

物性、分子、材料科学の立場から

常行真司

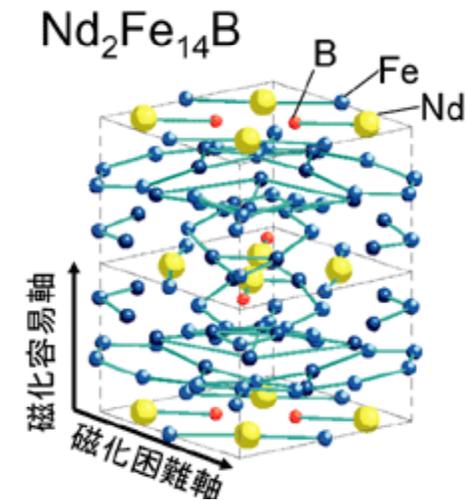
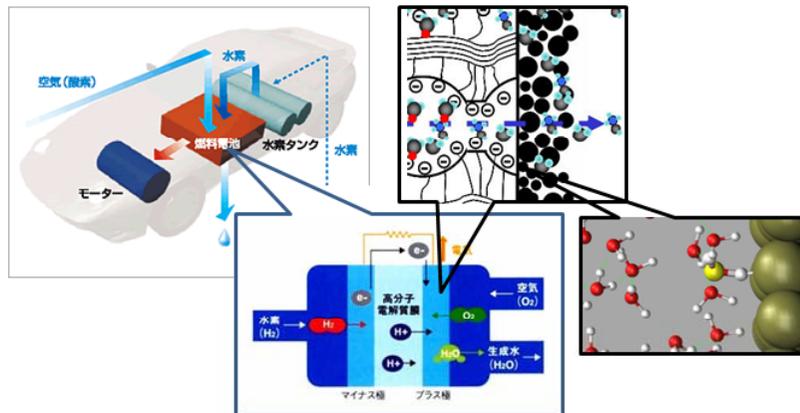
(東大・院理／物性研／第2分野戦略機関CMSI)



計算物質科学イニシアティブ

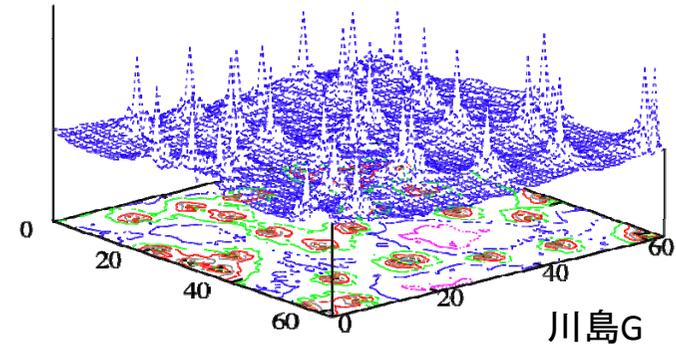
社会的課題

- エネルギー変換・貯蔵
 - 燃料電池, 太陽電池, 熱電変換
 - 2次電池, 水素貯蔵材料
- エネルギーの効率的利用
 - 低消費電力デバイス
- 元素戦略
 - 磁石
 - 触媒
 - 構造材
 - 電子材料



