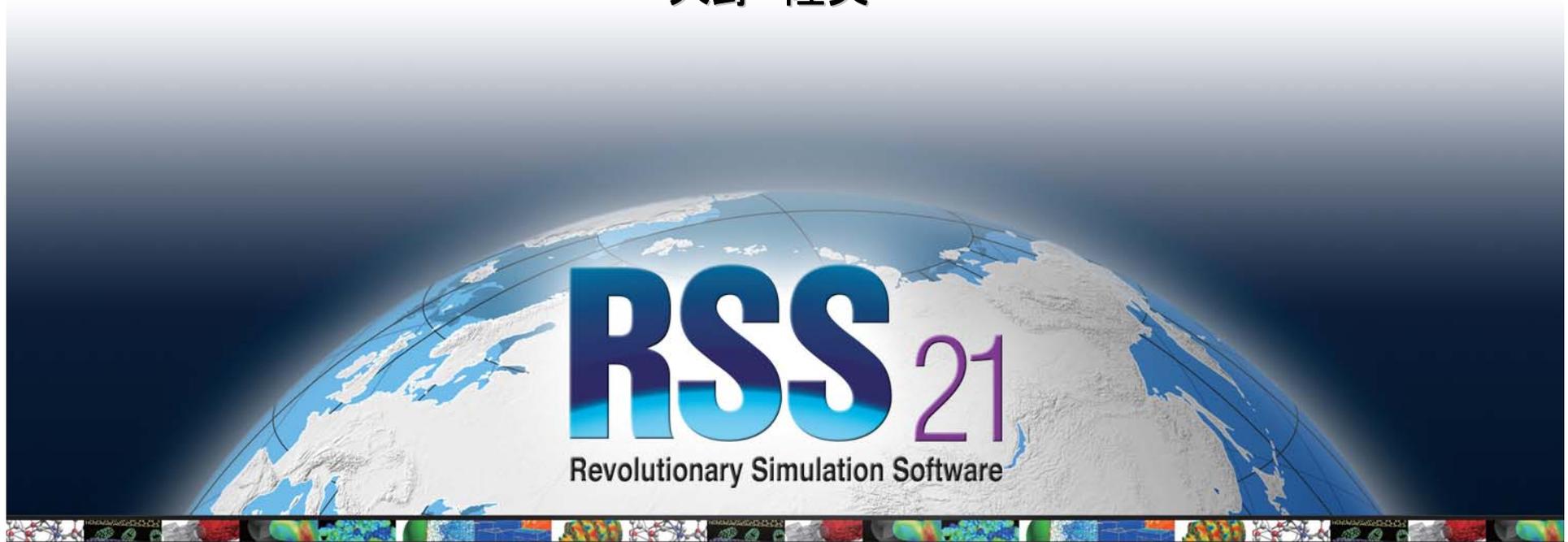


イノベーションの創出ー「革新的シミュレーションソフトウェア の研究開発」現場からー

ナノシミュレーション

物質・材料研究機構 計算科学センター
大野 隆央



ナノシミュレーション統合環境: Chase-3PT

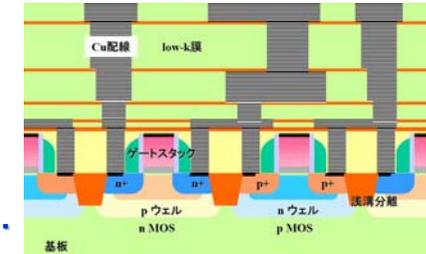
物質・材料分野

ナノ構造、ナノ複合体

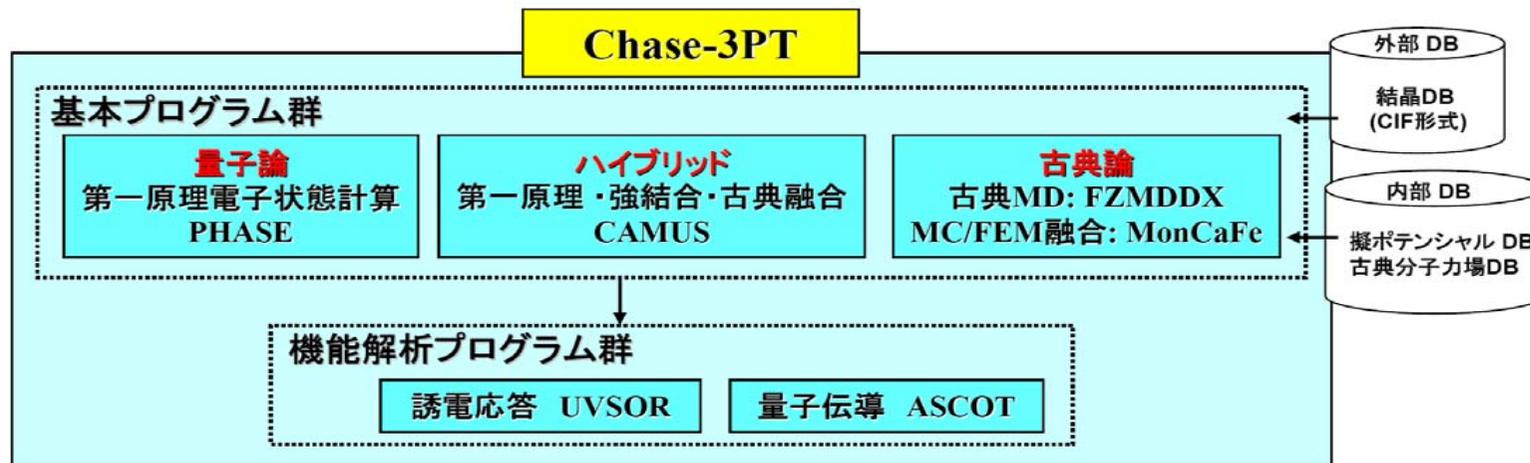
ナノ物質の創成・制御、機能の解析・予測

- 量子論的解析: 第一原理手法、構造解析、反応予測...
- 物性・機能予測: 誘電・磁気・光学特性、伝導特性、機械的特性...
- 大規模解析: マルチスケール手法
- 電子相関解析:
- 最適化問題:

半導体デバイス



革新プロ: ナノ物質シミュレーションのための基盤ソフト構築



