

次世代スーパーコンピューティング
シンポジウム2007
2007.10.3-4 @ My Plaza

「計算物質科学の課題と
次世代スーパーコンピュータ」

福山秀敏
東京理科大学

「物質」: 原子・分子の凝縮体

「物質科学」: 原子・分子の電子状態の知識を基に物質の性質、「物性」、を究明し、可能性を探る。

結晶(周期系): 第一原理計算による電子状態計算

1枚の図にマクロ(10^{23} 個程度)な数の原子とそれに伴う電子の状態が記述されている!

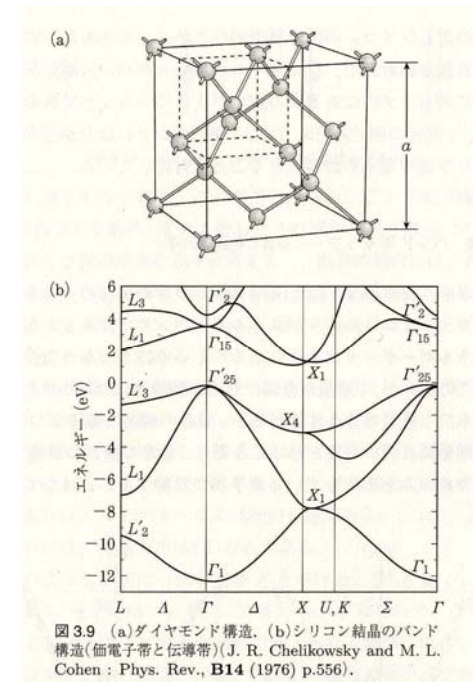
原子・分子(孤立系): 量子化学計算

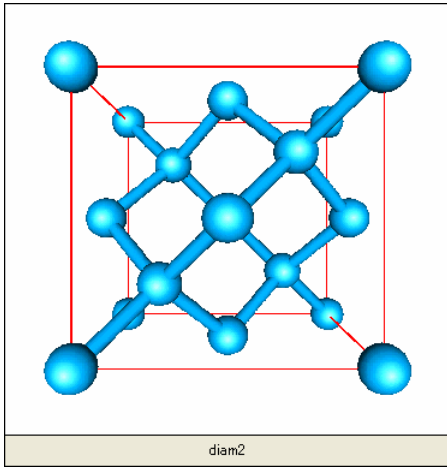
=> 「新しい挑戦」

「強相関効果」: 局所性と波動性

「ナノ」: 界面・表面・クラスター・蛋白質・DNA etc.

