [1, 2]。流れによって、円盤状のベシクルが棒状に引き伸ばされたり、また逆に縮められたりする。これらのダイナミクスは 2 変数の微分方程式で理解することができる。

細管中を流れる赤血球は、低密度では流速の増加に伴い、円盤状からパラシュート状へ形態転移する。それに伴い、溶液の流体抵抗は減少する。これらの結果は赤血球の実験とよい一致をする [3, 4]。高密度になると、スリッパ状に変形して、2 列でジグザグに並ぶことが明らかとなった (図 1) [4]。この密度では熱揺らぎによって、一列に並んだパラシュート状態は不安定化する。

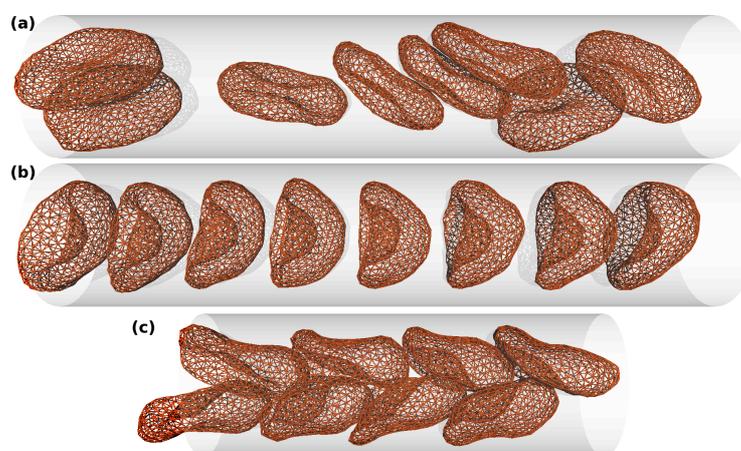


図 1 細管を流れる赤血球。

文献

- [1] H. Noguchi and G. Gompper, PRL **93**, 258102 (2004); PRE **72**, 011901 (2005); PRL **98**, 128103 (2007).
- [2] H. Noguchi, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 041007 (2009).
- [3] H. Noguchi and G. Gompper, PNAS **102**, 14159 (2005).
- [4] J.L. McWhirter, H. Noguchi, and G. Gompper, PNAS **106**, 6039 (2009).

Quantum Monte Carlo calculation of the stiffness of the one-dimensional
p-state quantum clock models

東大院工 松尾春彦、藤堂眞治

本講演では量子クロック模型のスティッフネスをクラスター量子モンテカルロ法により計算することで相図を議論する. 1次元 p-状態量子クロック模型は離散的な角度 $2\pi/p$ で回転できる平面回転子が相互作用している模型である. 状態数 $p=2$ の場合, すなわちとりうる回転角が π の場合は Ising 模型であり, $p=3$ の場合は 3-state Potts 模型であり, $p=\infty$ の場合は XY 模型である. このことから, 状態数 p が変化することにより, 多彩な相図があらわれることは自明であろう. 特に $6 \leq p < \infty$ の場合 3 つの相を持ち, その中間相が BKT(Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) 臨界相となることが知られている. XY 模型と Ising 模型の相図の比較から予想できる通り, この中間相は p が小さいほど狭まってゆき, ある p で消失してしまう. また, $p=4$ の場合は Ashkin-Teller 模型であり, 転移点が 1 つしかないことは厳密にわかっており, 中間相を持ち得ない. そこで, $p=5$ の場合に BKT 臨界相はあらわれるのが問題となる. 現在のところ, 繰り込み群などの解析的方法からは $p=5$ でも中間相があるという結果が得られているが, 数値計算による中間相の特定は上手くいっていない. これは, BKT 転移点付近では物理量に対数補正がついてしまい, 通常数値計算では転移点を精度よく決めるのが難しいという問題と, さらに, 先に述べたように $p=5$ では中間相が非常に狭くなっているという 2 重の困難があるためである. そこで我々は, 大規模かつ精度よく計算できるクラスター量子モンテカルロ法を用い, BKT 転移点で急激な変化 (ユニバーサルジャンプ) を見せるスティッフネスを計算することで, $p=5$ での中間相の存在の有無を議論したい.