

次世代の情報基盤における計算基盤 (とくにフラッグシップ計算機) の役割 ～ユーザの立場から～

常行真司

東京大学・大学院理学系研究科/東京大学・物性研究所 (兼務)

HPCI戦略プログラム(2016.3終了)
分野2：新物質・エネルギー創成(CMSI)
統括責任者

ポスト「京」重点課題(2020.3終了)
重点課題7：次世代の産業を支える
新機能デバイス・高性能材料の創成
(CDMSI) 課題代表者

HPCIコンソーシアムの提言(2020)より

フラッグシップ計算機は・・・

HPCI High Performance
Computing Infrastructure

- **重要な研究基盤**
画期的な成果を創出するためには、
集約的に開発・整備すべき
- 調達が不可能なこと、アプリケーションとの協調開発が必須なことから、独自開発が必要
- **開発した技術や商用機の普及、商用アプリケーションの移植性**にも十分に配慮して開発を進めるべき

【提言】今後の HPCI システムの構築とその利用に関する
基本的な考え方について

令和2年6月

一般社団法人 HPCIコンソーシアム

【提言】今後のHPCI システムの構築とその利用に関する基本的な考え方について（令和2年6月 一般社団法人 HPCI コンソーシアム）

研究分野：電子論に基づく材料・デバイス研究

原子・電子の基礎方程式

電子状態の方程式

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r, t) \right] \varphi_i(r, t) = \varepsilon_i(t) \varphi_i(r, t)$$

The Nobel Prize in Chemistry 1998



Walter Kohn John A. Pople

原子の運動方程式

$$M \frac{d^2}{dt^2} R(t) = -\nabla E(R(t))$$

The Nobel Prize in Chemistry 2013



Martin Karplus Michael Levitt Arieh Warshel

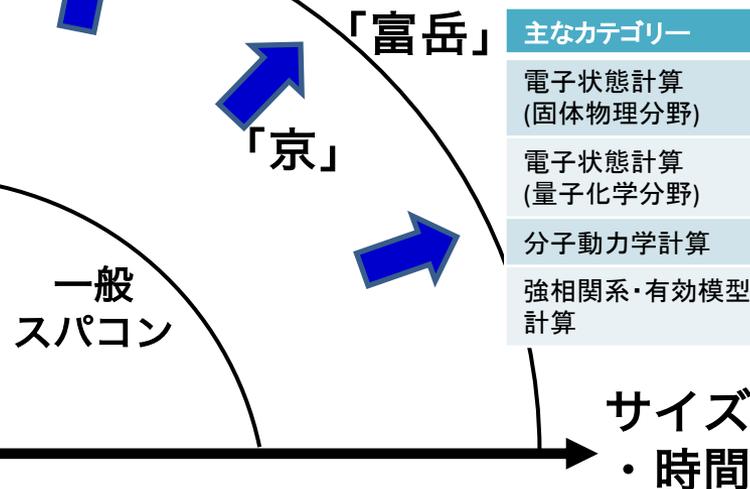
第一原理計算手法は材料特性を理論的に予言可能

「京」「富岳」による進展

- ◆精度と規模の計算領域を拡大
- ◆大規模超並列プログラムを開発

精度

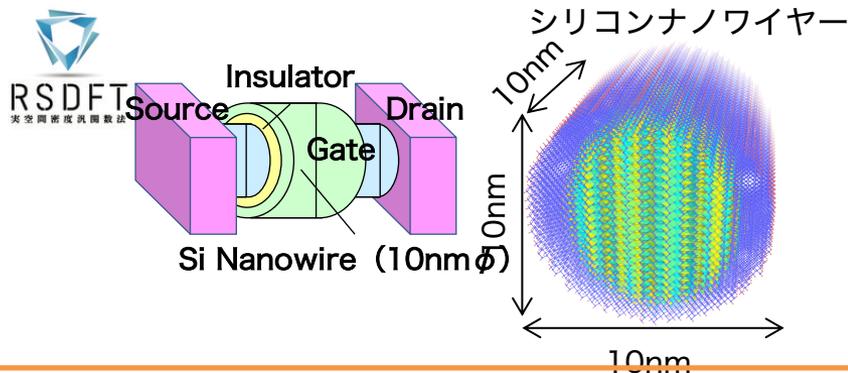
(戦プロ分野2、重点課題7)
広範な物理をカバーする
物質科学計算アプリ群を開発