学問的課題

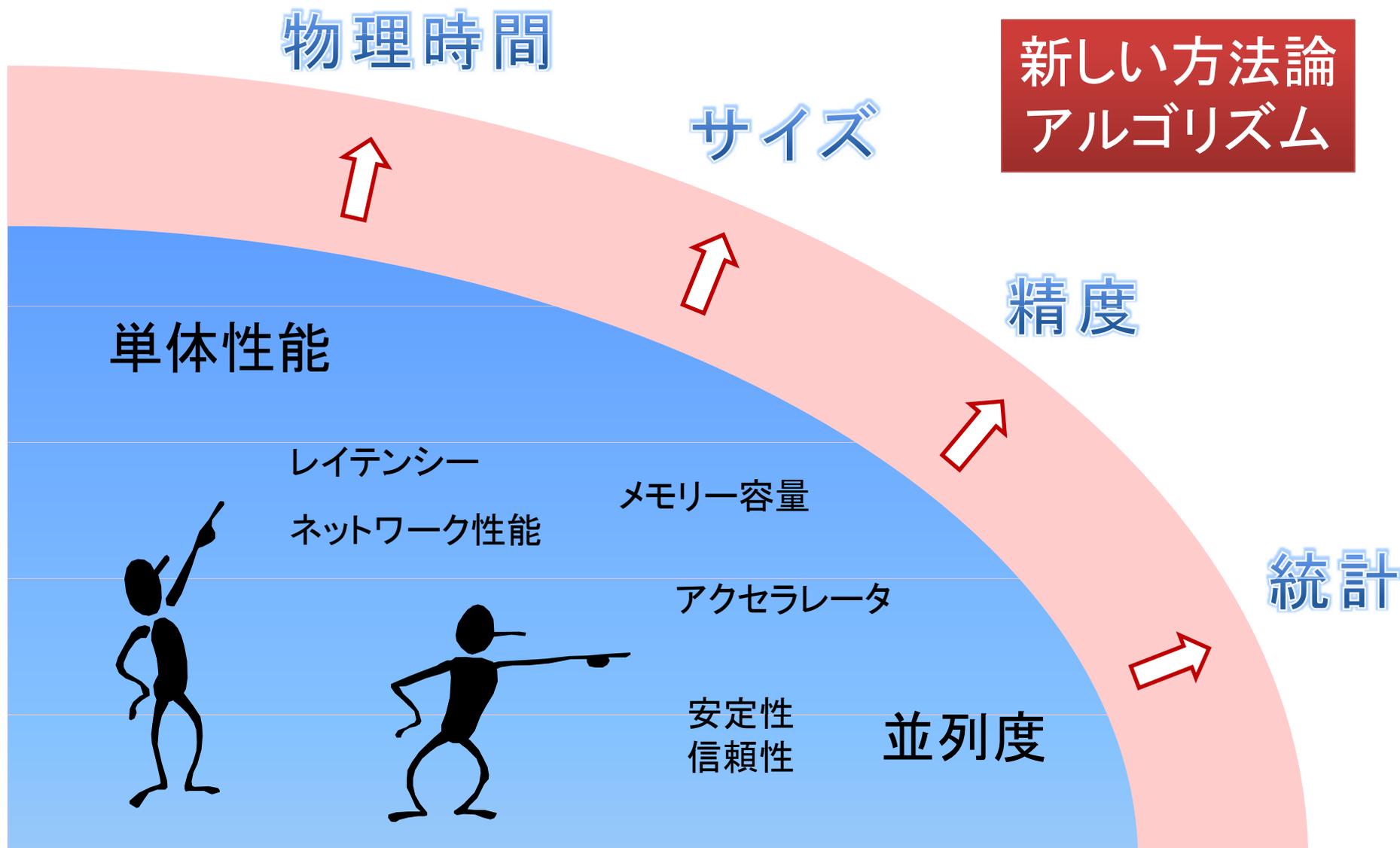
- 相関の強い量子系の物理
 - 非フェルミ液体, 重い電子系,
スピン液体, BEC,
非従来型高温超伝導など



- 溶液中や固体表面の化学反応, 触媒反応
- 励起ダイナミクス, 非断熱ダイナミクス
- 多成分系の構造・組織形成・相図

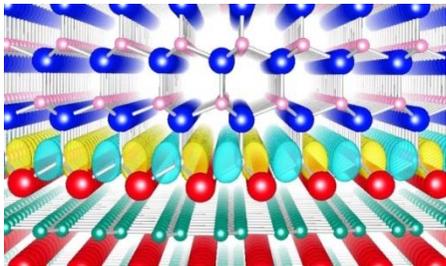


必要とされるシミュレーション技術

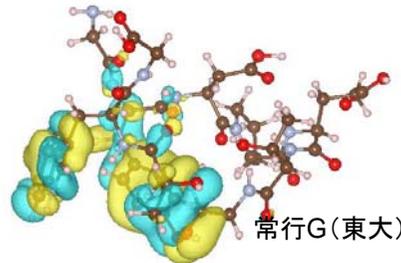


まとめ(1)

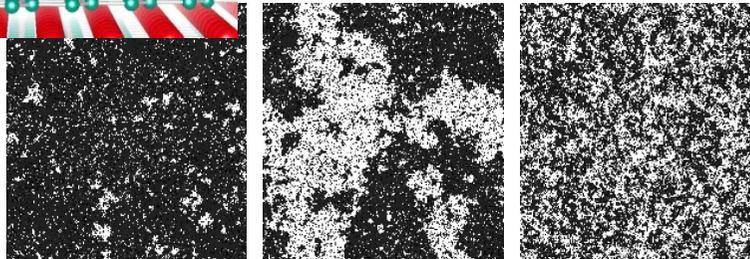
- 物質科学のシミュレーションは、定性的な現象解明から定量的なマテリアルデザインの時代へ
- 目的に応じて異なる近似レベル, 異なる基礎方程式
- ‘Heroic Computing’, ‘Capacity Computing’
どちらも重要



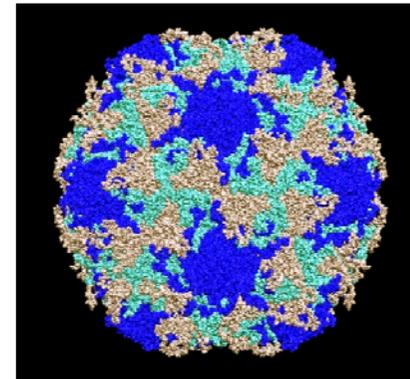
常行G(東大)



常行G(東大)



藤堂G(東大)



岡崎G(名大)

まとめ(2)

- 新しい方法論, アルゴリズム開発の必要性
 - ストロングスケーリングで性能を出したい場合が多い
 - アプリ側が「したいこと」
ハード側が「できること」,
協力すれば「できるかもしれないこと」
の情報共有が必要