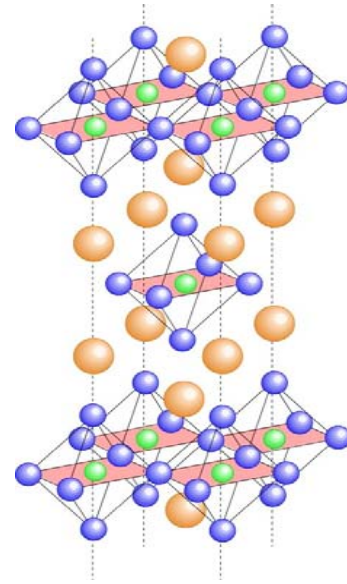
分野横断的研究の重要性=>「計算物質科学」



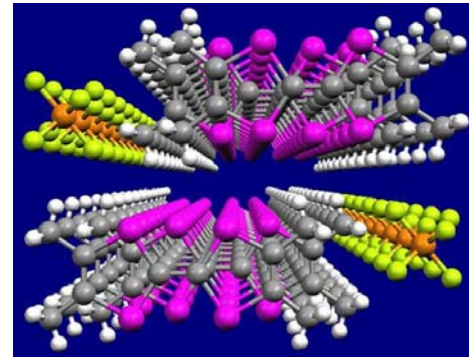


ダイヤモンド

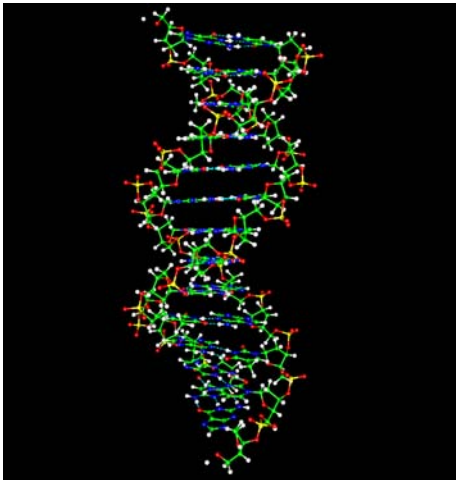
さまざまな凝縮系



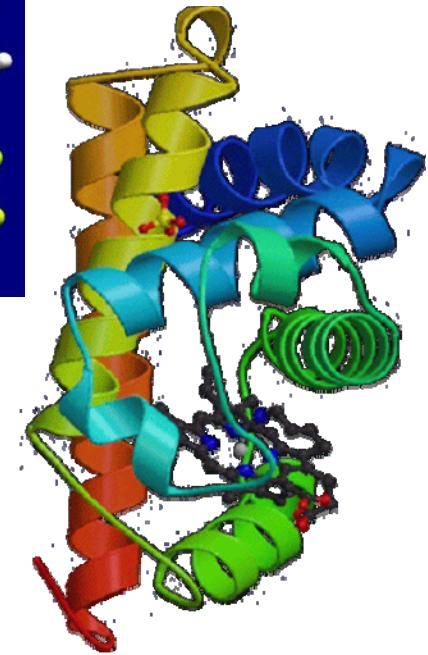
層状ペロブスカイト銅酸化物



分子性超伝導 $\text{TMTSF}_2\text{PF}_6$

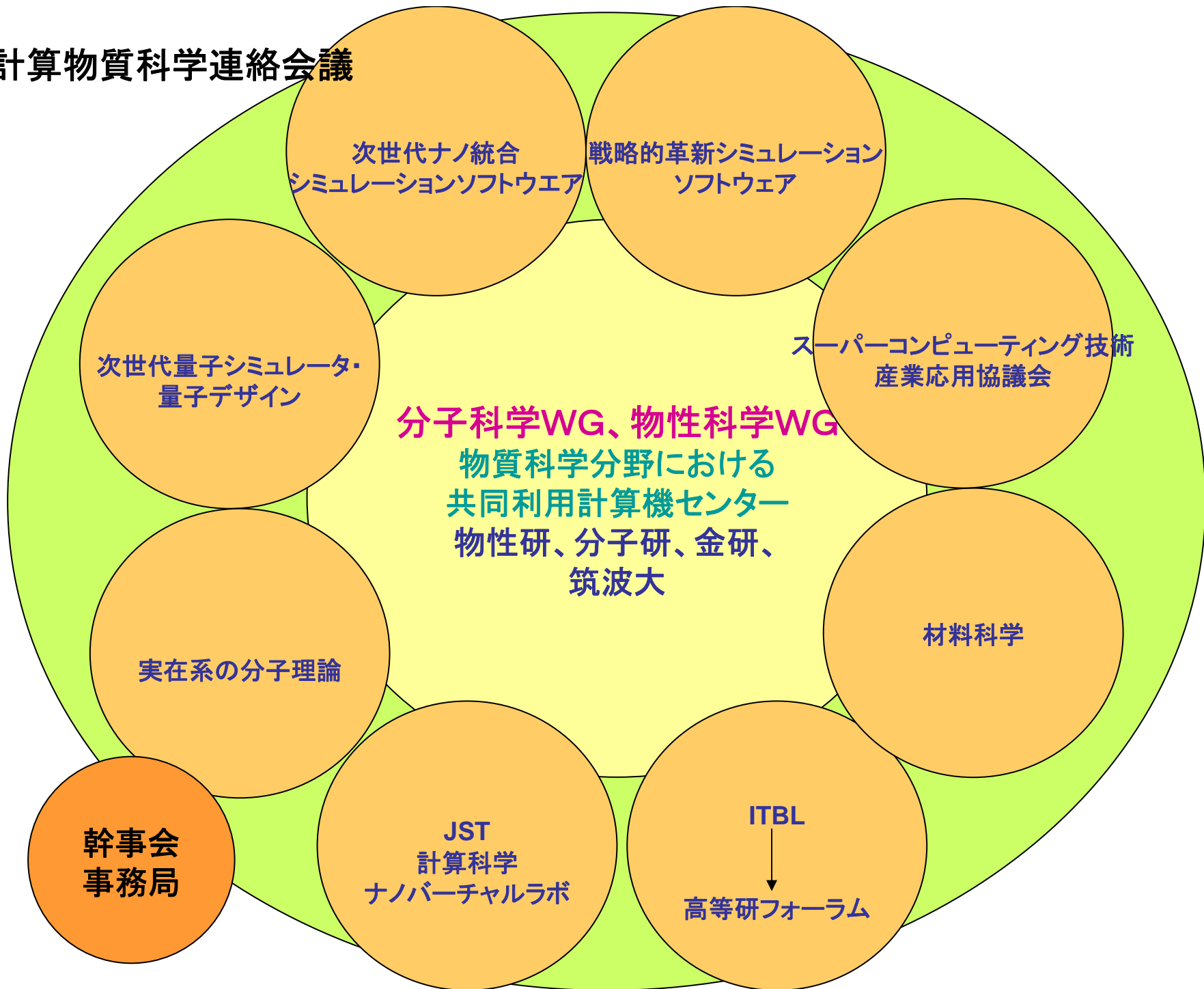


DNA



ミオグロビン

計算物質科学連絡会議



計算物質科学連絡会議

- ・ 次世代スパコンプロジェクトを視野に入れて、計算物質科学の研究・教育活動に関する全国的な情報および意見交換の場
- ・ 計算物質科学コミュニティーの窓口
- ・ 年に一度、全体シンポジウムを開催
- ・ 事務局を設置（世話人：福山、平尾、中辻、榊、土井、寺倉）

—WEBページの充実により、

情報公開に努める。特に、

次世代スパコンについては、

理研との協力によりコミュニティーへの情報伝達を行う。

—全体シンポジウムのアレンジ

<http://www.jaist.ac.jp/cmsf/>



計算物質科学連絡会議の目指すこと

- 情報の公開
事務局で連絡会議のホームページを立ち上げる。関連のプロジェクトや組織のホームページにリンクを張る。
- 交流
研究成果の共有
例えば、高度な手法およびソフト開発とその有効活用
挑戦的課題の設定とそれを遂行するための協力体制の構築
プロジェクトや組織をまたがる研究会の組織
- 計算機資源の有効活用
共同利用の計算機資源の組織的運用
情報学研究所が計画しているサイバーサイエンスインフラの構想の枠内で、
次世代スパコンを頂点とした計算機資源の有機的・組織的運用
運用に適した課題の設定・選択・配分
計算機資源の有効利用を目指し、課題に適した計算機資源の配分
- 将来計画
計算機資源
人材育成

1. 文部科学省
<http://www.mext.go.jp/>
2. 理化学研究所
次世代スーパーコンピュータ開発実施本部
http://www.nsc.riken.jp/index_j.html
3. 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト:
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>
次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
<http://www.nsc.riken.jp/p11.html>
4. 科研費特定領域研究
次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発
<http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~tokutei/>
5. 科研費特定領域研究
実在系の分子理論
<http://www.riron.moleng.kyoto-u.ac.jp/>
6. 科学技術振興機構
戦略的創造研究推進事業
