

パネルディスカッション分科会C
(ナノ・材料)

「量子シミュレーションが拓くナノの世界」

平尾 公彦 (東京大学)

押山 淳 (筑波大学)

寺倉 清之 (北海道大学/産総研)

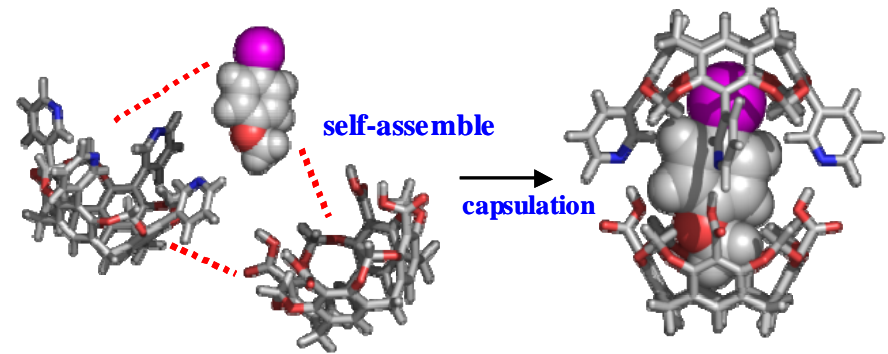
中村 振一郎 (三菱化学)

永瀬 茂 (分子科学研究所)

平田 文男 (分子科学研究所)

コンピュータ・シミュレーション

過去20年間、コンピュータ・シミュレーション、モデリングの発展はめざましく、科学技術のあらゆる分野で多大な貢献をしてきた。



サイズ

オーダーN法
計算負荷がシステム
サイズに比例
ハイブリッド
本質的な部分だけを
量子力学的に

時間

位相空間探索
拡張アンサンブル
Blue moon
metadynamics

最適化 逆問題 設計

粗視化
マルチスケール

精度

電子相関
強相関電子
遷移金属酸化物
van der Waals
有機分子間
有機分子と金属
電子励起
光学応答
反応制御

軽い核の量子効果
熱平衡
多体系動力学

シミュレーションは従来の理論、実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。

Quantum Chemistry has come a long way !

*P.Dirac*は「量子力学の出現で、化学の問題の解決に必要な基礎的物理法則は全て分かった」と述べている。原理的に化学が解けたにしても、化学の問題として知りたいことはいくらかもある。

ある有限規模の計算の可能性のなかで、どうしたら化学的精度(*kcal/mol*)を得るかというのが理論化学者の問題であった。その目的のために、われわれは物理学者とは異なるセンスで、しかし同じような細心さで内容を分析し、理論を作り上げてきた。

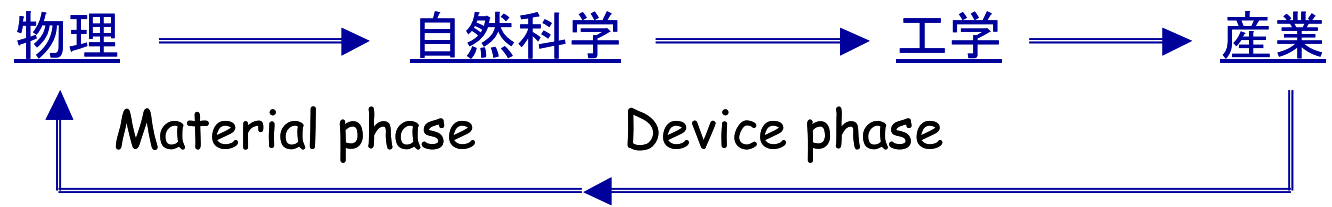
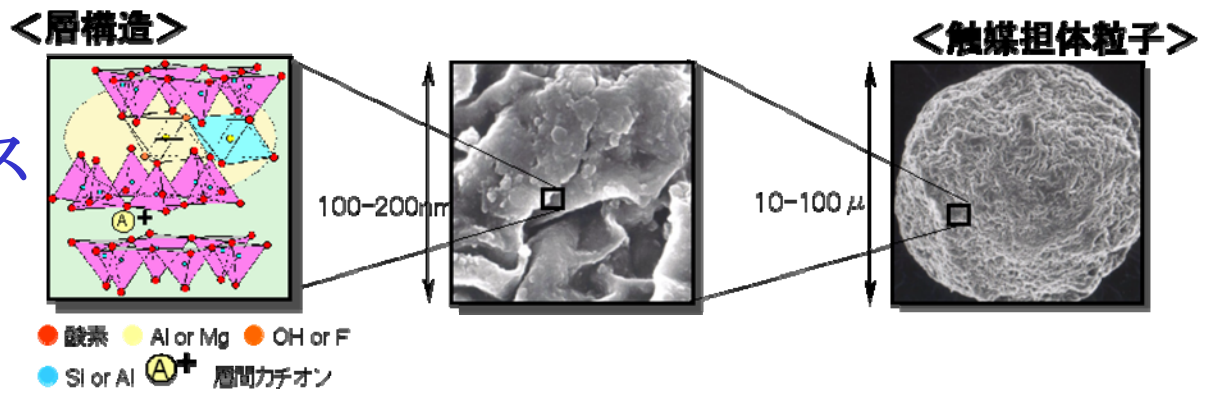
ナノシミュレーションの現状と将来

