

フォーラム「エネルギー科学における多階層連結コンピューティング」

**Research Project: Computing on Interconnecting Multi-Scale Phenomena
related to Energy Science**

実施期間 : 2007~2009 年度

Term of the Project: 2007-2009 fiscal years

研究代表者 : 三間 囿興 国際高等研究所フェロー/大阪大学名誉教授/
光産業創成大学院大学特任教授

Project Leader: Dr. Kunioki MIMA, IAS Fellow; Professor Emeritus, Osaka University;
Specially Appointed Professor, The Graduate School for the
Creation of New Photonics Industries

研究目的 :

素粒子・原子核・原子分子・プラズマを対象として、物理学、化学、生物学は研究を進めているが、その際それぞれでマイクロな構成要素とマクロなダイナミクスとの関係が問題となる。コンピュータを用いて多数のマイクロ構成要素の運動をシミュレートする研究はかなりの成功を収めることができたが、一方ではコンピュータの能力の限界、他方ではマイクロとマクロという異なる階層を連結する理論の欠如で非定常状態等の取り扱いで壁に直面している。この問題に対して、数理情報、物質材料、光量子・プラズマ・流体、計算化学とその関連分野で研究する専門家を結集し、それぞれで発展している理論とシミュレーションについて知識を交換する。特に、次世代スパコンの戦略分野との関係でエネルギー科学に関わるシミュレーション、理論研究で学術融合をはかり、相互啓発により新しい発展を生むことを目的とした。

Objectives:

The objectives of physics, chemistry, and bioscience are to understand dynamics of elementary particle, nuclear, atom and molecule, plasma. The common research issue in these fields is the relations between macro dynamics and microscopic processes. The computer science contributed to simulate dynamics of interacting many micro elements to find the macroscopic phenomena. However, not yet solved are the problems related to the multi scale phenomena including non equilibrium and non stationary dynamics of various elements because of the limitation of computer capability. In this research project, the leaders in the fields of computational information science, material science, photonics, plasma and fluid science and computational chemistry get together to exchange the knowledge to open up a new horizon in these multi-disciplinary fields. In particular, we exchanged information to propose an important research field to which the next generation super computer will be applied.

キーワード : 次世代スーパーコンピュータ、物質材料、光量子・プラズマ、計算化学、数理情報

Key Words: Next generation super computer, material science, photonics plasma and fluid science, computational chemistry, computational information science

研究活動実績：

2007年度：

本フォーラムは物理学、化学、生物学、数理情報学にまたがる新しい学術融合領域の創成を目指して組織された。この融合分野に於ける共通課題は要素や粒子多体系のマイクロ現象とマクロな現象の絡み合いの解明である。計算科学はこのような多階層連結現象を解明するための強力な手段である。しかしながら、計算機資源の制限により、非平衡、非定常状態の多体系のダイナミックスを解明するには至っていない。この研究プロジェクトでは、数理情報、物質材料、光量子・プラズマ・流体、計算化学分野等、対象の異なる大型計算機を用いる計算科学の第1線の研究者を結集し、各分野で発展している理論とシミュレーションについて知識を交換し、相互啓発を行った。その結果として、次世代スパコンの利用推進に関わる意見をパブリックコメントとしてまとめ、エネルギー科学分野における多階層連結コンピューティングが次世代スパコンの重要な応用分野であることを指摘した。その過程で、2007年度は、フォーラム2回、幹事会2回を開催した。

研究会開催実績：

フォーラム

第1回：2007年6月22日～23日（於高等研）

第2回：2007年10月12日～13日（於 高等研）

幹事会

第1回：2007年4月21日（於 高等研）

第2回：2007年11月24日（於 高等研）

参加研究者：75名（◎：研究代表者、*：幹事）

氏名	職名等
◎三間 圀興	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター長
*赤井 久純	大阪大学大学院理学研究科教授
*金森 順次郎	国際高等研究所長
*岸本 泰明	京都大学大学院エネルギー科学研究科教授
*里深 信行	滋賀県立大学理事・副学長
*島崎 眞昭	福井工業大学工学部原子力技術応用工学科教授
*下條 真司	大阪大学サイバーメディアセンター長・教授
*田口 俊弘	摂南大学工学部教授
*田島 俊樹	日本原子力研究開発機構関西光科学研究所長
*寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学特別招聘教授
*中辻 博	量子化学研究協会理事長
*長友 英夫	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター准教授
*西原 功修	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター教授
*山口 兆	大阪大学極限量子科学研究センター特任教授
*吉田 博	大阪大学産業科学研究所教授
安食 博志	大阪大学大学院基礎工学研究科助教
岩下 武史	京都大学学術情報メディアセンター准教授
上原 哲太郎	京都大学学術情報メディアセンター准教授
岡部 寿男	京都大学学術情報メディアセンター教授
小川 哲生	大阪大学大学院理学研究科教授
奥村 光隆	大阪大学大学院理学研究科准教授
小口 多美夫	広島大学大学院先端物質科学研究科教授
奥本 佐登志	株式会社松下電工解析センター主幹

