

次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007  
2007年 10月3日: at 理研

パネルディスカッション 「継続的に発展する計算科学コミュニティのために」

## 物性研究所スーパーコンピュータ・ユーザーとして

### プロフィール



### 岡部 豊(おかべ ゆたか)

#### 【現職】

首都大学東京理工学研究科・教授

#### 【略歴】

東京大学理学系研究科・博士課程単位取得退学  
(理学博士)

東北大学理学部・助手

東北大学理学部・助教授

東京都立大学理学部・教授

# 計算物性物理コミュニティー

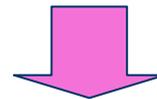
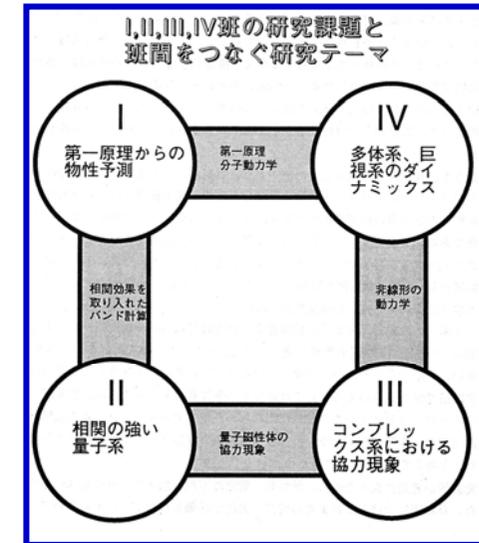
## 科研費重点領域研究「計算物理学 —物性研究における新展開—」

平成3年度(1991年度)～平成5年度(1993年度)

領域代表者 高山 一

### グループ構成

- 第1班 第一原理からの物性予測
- 第2班 相関の強い量子系
- 第3班 コМПレックス系における協力現象
- 第4班 多体系・巨視系のダイナミクス



## 東京大学物性研究所 共同利用スーパーコンピュータセンター

1995年稼動開始

共同利用委員会による運営

# コミュニティからの次世代スパコンへの期待

## 物性研究所におけるスパコンの運用体制

### 委員会の構成

スーパーコンピュータ  
共同利用委員会

{ 物性研究所内; 10名  
東京大学内; 5名  
東京大学外; 5名

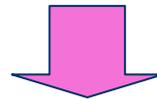
課題審査委員

{ 物性研究所内; 9名  
東京大学内; 12名  
東京大学外; 51名

### 研究課題分類

(サブコミュニティに対応)

- 第一原理計算
- (強)相関電子系
- スピン系、統計物理
- 複雑系、ソフトマター



## 「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針」に対する意見

東京大学物性研究所スーパーコンピュータ共同利用委員会  
計算物性物理連絡会

# 次世代スパコンおよび計算科学推進方策に関して

---

- 学術の長期的な発展に寄与する研究を重視
- 運営の透明性と公正性

- 計算機資源の配分
- 選定委員会と分野別審査委員会
- 課題の設定等
- 課題選定基準と事後評価
- 選定委員会と分野別審査委員会の役割
- 計算機システムへの要望
- 利用を促進する環境整備
- 国際交流
- 課金

# 計算物性物理

---

- 大規模計算
- アルゴリズム開発

## Monte Carlo 法

- N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)

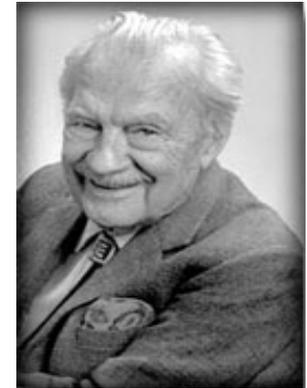


Slow dynamics の問題



## 新しいモンテカルロ法

- extended ensemble methods
- cluster algorithms



# NSFにおけるペタプロップスマシン利用のプロジェクト公募

---

## ACCELERATING DISCOVERY IN SCIENCE AND ENGINEERING THROUGH PETASCALE SIMULATIONS AND ANALYSIS (PetaApps)

---

Program Solicitation  
NSF 07-559



National Science Foundation

Office of Cyberinfrastructure

Directorate for Computer & Information Science & Engineering

Directorate for Engineering

Directorate for Geosciences  
Division of Earth Sciences

Directorate for Mathematical & Physical Sciences

Full Proposal Deadline(s) (due by 5 p.m. proposer's local time):

July 23, 2007

- 科学技術の最先端課題の解決をめざす提案に重点が置かれている
- ペタスケールコンピューティング環境を使うコミュニティを作ることが目的の一つ

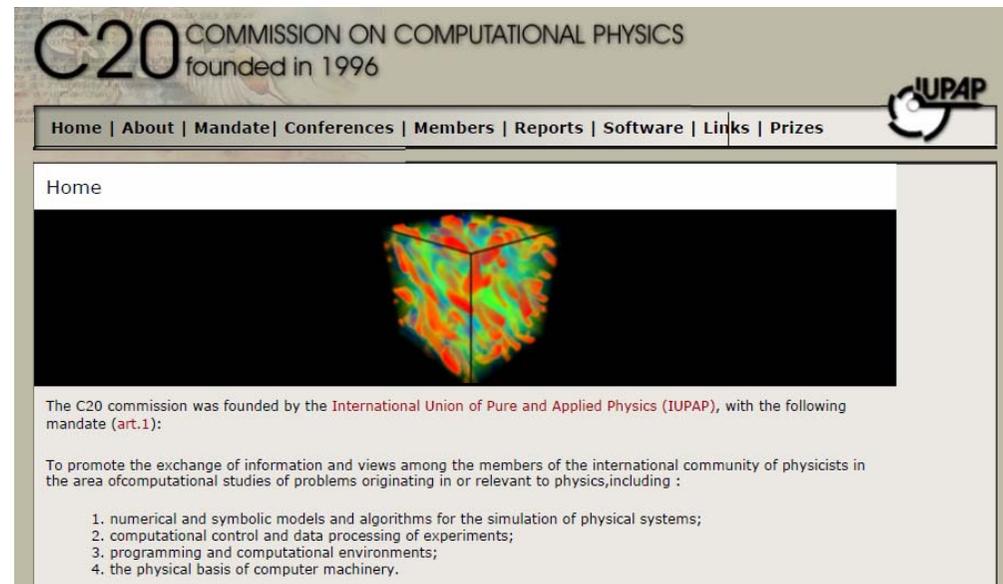
# 分野横断型科学としての計算科学・計算機科学

## IUPAP C20

International Union for Pure and Applied Physics  
Commission 20 (computational physics)

### 計算物理コミュニティー

素粒子・宇宙物理  
プラズマ・流体  
物性物理・統計物理  
ソフトマター・生物物理  
教育



**C20** COMMISSION ON COMPUTATIONAL PHYSICS  
founded in 1996

Home | About | Mandate | Conferences | Members | Reports | Software | Links | Prizes

Home

The C20 commission was founded by the International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP), with the following mandate (art.1):

To promote the exchange of information and views among the members of the international community of physicists in the area of computational studies of problems originating in or relevant to physics, including :

1. numerical and symbolic models and algorithms for the simulation of physical systems;
2. computational control and data processing of experiments;
3. programming and computational environments;
4. the physical basis of computer machinery.

# 人材育成に関するコメント

---

- 大学院教育
- 計算科学と計算機科学の連携
- スパコンのチューニング、アルゴリズム開発と研究との連携
- 人材サイクルとしての企業への期待