自然の懐は深い。多様な自然に比べるとわれわれのシミュレーションは、まだまだかも知れない。

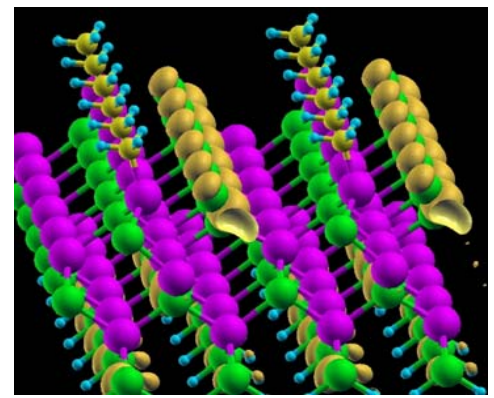
しかし現状でも結構面白いことができる。はっきり定義された問題を解く腕っぷしにかけては実験に決して劣るものではない。シミュレーションは従来の実験、理論とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。謙虚さを失わずに自然に向かえば、シミュレーションはますます魅力ある存在になるであろう。

Nanoscience

- マルチスケール
・マルチフィジックス
- 学際的領域

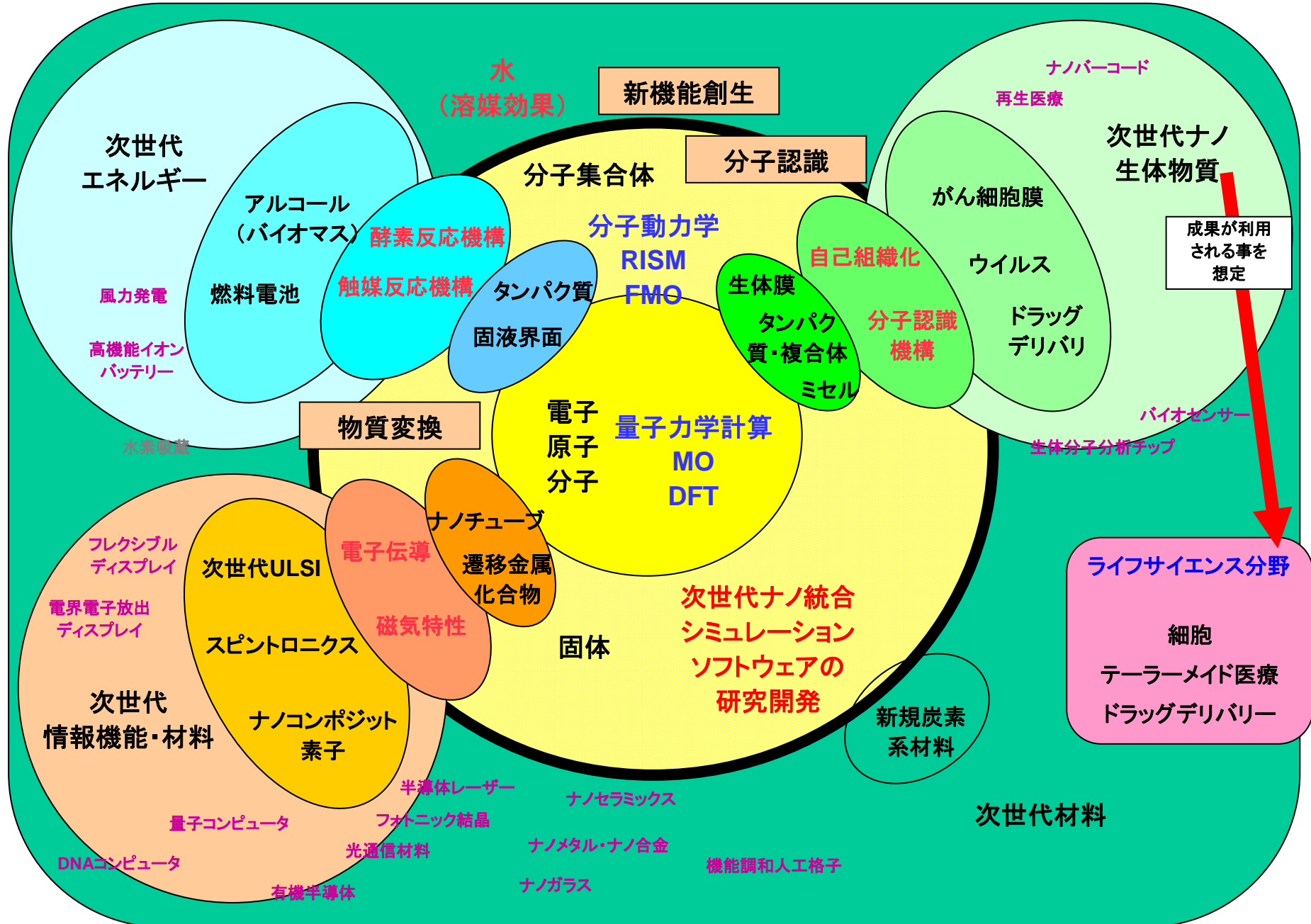


- シミュレーションが大いに力を発揮する世界
- 周辺領域へのインパクトが大



電池材料