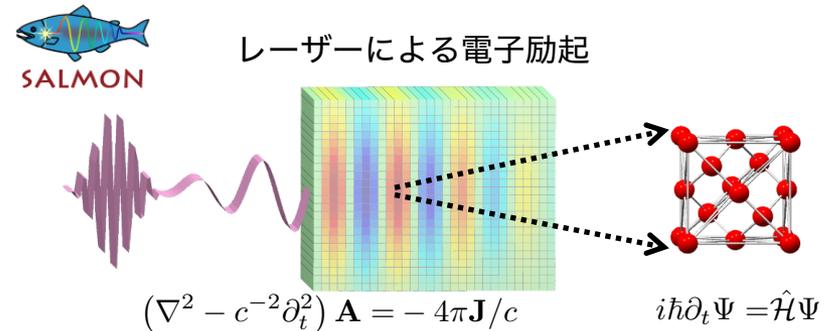
研究基盤としての重要性 (1)

最先端の計算基盤が牽引する新しいシミュレーション技術開発

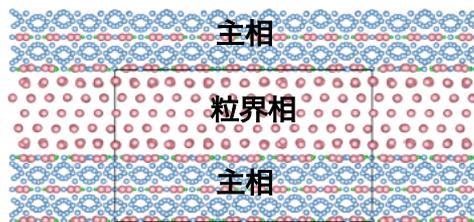
例 1: 半導体ナノ構造デバイスの
世界最高速の第一原理計算



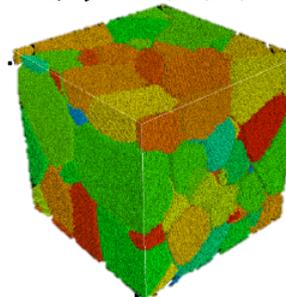
例 2: レーザーパルスによる励起や
加工のマルチスケール計算



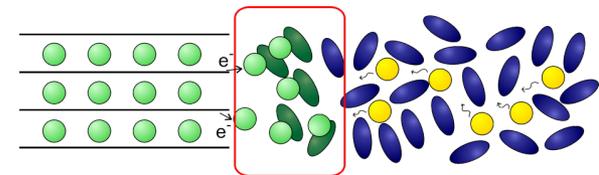
例 3: 粒界、析出物、固液界面、多結晶体など、不均質で複雑な材料
の構造・物性・ダイナミクスのシミュレーション