革新プロ： 研究成果

研究成果 ナノ物質シミュレーション基盤の構築

戦略的ソフト開発：

最先端計算科学手法・ソフトの開発

中核拠点形成による効率的・集中的な開発

実証計算： 産業的・学術的インパクトのある実証計算

人材育成： 中核拠点で先端的ソフト開発研究者の育成

ES利用： ソフト性能向上、多くのプラットフォームに対応

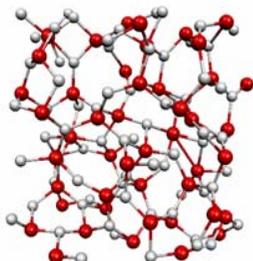
革新プロ： 研究トピックス

■ CMOSデバイス

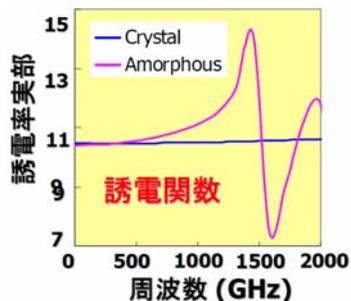
PHASE, UVSOR



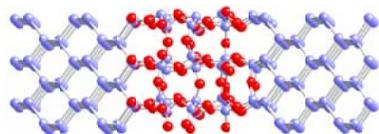
High-k材料



誘電関数

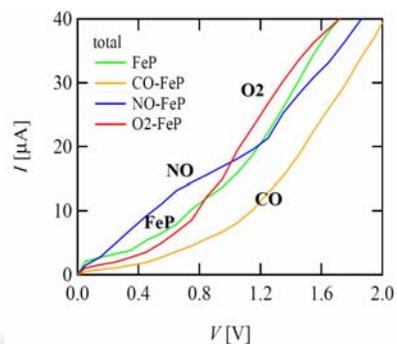
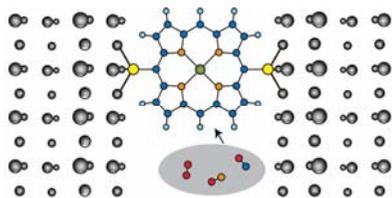