ナノ分野グランドチャレンジ領域の俯瞰と関連

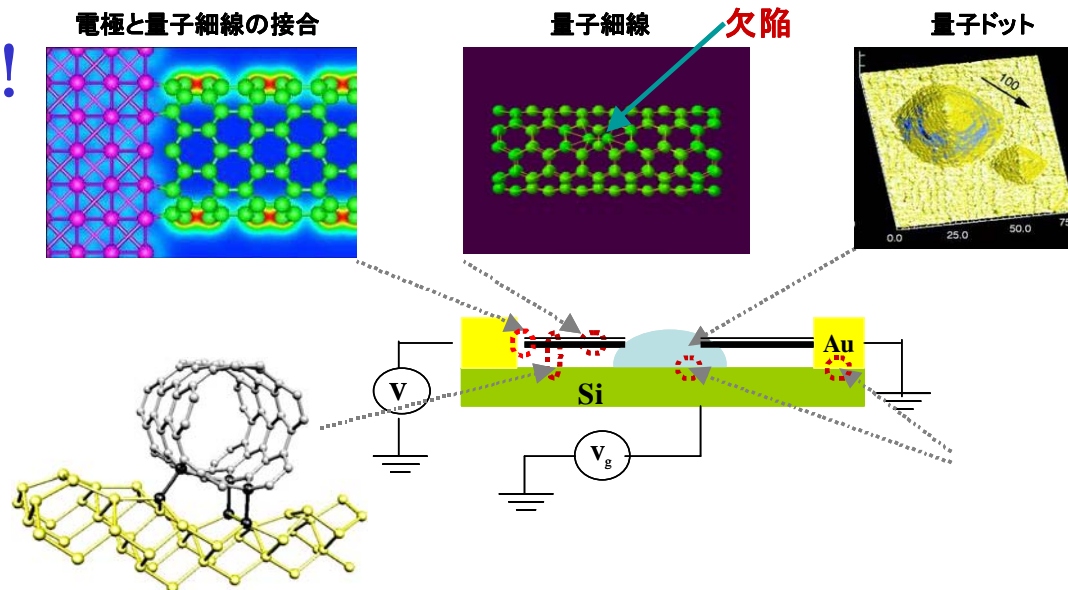


次世代スーパーコンピュータへの期待

コンピュータは自然を精緻に観測できる窓

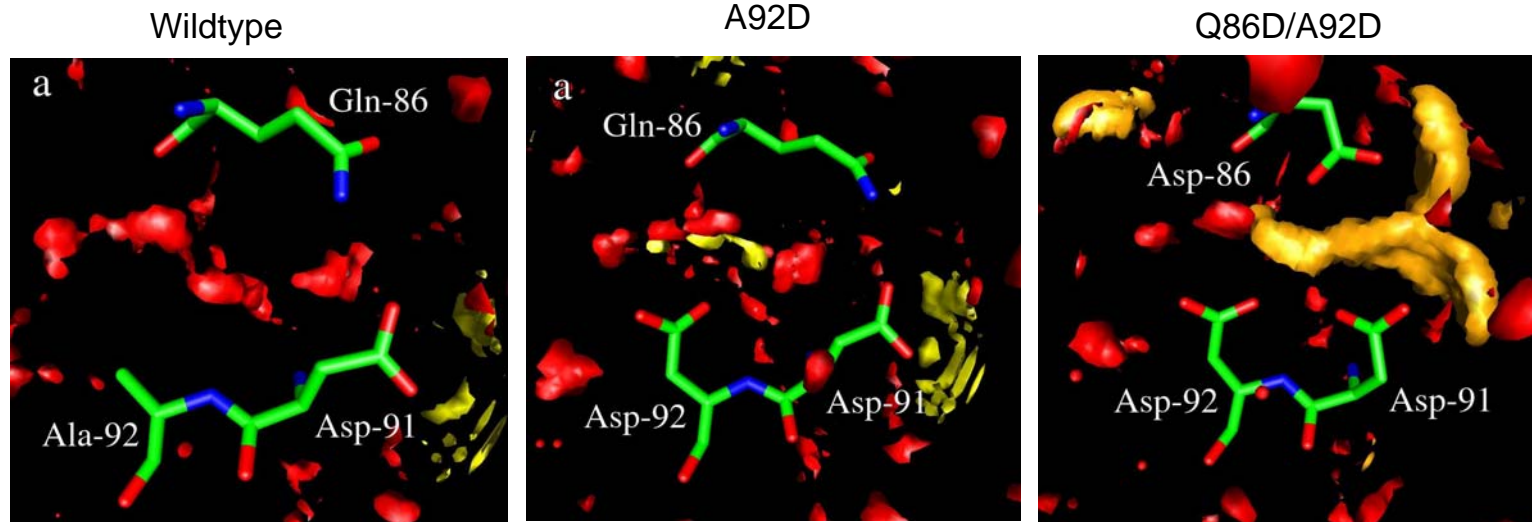
コンピュータは単なる基盤技術ではなく、科学技術の未踏分野、ニューフロンティアを開拓する駆動力