ネオジウム磁石



鉄の凝固



二次電池の反応

研究基盤としての重要性（2）

計算

- 温度、圧力、初期構造や初速度などの物理パラメータを変化させた並列計算
- さまざまな化学組成、構造モデルのコンビナトリアル計算

+

データ科学

+

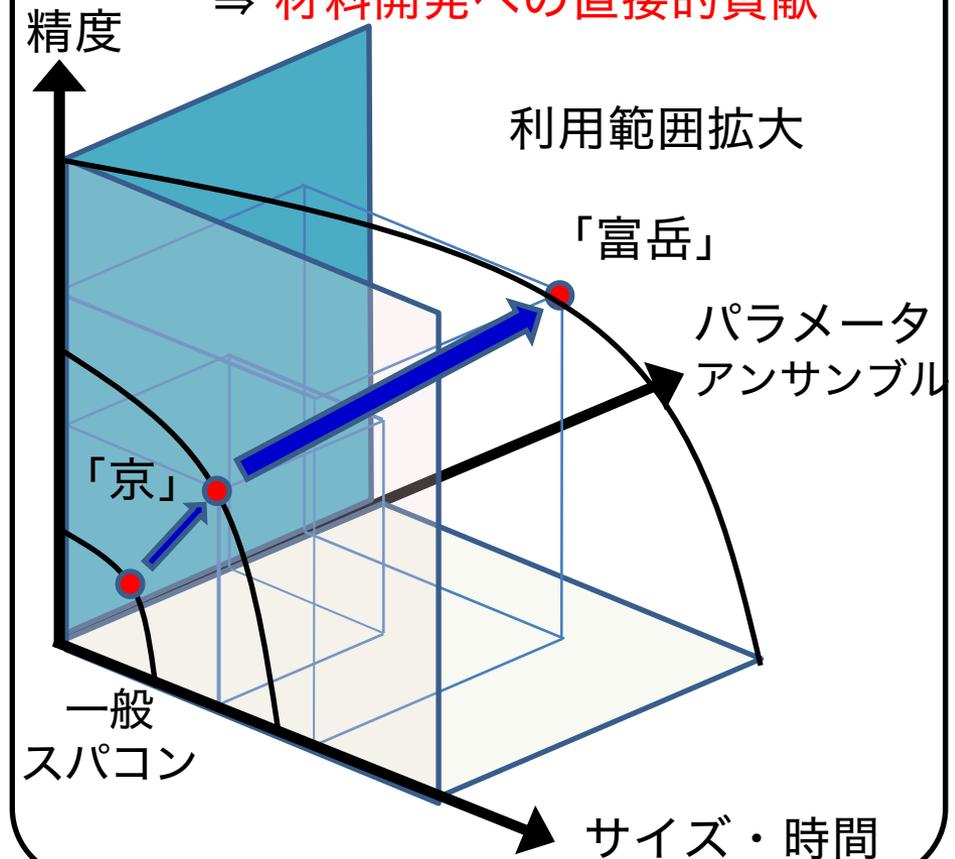
実験（合成、評価）



機能性材料の開発
“マテリアルDX, CPS”の実現

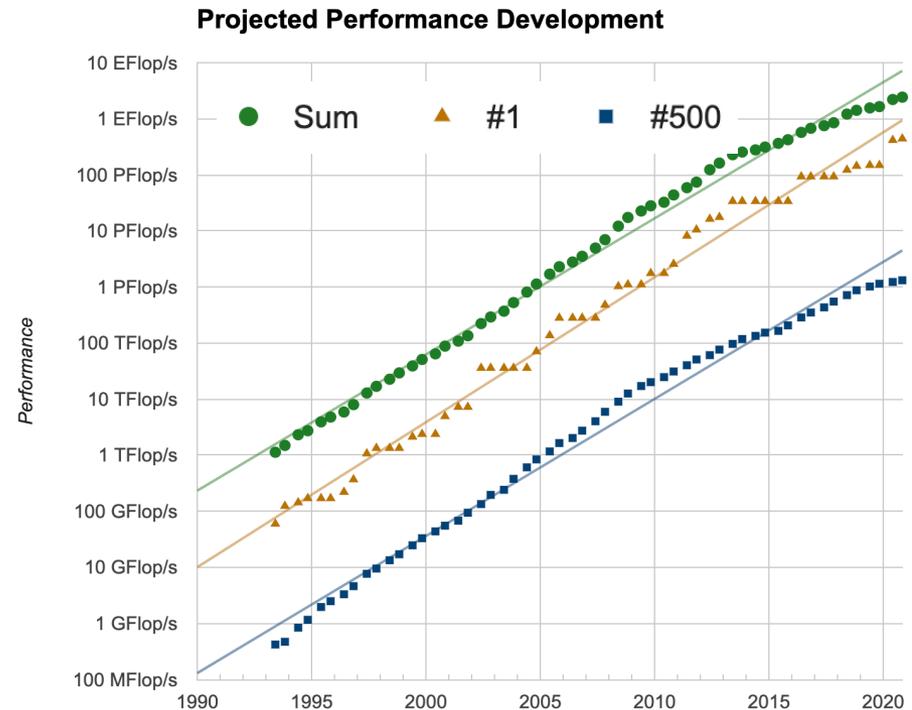
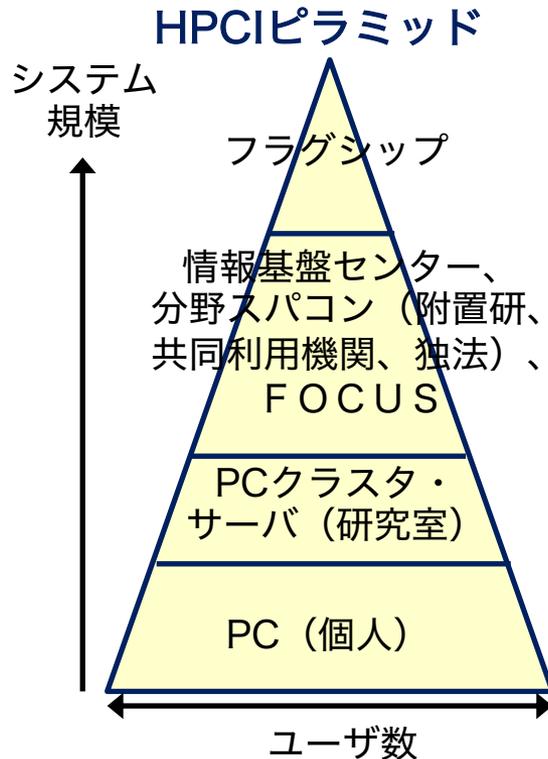
「富岳」に期待される進展