リーク電流 ASCOT



■ 分子センサー

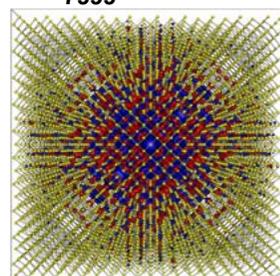
ASCOT



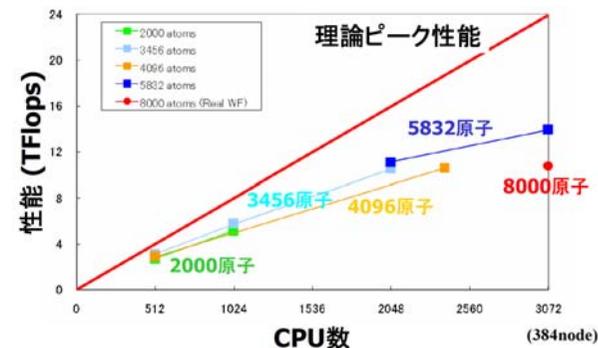
■ PHASE大規模解析 (地球シミュレータ)

PHASE

Si₇₉₉₉As



5.4nm



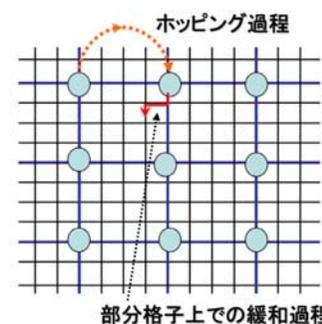
5832原子: 13.9TFlops (58%)

8000原子: 10.8TFlops (45%)

■ マルチスケール解析

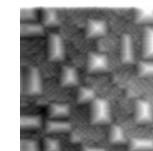
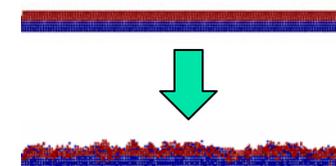
CAMUS, MonCaFe

MonCaFe (Monte Carlo + FEM)



Ge4層/Si(001)

T = 500Cで、0.1 μ秒加熱



革新プロ： 研究成果

研究成果 ナノ物質シミュレーション基盤の構築

戦略的ソフト開発：

最先端計算科学手法・ソフトの開発

中核拠点形成による効率的・集中的な開発

実証計算： 産業的・学術的インパクトのある実証計算

人材育成： 中核拠点で先端的ソフト開発研究者の育成

ES利用： ソフト性能向上、多くのプラットフォームに対応

課題点・今後の問題

プログラムの継続的な維持・機能拡張

プリ・ポスト処理、詳細解析・物性解析ツール、可視化ツールの充実

ナノ物質の物性・機能の予測能力の更なる向上 (革新的機能の探索)