未知の領域への挑戦—ScienceとTechnologyに再び夢を！



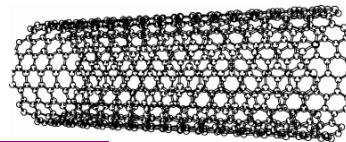
パラダイム変換

シミュレーションから実験へ



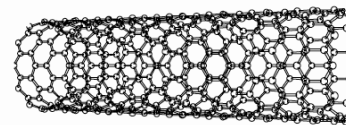
現象の解析・予測から新現象の発見へ

ナノの丸め方による金属・半導体制御



金属

(n,n) tube



半導体

(n,0) tube

Nano-Bio Simulationの課題

■理論開発、アルゴリズム開発

の重要性

■ハードウェア開発との連携

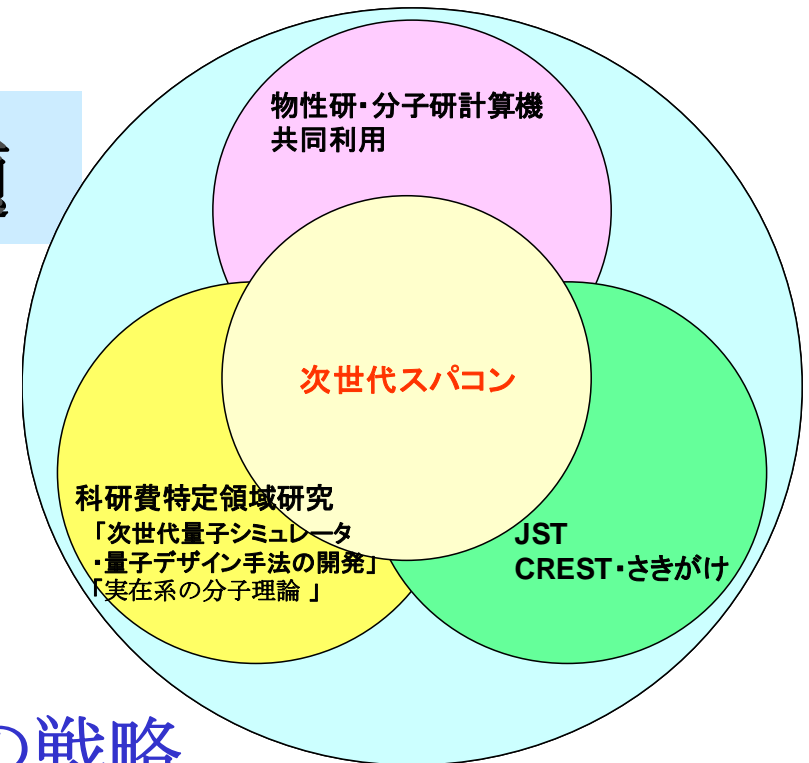
■ソフトウェア開発の重要性とその戦略

■コミュニティの組織化、計算科学分野の教育研究

基盤の充実、産学の連携の形態の模索

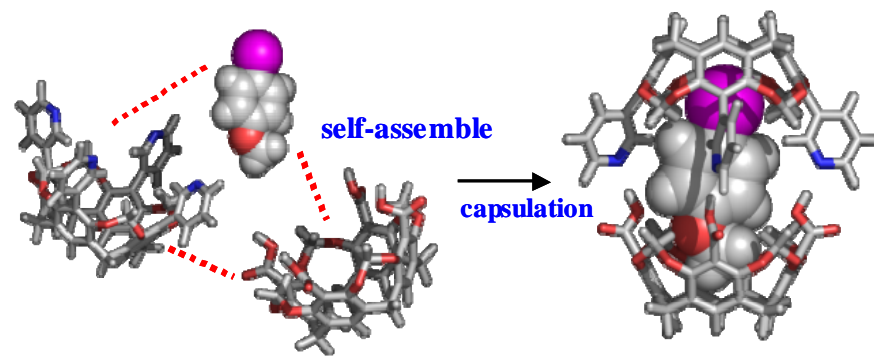
■融合領域(バイオ)、新領域への展開

■成果の移転、共有、産業界との連携



コンピュータ・シミュレーション

過去20年間、コンピュータ・シミュレーション、モデリングの発展はめざましく、科学技術のあらゆる分野で多大な貢献をしてきた。



サイズ

オーダーN法
計算負荷がシステム
サイズに比例
ハイブリッド
本質的な部分だけを
量子力学的に

時間

位相空間探索
拡張アンサンブル
Blue moon
metadynamics

最適化 逆問題 設計

粗視化

マルチスケール

精度

電子相関
強相関電子
遷移金属酸化物
van der Waals
有機分子間
有機分子と金属
電子励起
光学応答
反応制御

軽い核の量子効果
熱平衡
多体系動力学

シミュレーションは従来の理論、実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。

計算科学センターを！

- 計算科学の教育研究拠点であり、計算科学のコミュニティの活動拠点
 - 計算科学関連の研究者が集い、知的交流できる場
- 若手研究者が自由闊達に研究できる場
 - 若手、ポスドクトラル中心+プロジェクトリーダー、計算科学、情報科学(できれば数学も)にかかわる研究者
 - 数十名規模
 - 未踏分野にチャレンジ、融合領域の発展
- 現プロジェクトの準備、遂行、次のプロジェクトを見据えた人材育成
- ソフトウェア開発の戦略的拠点
- 10Pスパコンの完成を待たずに、ただちに設立