笠井 秀明	大阪大学大学院工学研究科教授
梶島 岳夫	大阪大学大学院工学研究科教授
金田 千穂子	富士通研究所シリコンテクノロジー開発研究所主管研究員
鏑木 誠	神戸大学大学院国際文化学研究科教授
川上 貴資	大阪大学大学院理学研究科助教
菊池 誠	大阪大学サイバーメディアセンター教授
北河 康隆	大阪大学大学院理学研究科助教
草部 浩一	大阪大学大学院基礎工学研究科准教授
草野 完也	海洋研究開発機構地球シミュレータセンター 連結階層シミュレーション研究開発プログラムディレクター
功刀 資彰	京都大学大学院工学研究科教授
小山田 耕二	京都大学高等教育研究開発推進センター教授
坂上 仁志	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
榊 茂好	京都大学大学院工学研究科教授
城 和貴	奈良女子大学大学院人間文化研究科教授
白井 正文	東北大学電気通信研究所情報デバイス研究部門教授
佐藤 和則	大阪大学産業科学研究所助教
佐藤 啓文	京都大学大学院工学研究科准教授
杉野 修	東京大学物性研究所物性理論研究部門准教授
柴田 一成	京都大学大学院理学研究科附属天文台
高田 章	旭硝子株式会社中央研究所特任研究員
高田 俊和	理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラムコーディネータ
高橋 英明	大阪大学大学院基礎工学研究科准教授
高部 英明	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター教授
武宮 博	産業技術総合研究所グリッド研究センター研究員
蔦原 道久	神戸大学大学院工学研究科教授
土井 正男	東京大学大学院工学系研究科教授
中島 徳嘉	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
中嶋 浩之	京都大学大学院工学研究科研究員
中野 雅由	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
中尾 嘉秀	京都大学大学院工学研究科教授
中村 佳正	京都大学大学院情報学研究科教授
長谷川 淳也	京都大学大学院工学研究科助教
浜口 智志	大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター
播磨 尚朝	神戸大学大学院理学研究科物理学専攻教授
浜田 典昭	東京理科大学理工学部物理学科教授
日置 慎治	帝塚山大学経営情報学部教授
平井 國友	奈良県立医科大学医学部医学科教授
福山 淳	京都大学大学院工学研究科教授
馬越 健次	兵庫県立大学大学院物質理学研究科教授
三谷 昌輝	三重大学大学院工学研究科准教授
湊 敏	奈良大学情報処理センター教授
森川 良忠	大阪大学産業科学研究所准教授
森西 晃嗣	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科教授
山川 栄樹	関西大学環境都市工学部都市システム工学科准教授
山田 悟	大阪大学大学院理学研究科教務補佐員
山中 秀介	大阪大学極限量子科学研究センター研究員・客員准教授

吉岡 泰規	三重大学大学院工学研究科教授
上島 豊	有限会社キャトルアイ・サイエンス代表取締役
河野 秀俊	日本原子力研究開発機構研究副主幹
James KOGA	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 光量子シミュレーション研究グループ
山極 満	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門 光量子シミュレーション研究グループリーダー
Timur Esirkepov	日本原子力研究開発機構

話題提供者：4名

岡崎 進	自然科学研究機構岡崎共通研究施設計算科学研究センター長
北川 善太郎	国際高等研究所副所長
田口 康	理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 企画調整グループグループディレクター
姫野 龍太郎	理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 開発グループ・ディレクター、 次世代計算科学研究開発プログラム・副プログラムディレクター

2008年度：

前年度のフォーラム「多階層連結コンピューティング」の活動により作成した報告書「エネルギー科学における多階層コンピューティング」の内容を検討し発展させるため、本年度はフォーラムのタイトルを「エネルギー科学における多階層コンピューティング」に変更し、フォーラム2回、幹事会3回を開催した。

