

## 分科会D

### 「計算科学者、計算機科学者、実験研究者 および産業の接点と人材育成」

- モデレータ      平田文男(分子研)
- 実験研究者      潮田資勝(物材機構)、青野正和(物材機構)、  
栗原和枝(東北大学)
- 産業              高田 章(旭硝子中研)、兵頭志明(豊田中研)、  
金田千穂子(富士通)
- 計算機科学      佐藤三久(筑波大計算センター)、押山 淳(東大工)
- ナノ拠点における人材育成  
岡崎 進(名古屋大)

## 「ナノ統合拠点」のミッション

次世代スパコンの性能を最大限に活かしてナノ分野の「グランドチャレンジ課題」を解決する方法論およびアプリケーションの開発

### ナノ分野のグランドチャレンジ課題

- (1) 次世代ナノ情報機能・材料
- (2) 次世代ナノ生体物質
- (3) 次世代エネルギー

上記のミッションの遂行を通じて

「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業の接点と  
人材育成」

を進める。

## 「ナノ統合拠点」における

### 「計算科学者、計算機科学者、実験研究者および産業の接点と人材育成」の取り組み

- (1) 分子科学、物性科学ワーキンググループ  
計算科学者、実験研究者との連携、共同研究の推進  
特に、ナノ分野の実験研究者との連携
- (2) プログラム高度化ワーキンググループ  
計算機科学者(理研、筑波)と連携して、超並列に対応するプログラムの高度化を推進
- (3) ナノ設計実証  
企業研究者との連携推進
- (4) 次世代ナノアプリケーション連携ツールの開発  
「中核アプリ」を任意に連結してナノ分野のグランドチャレンジ課題を解決するツール群の開発
- (5) 「次世代スパコン」の有効利用に向けての取り組み  
神戸センターを有効に活用するシステムの提案および人材育成

## 議論のまとめ — どのような人材が必要か(1)

### 実験研究者の立場から

- ・多様な現象、個別の課題、とても複雑という特徴
- ・実験だけでもだめで、計算だけでもだめ — 連携、協力の必要性
- ・物質をよく理解している計算科学者あるいは計算のできる実験研究者を育成していく必要
- ・実験研究者の中から計算のできる人を育てていく

### 産業の立場から

- ・製品開発が目的 — さらに複雑な系、時間的制約が大
- ・単一の方法論を深く掘り下げるよりは、複数の方法論を組み合わせて上手にやっけていける人が必要
- ・工学的センスを持った計算科学者が必要
- ・工学部にシミュレーションを学ぶ専攻を
- ・インターンシップ制度の充実とその利用

## 議論のまとめ — どのような人材が必要か(2)

### 実験研究者の立場からと産業の立場からの共通事項

- ・black boxとして使うだけでなく、自分でプログラムの作れる人
- ・専門性を備えた人 — 計算と物質の両方
- ・問題設定のできる人、それを計算科学的に咀嚼して方法論を選ん  
でいける人
- ・“計算のできる人”ではなく、“計算を使って本質の見抜ける人、概  
念、理論の作れる人”

### 計算機科学の立場から

- ・ニーズに根ざした新しいテーマ
- ・すでに、中核アプリ6本の高度化に着手
- ・RSDFT、3D-RISMの事例
- ・計算と物質の両方の教育の必要性 — デュアルディグリーの制度
- ・ペタは従来のスパコンとは全く異なる計算機であるという認識が必  
要で、これを使いこなせる人
- ・キャリアパスになり得るかという問題

## ナノ分野拠点における人材育成に向けた構想 — 実践的育成

### (1) 若手研究者の育成 — 理論・方法論、ソフト開発、サイエンス

- ・若手グループリーダー 独立研究グループの形成
- ・若手研究者 ポスドク、大学院生等の研究参加

### (2) 技術者の育成 — 超並列、高速化、連携技術

- ・計算科学と計算機科学の中間
- ・アプリケーションに近い計算機科学者あるいは計算機科学に近い計算科学者

### (3) ユーザの育成 — 実験研究者・企業研究者

- ・共同研究体制
- ・研究会、講習会、集中セミナー

### (4) 大学との連携