

# 分科会A: 新物質・エネルギー創成

モデレーター: 押山淳

パネラー: 常行真司(物性科学の立場から)、岡崎進(分子科学の立場から)、  
天能精一郎(量子化学分野では)、森川良忠(材料・電池分野では)、  
高橋大介(計算機科学の立場から)

- **ペタコンによるブレークスルー**
  - 科学、工学のブレークスルー? 計算にしかできないこと、計算が大きな寄与をすることは?
- **計算科学と計算機科学との共同**
  - 超並列アーキテクチャを使いこなすには? ! Face to face の重要性、課題の具体化、双方にとってbenefit
- **計算科学の異分野間での共同**
  - 共通の数理は? 新たな発展、共同研究のチャンス
- **若手の人材育成**
  - 学際的な人材を育てる教育、神戸をハブに、キャリアパスの創出
- **産業界との連携**
  - 計算の重要性、人的交流

# 分科会A／戦略分野2の多様性と広さ

広範な領域をカバー：物理学、化学、材料科学、生命科学、それらの応用、エネルギー工学、電気・電子工学、ナノサイエンスとテクノロジー、、、

## 科学研究費補助金における各戦略分野の課題採択件数

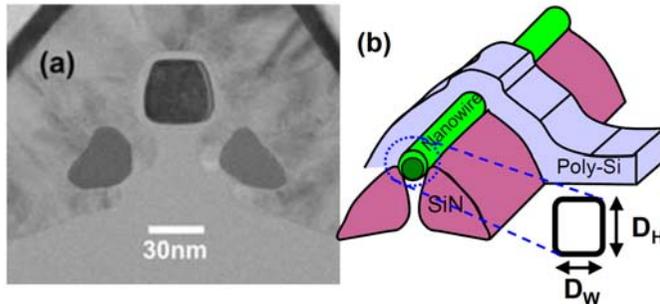
|      | 特定領域(2002以降) |           | 新学術領域 |           | 合計   |           |
|------|--------------|-----------|-------|-----------|------|-----------|
|      | 領域総数         | 計算科学関連領域数 | 領域総数  | 計算科学関連領域数 | 領域総数 | 計算科学関連領域数 |
| 第1分野 | 46           | 10        | 17    | 6         | 63   | 16        |
| 第2分野 | 32           | 19        | 8     | 4         | 40   | 23        |
| 第3分野 | 3            | 2         | 5     | 3         | 8    | 5         |
| 第4分野 | 11           | 3         | 4     | 0         | 15   | 3         |
| 第5分野 | 8            | 1         | 4     | 1         | 12   | 2         |

## JST大型プロジェクト(CREST,ACT-JST,さきがけ)における各戦略分野の課題採択件数

| 分野<br>1 | 分野<br>2 | 分野<br>3 | 分野<br>4 | 分野<br>5 |
|---------|---------|---------|---------|---------|
| 21      | 38      | 13      | 7       | 1       |

# 次世代コンピュータでのブレークスルー I

RSDFT(実空間密度汎関数法)次世代半導体チャネル構造のIV特性 (押山)

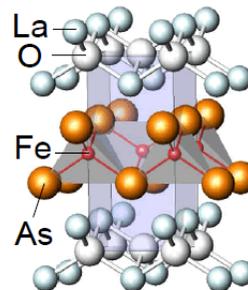


(東工大岩井グループ)

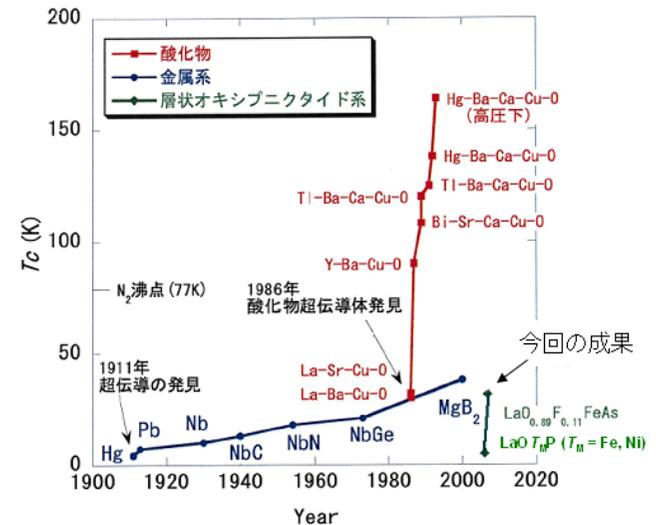
10nm直径、10nmゲート長のシリコンナノワイヤーFET(数万原子群)のIV特性を第一原理から推定可能

高温超伝導体の探索: 網羅的物質探索 (常行)

物理の理論の進展により超伝導転移温度を、かなり定量的に予測可能になってきた  
⇒ 数千の物質群に対して探索可能



(東工大細野グループ)



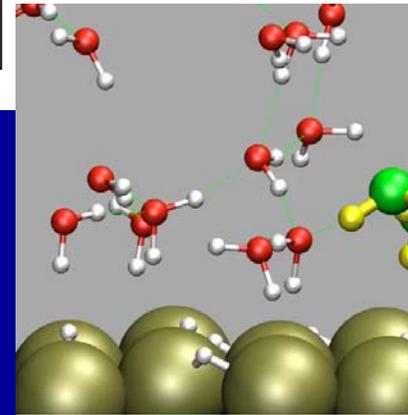
# 次世代コンピュータでのブレークスルー II

DFT計算による3Eのトリレンマの解決 (森川)