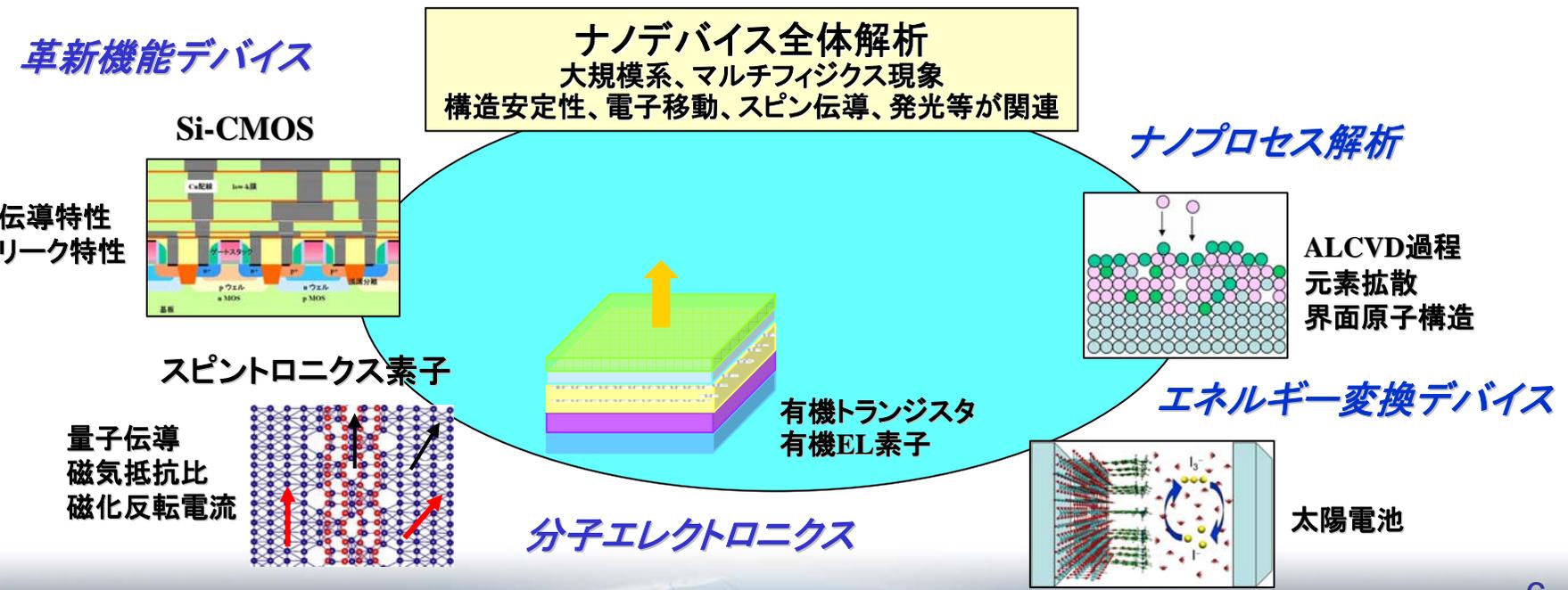
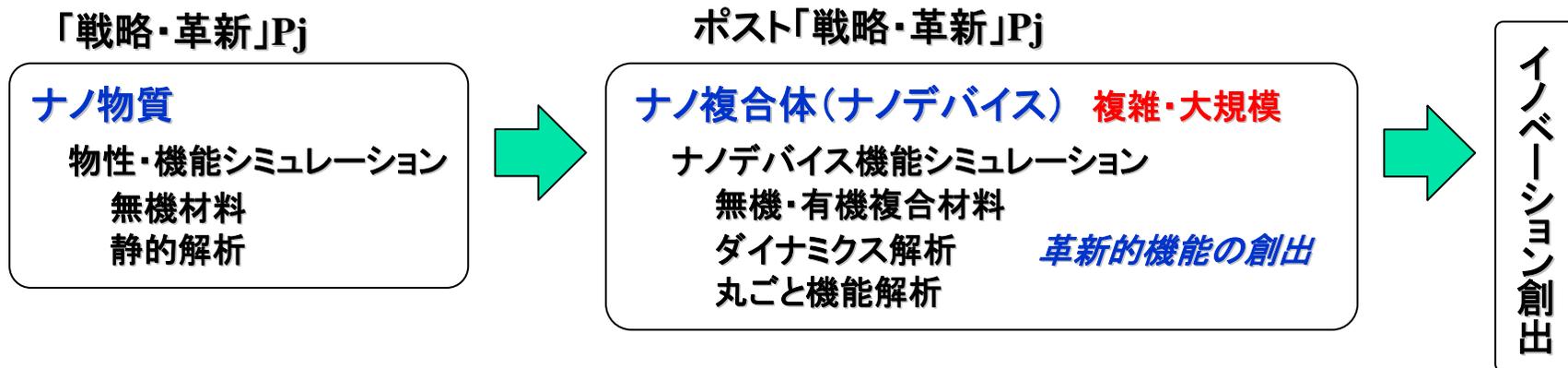
ナノ複合体の物性・機能予測 (丸ごと機能解析)