ナノシミュレーションの将来

自然の懐は深い。多様な自然に比べるとわれわれのシミュレーションは、まだまだかも知れない。

しかし現状でも結構面白いことができる。はっきり定義された問題を解く腕っぷしにかけては実験に決して劣るものではない。シミュレーションは従来の実験、理論とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。謙虚さを失わずに自然に向かえば、シミュレーションはますます魅力ある存在になるであろう。

ナノシミュレーションの将来

自然の懐は深い。多様な自然に比べるとわれわれのシミュレーションは、まだまだかも知れない。

しかし現状でも結構面白いことができる。はっきり定義された問題を解く腕っぷしにかけては実験に決して劣るものではない。シミュレーションは従来の実験、理論とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。謙虚さを失わずに自然に向かえば、シミュレーションはますます魅力ある存在になるであろう。

パネルディスカッション分科会C (ナノ・材料) ディスカッション

- ・ 人材について (人材育成など)
- ・ スパコンを通じたユーザーコミュニティの形成について
- ・ 融合領域(バイオなど)、新領域への展開の必要性
- ・ 産学連携、成果の移転等について
- ・ 結果だけでなくアルゴリズムなどの異分野への展開
- ・ 実験・理論との関係について (方法論だけでなくデータベースの整備など)
- ・ アプリケーションの開発戦略について

(2)パネルディスカッション分科会C (ナノ・材料)

パネラー講演のまとめ

- ・ ナノ・材料分野は、様々な意味で多階層構造
- ・ ナノ・材料分野の向かうところ
- ・ そのために何をすべきか
- ・ 10PFスーパーコンピュータへの要望

パネルディスカッション分科会C (ナノ・材料) 総括

- ・ ナノ・材料分野は、様々な意味で多階層構造
 - ボーダレスな分野。様々な分野が混在し、それぞれが密接な関わり合い、フィードバックも必要となる分野。(押山)
 - ・ 中核的領域(基礎・応用)
 - ・ 融合的領域(物理・化学・生物)
 - ・ 応用的領域(バイオ・ライフ・デバイス)
 - 構造が多様かつ多階層(マルチスケール・マルチフィジックス)である。(全員)
 - シミュレーションでのみ解明が可能な分野
 - ・ コンピュータがツール以上の意義を持つ
 - ・ 新しいサイエンスをも生み出し得る
- ・ ナノ・材料分野の向かうところ
 - 高機能材料
 - ダウンサイジング (寺倉)
 - 各種量子デバイスの複合化 (寺倉)
 - ・ 量子材料、量子デバイス、量子プロセッシング、ハイブリッド材料 (押山)
 - ライフ・バイオ・デバイスなど応用分野へのキーとなる。ひいては社会貢献へ。

パネルディスカッション分科会C (ナノ・材料) 総括

- ・ そのために何をすべきか
 - 新規方法論の開発 (量子力学効果 例: DFTの発展) (永瀬, 押山)
 - マルチスケール手法 (例: RISM-SCFによる溶媒の取り入れ(平田))(押山)
 - 継続的な基盤研究 (寺倉)
 - 融合領域・新領域など分野の橋渡し(寺倉)
 - ユーザーコミュニティの連携 (寺倉)
 - ・ 現在個別のコミュニティは存在するものの連携に乏しく個々に動いているのが実情。本プロジェクトを機会に分野間の融合を計るべき
 - 分野間の連携並びに成果のフィードバック (押山)
- ・ 10PFスーパーコンピュータへの要望
 - コンピュータアーキテクチャの新規な発想転換 (中村)