本フォーラムでは、多階層連結計算科学の現状と将来、原子力分野に置ける計算科学、分子動力学のシミュレーションの最先端、核融合分野に置ける計算機シミュレーション等について講演者を招き、今後の課題等について議論した。また、神戸市に建設中の次世代スパコンの利用分野として「エネルギー科学における大規模シミュレーション」の重要性を指摘し、大規模シミュレーションの具体例につき、議論を交わした。その過程で、次世代スパコンを共用する体制として、多岐にわたる利用分野間で計算科学の共通する課題を連携して解決するために「連携推進委員会」を設けることを提案した。また、物質材料科分野や光量子・プラズマ・核融合分野の計算科学の連携が重要であることが確認され、次世代スパコンの重点分野として計算エネルギー科学を提案するための方策とこの分野におけるプロジェクト計画書を作成した。その結果、本フォーラムと関係し、文部科学省主催の「戦略分野検討委員会」において、もの作り分野における計算機科学と、核融合分野における計算機シミュレーションに関する報告が行われた。

研究会開催実績：

フォーラム

第1回：2008年7月4日～5日（於 高等研）

第2回：2008年10月25日（於 高等研）

幹事会

第1回：2008年5月17日（於 高等研）

第2回：2008年9月6日（於 高等研）

第3回：2009年1月17日（於 高等研）

参加研究者：49名（◎：研究代表者、＊：幹事）

氏名	職名等
◎三間 罔興	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター長
＊赤井 久純	大阪大学大学院理学研究科教授
＊浅川 正之	大阪大学大学院理学研究科教授
岡部 寿男	京都大学学術情報メディアセンター教授
小口 多美夫	広島大学大学院先端物質科学研究科教授
笠井 秀明	大阪大学大学院工学研究科教授
＊金森 順次郎	国際高等研究所長
金田 千穂子	富士通研究所ナノテクノロジー研究センター主管研究員
鏑木 誠	神戸大学大学院国際文化学研究科教授
川上 貴資	大阪大学大学院理学研究科化学専攻助教
菊池 誠	大阪大学サイバーメディアセンター教授
＊岸本 泰明	京都大学大学院エネルギー科学研究科教授
＊北川 善太郎	国際高等研究所副所長
草部 浩一	大阪大学大学院基礎工学研究科准教授
草野 完也	海洋研究開発機構地球シミュレータセンター 連結階層シミュレーション研究開発プログラムディレクター
功刀 資彰	京都大学大学院工学研究科教授
小山田 耕二	京都大学高等教育研究開発推進センター教授
＊坂上 仁志	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
榊 茂好	京都大学大学院工学研究科教授
佐藤 三久	筑波大学計算科学研究センター長
＊里深 信行	滋賀県立大学理事・副学長
＊島崎 眞昭	福井工業大学工学部教授
＊下條 真司	情報通信研究機構大手町ネットワーク研究統括センター長
城 和貴	奈良女子大学大学院人間文化研究科教授
高橋 英明	大阪大学大学院基礎工学研究科准教授
高部 英明	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター教授
＊田口 俊弘	撰南大学工学部教授
＊寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院特別招聘教授
＊中島 徳嘉	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
中辻 博	量子化学研究協会理事長
＊長友 英夫	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター准教授
中西 寛	大阪大学大学院工学研究科助教
中野 雅由	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
中村 佳正	京都大学大学院情報学研究科教授
＊西原 功修	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター特任研究員
浜口 智志	大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター教授
浜田 典昭	東京理科大学理工学部教授
播磨 尚朝	神戸大学大学院理学研究科教授
平井 國友	奈良県立医科大学医学部教授
＊福山 淳	京都大学大学院工学研究科教授
＊水木 純一郎	日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門副部門長
森川 良忠	大阪大学産業科学研究所准教授
＊山極 満	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門主任研究員・

	光量子シミュレーション研究グループリーダー
*山口 兆	大阪大学極限量子科学研究センター特任教授
山中 秀介	大阪大学蛋白質研究所附属プロテオミクス総合研究センター特任研究員・客員准教授
吉岡 泰規	三重大学大学院工学研究科教授
*吉田 博	大阪大学大学院基礎工学研究科教授
李 継全	京都大学大学院エネルギー科学研究科准教授
斎藤 大介	京都大学大学院エネルギー科学研究科大学院生

話題提供者：5名

佐藤 哲也	海洋研究開発機構特任上席研究員
二ノ方 寿	東京工業大学大学院理工学研究科教授
姫野 龍太郎	理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部 開発グループグループディレクター
福山 秀敏	東京理科大学理学部教授
馬越 健次	兵庫県立大学大学院物質理学研究科長

2009年度：

物理学、化学、生物学、天文学におけるミクロな構成要素とマクロなダイナミクスとの関係の理解を深めることを目指し、具体的な対象を物質科学における材料研究や電子デバイス設計等のツールとなる第1原理計算（時間依存汎関数法とMDを結合したもの、Abinitio MD）コード、プラズマに於ける運動論的シミュレーション（衝突粒子シミュレーション）と放射流体シミュレーションの結合等を取り上げ、物質材料分野、光量子・プラズマ・流体分野、計算化学分野の間での共通認識と共通課題を確認し、数理情報分野との連携について検討を進め、各分野間の相互理解を深めた。