実証計算の充実

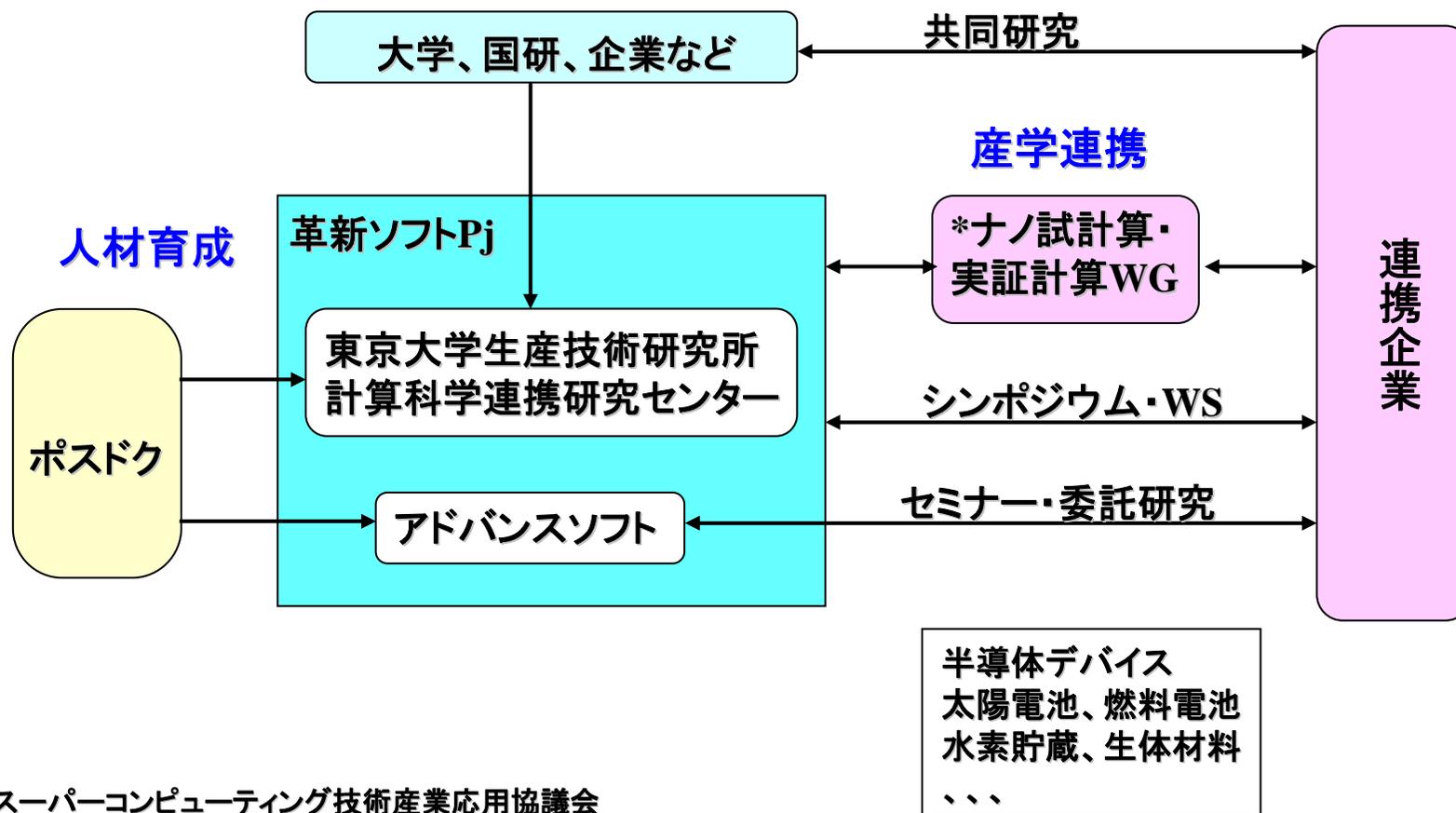
ソフト開発ノウハウ・人材の活用

計算機科学との連携(次世代スパコン)

革新プロ後の新展開の必要性



革新プロ： 研究開発体制



*スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
先端ソフトウェア産業応用部会 試計算・実証計算WG

成果の産業への普及

手法開発（ソフトウェア）

ナノ物質の物性・機能の予測能力の更なる向上（革新的機能の探索）

ナノ複合体の機能予測（丸ごと機能解析）

汎用&カスタマイズ（例えば、スピントロニクス、ALE）

プリ・ポスト処理、詳細解析・物性解析ツール、可視化ツールの充実

テキスト・マニュアル類の整備

実証計算

ナノ複合体(デバイス)機能の予測

産学連携の推進： ナノWGの強化（ナノ産業活用共同体？）

モデリング・実験検証での協力、技術移転の推進（人材育成）

知見の集約と活用： 計算結果のアーカイブと再利用の推進（成果の普及）

ソフト開発・設計へのフィードバック

次世代スパコン利用（ハードウェア）

超々並列計算機、マルチコアプロセッサへの対応

計算機科学との連携

気軽に利用できる環境の提供

人材育成

手法・ソフト開発、実証計算により、産学の計算科学を推進する人材育成

人材活用： 専門分野、産学の融合する新領域の醸成

教育の場での活用、講習会などによる普及

継続的ソフト開発の基盤