- ◆パラメータ軸を新たに加える
⇒ 材料開発への直接的貢献



技術の普及・展開

- フラッグシップ計算機は、新しいシミュレーション手法開発の**起爆剤**
- 多様な材料研究のニーズに応えるためには、目的に応じて各階層の計算機資源を利用できることが重要。
- フラッグシップ計算機を想定して開発された手法も、数年後には下の階層のマシンで利用できることを期待。



参考：アプリの普及・展開

MateriApps

物質科学シミュレーションのポータルサイト

- ◆物質科学アプリ **278種類**紹介
- ◆約**26,000+PV/月**、**9,000+UU**
- ◆Q&A、利用者の声、事例集
- ◆講習会等イベント企画・案内

MateriApps LIVE!

手元のPCで手軽に使えるアプリ利用環境 (VirtualBox + アプリ)

運営： 東京大学 物性研究所
スポンサー： 戦略プログラム分野2 (終了)
ポスト「京」重点課題7 (終了)
計算物質科学人材育成コンソーシアム
元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>

現在アプリ掲載数 **278** 件
お問合せ / アプリ掲載依頼

JP / EN

MateriApps
物質科学シミュレーションのポータルサイト

MateriAppsについて レビュー募集

ENHANCED BY Google

もっと詳しく探す

NEWS / 講習会・イベント アプリ一覧 アプリ詳細検索 キーワード解説 レビュー 事例 アプリコンシェルジュ

インストールしないでアプリを試せる「MateriApps LIVE!」
詳細はこちら

Category

電子状態計算 (固体物理分野)

電子状態計算 (量子化学分野)

分子動力学

可視化・モデリング

強相関系・有効模型計算

データ解析・補助ツール

連続体シミュレーション

データベース

統合環境

機械学習

量子計算

MateriApps @materiapps

テンソルネットワーク法に基づく多体量子状態計算のためのオープンソースソフトウェア TeNeSのWeb講習会を11/10(火)に開催いたします。

アプリ情報ページ: na.isap.u-tokyo.ac.jp/isap/2290
講習会申込ページ: ccms.isap.u-tokyo.ac.jp/event/3844

皆様のご参加をお待ちしております!

文部科学大臣表彰科学技術賞
(科学技術振興部門)

2019

まとめ

次世代の計算基盤に期待するのは…

- アプリ開発意欲に火を付ける高い性能
- アプリ、基本ソフト、ハードの同時開発（コ
デザイン、“スタートダッシュ”）
- 汎用性の高いハードウェア
- 可搬性の高い数値計算ライブラリ
- 既存の計算機で開発されたアプリの移植性の
高さ
- アプリまで含めたトータルケア
- （安価な）商用マシンの普及
- ペイする産業として持続的に開発を進めるた
めの国家戦略

性能

使いやすさ

普及
展開