**Economy, Energy, Environment**

の間の矛盾解決は、電池電極反応の解明と最適材料の探索

⇒ 第一原理計算による界面(気相固相、気相液相)反応の解明、最適不均一触媒

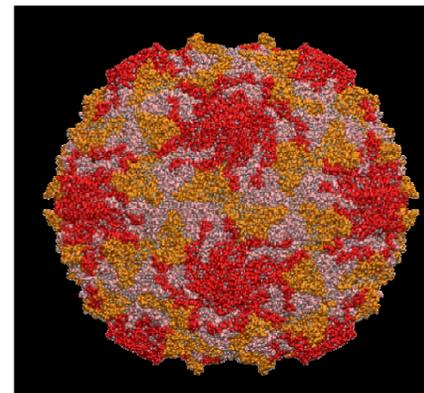


数百原子・分子群の  
長時間MD  
シミュレーションを  
いくつものケースで

階層的な手法により分子機能予測、ウイルス全原子シミュレーション(岡崎)

量子化学⇔分子シミュレーション⇔化学統計力学⇔反応動力学

ウイルスと抗ウイルス剤の結合による不活性化、抗体との特異的反応を、1000万原子系に対する全原子MDで解析：1ペタフロップスを3ヶ月動かすとマイクロ秒のダイナミクスを追跡可能



小児マヒウイルスの  
カプシド

# 次世代コンピュータでのブレークスルー III

量子化学計算による分光学的精度の達成 (天能)

化学的精度 (数 kcal/mol = ミリE<sub>h</sub>) と分光学的精度 (1 cm<sup>-1</sup> = 数 マイクロE<sub>h</sub>)  
高精度電子相関理論に加え、分子振動や相対論的な効果を考慮する必要

最先端の電子状態理論で実現可能な計算精度

非相対論的な厳密解 (フッ化水素)

高精度計算            -100,4571 E<sub>h</sub>

実験値                 -100,459 E<sub>h</sub>

全エネルギーで5桁以上正しい化学的精度が可能。

最も正確なベンゼンの二次摂動エネルギー

高精度計算            -231.8535 (8) E<sub>h</sub>

全エネルギーで7桁の精度。

次世代スパコンでは、相対論的な効果も入れて実験に  
匹敵する分光学的精度の計算が可能？

# 計算科学と計算機科学の共同 I

H23年度: 次世代機稼動(8万ノード以上、64万コア以上)  
Cell, GPGPU などの導入  
MPI, OpenMP, SIMD

(高橋)

## ➤ RSDFTプログラムの高速化

- RSDFTでは直交化が多くの計算時間を占めている.
- オリジナルのコードでは, 古典Gram-Schmidt直交化をLevel-1 BLAS (内積計算およびベクトル変換)により計算.
- これをLevel-3 BLAS(行列-行列積)に帰着させるアルゴリズムを開発したことで, 性能が大幅に向上.

## ➤ 3D-RISMプログラムの高並列化

- 3D-RISMでは並列3次元FFTが多くの計算時間を占めている.
- オリジナルのコードでは3次元のデータのうち, 1次元方向のみを分割して並列3次元FFTを計算.
- 2次元分割による並列3次元FFTを新たに開発することにより, プロセッサ数が増えた場合でも実行可能になった.
- さらに全対全通信のオーバーヘッドも小さくなることでスケーラビリティが向上.

# 計算科学と計算機科学の共同 II

## ➤ 共同が成功するためには

- 同じ場所でのface to face の付き合いが大事(高橋、押山)
- 計算機分野での常識を知る機会が欲しい(岡崎) [e.g. BLAS1 とBLAS3?]
- 計算科学分野での現在のボトルネックが知りたい(田辺)
- Lattice QCDでの事例:両者を結びつける仲人、通訳が大事(小柳)
- 並列アーキテクチャ用のチューニングにもいろいろなレベル。それを区別して、それぞれのレベルでの共同が大事(朴)
- 緊密な議論の後に、計算機側の人がコーディングする可能性(平尾)
- . . . . .

具体的なターゲットに対しての日常的な交流・共同が大事  
⇒ そうした共同の場としての神戸の計算科学研究機構の重要性

## 共同の場での異分野間の交流

lattice QCDでのひとつの解法は、工学系での手法を流用(小柳)  
次世代機あるいは神戸の機構をひとつの契機、チャンスとして  
共同研究が始まることを期待！

# 若手の人材育成

## ➤ 大学院生、若手研究者、社会人の教育

- 新たなタイプ(マルチな才能)の若手の出現を期待したい。計算科学、計算機科学の双方に対する視野と知識: 制度的にどのようにしたらよいか

事例: 筑波大学デュアル・デグリー制度 (例えば物理の博士、情報の修士)

⇒ 計算科学研究機構での全国的な展開を期待

- 各分野でこうしたマルチな若手をリスペクトすべき

## ➤ ポスドクのキャリアパス

- 現状についての切実な訴え、理系のポスドク問題の深刻さ、特にプログラム開発に携わる若手の評価、そしてキャリアパス

- アカデミアだけでは吸収できない

⇒ 産業界での受け皿を作ることができるか

産業界にとって有用な計算科学/計算機科学の活用の道

潜在的にはプロミシング: ITRS..40% cost reduction

簡単ではないが、分野が持続して発展するためには不可欠!