

新学術領域研究(平成22年度一平成26年度)

コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス

物質デザイン ⇔ 基礎物性科学

マテリアル・サイエンス
物質科学

コンピュータ・サイエンス
計算機科学

領域代表者: 押山 淳 (東京大学大学院工学系研究科)

新学術領域研究(平成22年度ー平成26年度)

コンピューティクスによる物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス

物質デザイン ⇔ 基礎物性科学

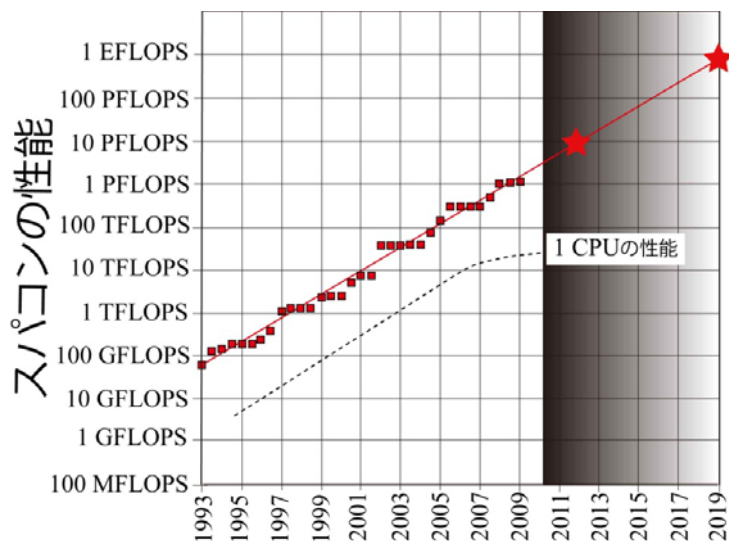


コンピューティクス

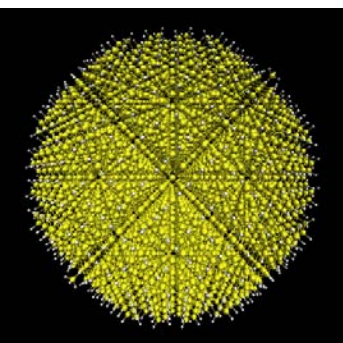
領域代表者: 押山 淳 (東京大学大学院工学系研究科)

コンピューティクス:物質科学と計算機科学の融合

激変するコンピュータ



- ✓ ひとつの演算コアの能力は飽和
Mooreのスケーリング則の破綻
- ✓ 次世代スパコンでの階層的超並列
アーキテクチャ
神戸次世代: 8万CPU x 8演算コア
- ✓ 次々世代では加速ハード装置が導入
スパコンは 異次元の装置



✓ Si ナノドット(1万原子)に対するReal Space (RS) DFT計算

岩田、高橋、押山他: J. Comp. Phys (2010)

新アルゴリズム開発、メモリ転送、CPU間通信、、、

計算物質科学と計算機科学との緊密な共同が不可欠

- ハードウェアに即した数理手法の開発
- 演算・メモリー・ネットワークに関する深い知識を用いた
並列高性能化

コンピューティクス:物質科学と計算機科学の融合

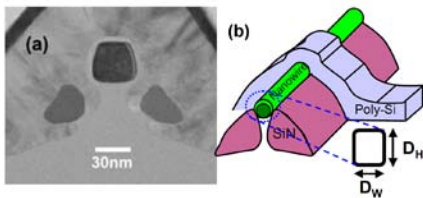
Mathematics に加えて
Computics が
物質科学の新たな方法論に

複合相関と非平衡ダイナミクス

精度

量子力学的多体問題解法へのチャレンジ
と新量子相(強相関電子系、超伝導相、
励起状態、)の予測

次世代ナノワイヤートランジスタ



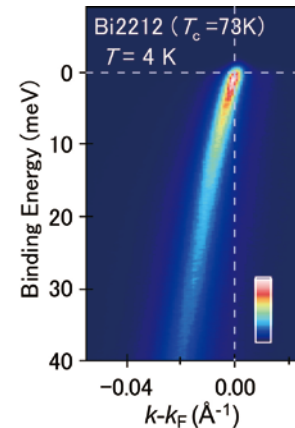
室温動作量子効果は?

より大規模系を:
ナノ構造は
10万原子世界

空間

時間軸の物質デザイン

- ✓ 時間分解高精度
光電子分光
- ✓ 光誘起機能発現
(光スイッチ)
- ✓ 生体反応の量子論



電子遷移の
サブフェムト秒から
原子移動のナノ秒まで

熱と流れの量子科学

- ✓ 電流、熱流、スピン流

時間

有機的連携を目指す研究組織

物質デザイン: 複合相関と非平衡ダイナミクス

A02 ナノ形状と機能の量子論
押山、平山

A03 強相関・非平衡の科学
今田、藤森、辛

A02 熱科学とダイナミクス
常行

総括班
共同の推進
手法・数理構造・コード
領域アドバイザー
寺倉清之、塚田捷、藤原毅夫
小柳義夫、飯島澄男

A03 統一理論による相関と伝導
高田、秋光、上田、廣井、春山

A02 非平衡ナノ伝導ダイナミクス
渡邊、酒井

A03 スピントロニクス材料探索
佐藤、野崎、黒田、朝日、鈴木

A02 プロトン・ミュオンの
量子ダイナミクス
中西、Wilde、福谷

A02 タンパク: 構造と反応探索
倭、足立

公募研究
実験による検証、新たな計算手法

A01 多重階層アーキテクチャ対応
高性能コンピューティング
稲葉

A01 超並列アーキテクチャ
数値計算アルゴリズム
高橋

A01 超大規模線形方程式
解法開発
張

コンピューティクスの確立

次世代スパコン戦略機関との共同

分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤

分野2 新物質・エネルギー創成

計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

分野3 防災・減災に資する地球変動予測

分野4 次世代ものづくり

分野5 物質と宇宙の起源と構造

様々なフェーズでの協力:

数理手法、計算手法、アルゴリズム、プログラミング、コードチューニング、、、
さらには、学際領域の科学への展開

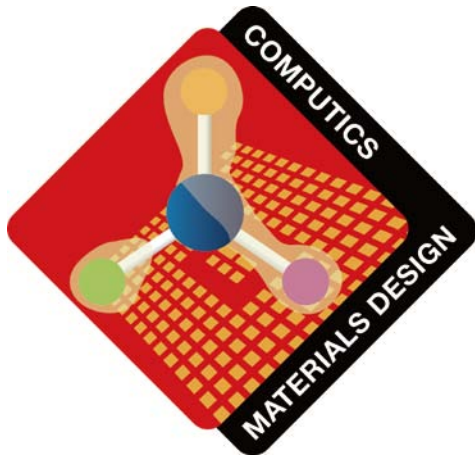
コンピューティクスによる物質デザイン： 複合相関と非平衡ダイナミクス

- 物質科学とコンピュータ・サイエンスの融合による、「コンピューティクス」学術分野を、世界に先駆けて確立
- 複合相関と非平衡ダイナミクスの解明と、物質デザイン、そして基礎物性科学のフロンティアを拡大

経験的
物質デザイン

コンピューティクス

演繹的
物質デザイン



ホームページ: <http://computics-material.jp/>