

## 第II部 継続的に発展する計算科学コミュニティ のために

### 1) 学問は継続的に発展しない

- ・地球環境の sustainability とは意味が違う

・質的に新しい可能性を誘起していく研究システムと  
環境

(より早い, より大きく, より精度が高く) のオリ  
ンピック競争だけでは不十分.

特定の研究コミュニティだけが関与するだけで  
はいけない(領域融合).

計算機を有効利用するための科学ではいけない(サイ  
エンスとしては本末転倒にならない).

- ・物質科学の分野で, 「物」と「シミュレーション」  
だけで良いのか? 概念, 論理構造, メカニズム等を  
重視したい.

- ・大きな分子の計算の行き着く先が，顕微鏡で見える世界ではつまらない。「見えないもの」を大切にしたい。計算機でしか到達できない世界が重要である。
- ・計算機が発達したおかげで可能になるサイエンスの分野を encourage したい。  
特に数学と非線形科学，大規模量子系，等。

- ・ 並列処理が真に重要である計算

例：マルチエージェントの非線形相互応答作用(会話型相互作用)，結合した自律分散系．

### 結合セルオートマトン (Cellular Automata)

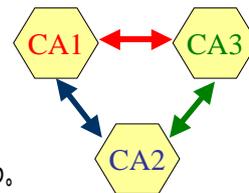
空間をセルと呼ばれる単位構造に分割して、セル同士の相互作用を繰り返す事で複雑な現象を再現する手法

時空間を離散的に取り扱う

セル間の局所相互作用をアルゴリズムとして表す

微分方程式では表現が困難な事象が容易に表現できる

結合セルオートマトン  
(Coupled Cellular Automata, CCA)

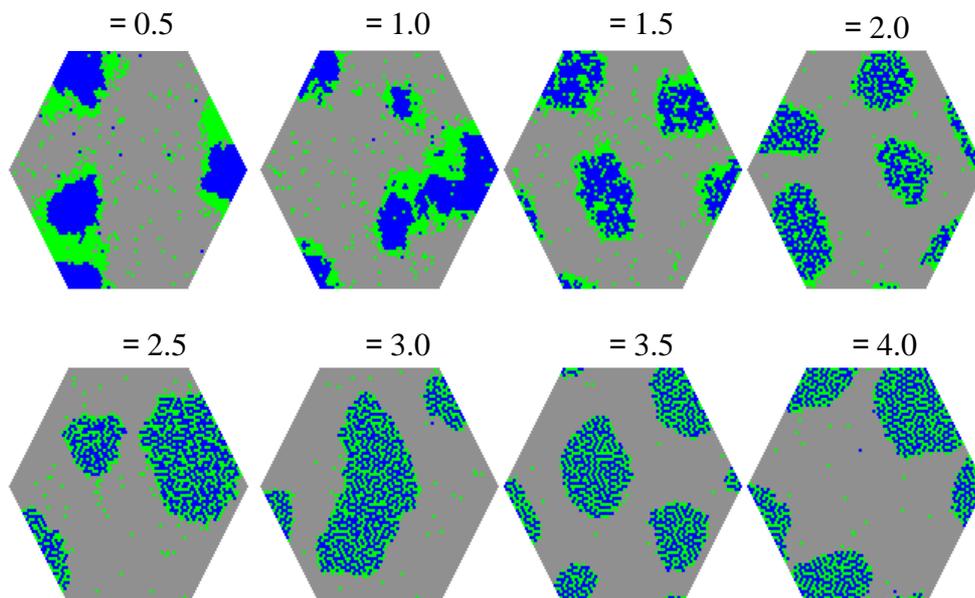


異なる要素や場を表す複数のCAを用意し、それらを通信により結合させて非線形相互作用を行う。

### 粒子分布 (2成分系)

t=1,000,000

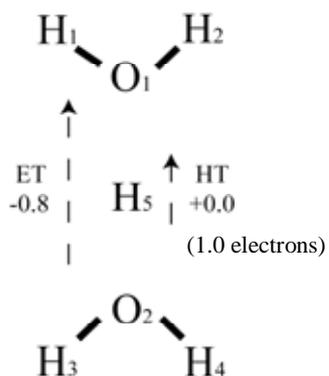
成分1  
成分2



- 個人的な期待

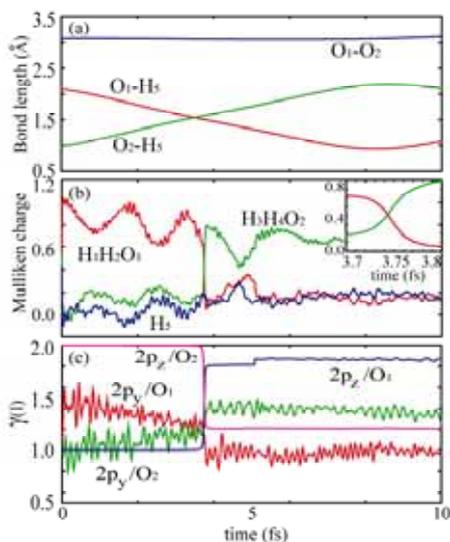
アト秒 ( $10^{-18}$ 秒) スケールの電子動力学 .

Sudden electron transfer associated with hydrogen-atom migration: Parallel transfers of electron and hydrogen-atom



Hydrogen atom forward transfer

Electron forward transfer



## 2) 次世代計算システムと教育

- ・理論化学・量子化学のコミュニティからの必要性  
計算機の使い方以前の問題として、理論をしっかり教育する必要がある(シミュレーション中心主義では危ない)。大学側の仕事。  
新計算システムの成果を踏まえて、全国の大学で、理論化学の担当者を増やす契機となるように期待したい。(物性物理学との違い)

- ・計算機利用環境の健全な階層構造の維持を大切にすべきである。

それぞれの研究室でのプログラム開発や小規模計算は、研究室ないしそのクラスターレベルで行なうことができるようになっている必要がある。

大学の計算センターの位置づけその存在価値は？

分子研程度の規模も必要(超大規模計算のベンチマークテストが出来る場も必要)。

- ・ハードウェアの開発に還元できる程度のソフト・理論研究開発力を持ったユーザーが常駐する組織が必要．システム・アーキテクチャの共同開発．
- ・高度な計算機の使い方（一般的なユーザではなく，学問分野と密着した使い方）として，全国的なレベルで短期の集中コースを設ける程度で十分．
- ・コンピュータには見向きもしなかった人々への教育・啓発システム，研究費支援．
- ・国際共同研究と人材養成（エジプトでの経験）
- ・申請プロジェクトを評価（査定）する学術的に非常に優れたチームが必要．評価チームに，「非申請者であっても，優れた潜在的ユーザに対して計算利用への招待を行なうことができる」権能をもたせたらどうか．（計算科学の掘り起こし）

- ・次世代計算システムから，小中学生を含む子供達への，研究成果の教育的発信の仕組みを作る．  
NASAのシステムが参考になろう．
- ・成長する計算システムの設計は可能か？ 計算機資源の教育現場への再利用は可能か？（省電力，省スペース）