<http://www.jst.go.jp/kisoken/>
シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築
CRESTプログラム、さきがけプログラムの混合型領域。
研究総括: 土居 範久
<http://www.simulation.jst.go.jp/>
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
研究総括: 矢川 元基
<http://www.multi.jst.go.jp/>
ナノテクノロジー分野別バーチャルラボ
<http://www.jst.go.jp/kisoken/nano.html>
7. 国際高等研究所フォーラム
「多階層連結コンピューティング」
8. 計算材料科学コミュニティー
9. スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
<http://icscp.jp/>
10. 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発
<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>
11. 計算物性科学WG
<http://mswg.issp.u-tokyo.ac.jp/>
12. 分子科学会
<http://www.molsci.jp/>
13. 分子シミュレーション研究会
<http://homepage3.nifty.com/mol-sim/main.html>
14. ナノ学会
<http://wwwsoc.nii.ac.jp/snano/>
15. 日本化学会 理論化学研究会
<http://www.qcl.t.u-tokyo.ac.jp/j-nihonkagakukai.html>
16. 日本化学会 情報化学部会
<http://cicsj.chemistry.or.jp/index.html>
17. 日本コンピュータ化学会
<http://www.sccj.net/>
18. 日本材料学会 分子動力学部門委員会
<http://md.jsms.jp/>
19. CACフォーラム(Computer Aided Chemistry Forum)
<http://www.cheminforavi.co.jp/cac/>
20. 近畿化学協会 コンピュータ化学部会
<http://www.kinka.or.jp/compchem/saishin.htm>
21. 企業研究会
<http://ns.bri.or.jp/main.php>
22. 新化学発展協会
<http://www.aspronc.org/>
23. APATCC (Asia-Pacific-Association of Theoretical & Computational Chemists)
<http://www.apatcc.org/>
24. 日本シミュレーション学会
<http://wwwsoc.nii.ac.jp/jsst/>
25. 地球シミュレータセンター
<http://www.es.jamstec.go.jp/index.html>
26. 国立情報学研究所
<http://www.nii.ac.jp/>
27. 量子化学研究協会 <http://www.qcri.or.jp>