特に、次世代スパコンの戦略分野との関係でエネルギー科学に関わるシミュレーション、理論研究で学術融合をはかり、相互啓発により新しい発展を目指した。過去2年間のフォーラム活動を基盤に計算科学の融合分野の構築のため、多階層連結コンピューティングの分野横断的課題の抽出、次世代スパコンの戦略機関と連携した課題解決活動方策、戦略機関の関係者との討論による次世代スーパーコンピュータプロジェクトと国際高等研究所の役割の在り方につき検討を行った。

研究会開催実績：

- 第1回：2009年5月22日～23日（於：高等研）
- 第2回：2009年10月2日～3日（於：高等研）
- 第3回：2010年1月30日（於：高等研）

参加研究者：31名（◎研究代表者）

氏名	職名等
◎三間 啓興	国際高等研究所フェロー／大阪大学名誉教授／光産業創成大学院大学特任教授
赤井 久純	大阪大学大学院理学研究科教授
上原 哲太郎	京都大学学術情報メディアセンター准教授
笠井 秀明	大阪大学大学院工学研究科教授
金森 順次郎	国際高等研究所上級研究員
金田 千穂子	株式会社富士通研究所ナノエレクトロニクス研究センター主管研究員
川上 貴資	大阪大学大学院理学研究科助教

菊池 誠	大阪大学サイバーメディアセンター教授
岸本 泰明	京都大学大学院エネルギー科学研究科教授
草野 完也	名古屋大学太陽地球環境研究所総合解析部門教授
功刀 資彰	京都大学大学院工学研究科教授
James KOGA	日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門主任研究員 光量子シミュレーション研究グループ研究主幹
坂上 仁志	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
榊 茂好	京都大学大学院工学研究科教授
佐藤 哲也	兵庫県立大学教授 先端計算科学研究科（仮称）設置準備担当
里深 信行	滋賀県立大学学長顧問
島崎 眞昭	福井工業大学教授
下條 真司	情報通信研究機構大手町ネットワーク研究統括センター長
高部 英明	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター教授
田口 俊弘	摂南大学工学部教授
寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学特別招聘教授
中島 徳嘉	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部教授
長友 英夫	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター准教授
中西 寛	大阪大学大学院工学研究科助教
西原 功修	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター特任研究員
福山 淳	京都大学大学院工学研究科教授
堀内 利得	自然科学研究機構核融合科学研究所シミュレーション科学研究部研究総主幹・教授
馬越 健次	兵庫県立大学大学院物質理学研究科長
森川 良忠	大阪大学大学院工学研究科教授
山口 兆	大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター招聘教授
吉田 博	大阪大学大学院基礎工学研究科教授

話題提供者：7名

上島 豊	株式会社キャトルアイ・サイエンス代表取締役
追永 勇次	富士通株式会社次世代TC（テクニカルコンピューティング）開発本部技師長
小田中紳二	大阪大学サイバーメディアセンター教授
平尾 公彦	理化学研究所特任顧問
福田 正大	財団法人計算科学振興財団
松元 亮治	千葉大学大学院理学研究科教授
常行 真司	東京大学理学系研究科教授

その他の参加者：3名

小石 忠嗣	財団法人計算科学振興財団
城崎 知至	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター特任研究員
高尾 正敏	国際高等研究所フェロー／大阪大学大学院基礎工学研究科特任教授

Achievement:

2007 fiscal year:

This forum was organized for opening up a new interdisciplinary area in computer science among physics, chemistry, bioscience, and computational information science. The common research issue in this area is to understand the relations between macro dynamics and microscopic processes of

many elements and/or particles. The computer science has been a powerful tool for simulating dynamics of interacting many micro elements to find the macroscopic phenomena. However, not yet solved are the problems related to the multi scale phenomena including non equilibrium and non stationary dynamics of various elements because of the limitation of computer capability. In this research project, the leaders of the research in the fields of computational information science, material science, photonics, plasma and fluid science and computational chemistry got together to exchange the knowledge to open up a new horizon in these multi-disciplinary fields. As an achievement, we proposed the multi-scale interconnected simulations for energy science as an important research fields to which the next generation super computer will be applied.

2008 fiscal year:

In 2008, we continued the forum which started in 2007 and concentrated the objective on "Inter-connecting multi-scale computing related to energy science". As the activities, two general meetings and 3 steering meetings were held. In the meetings, lectures on "Interconnecting multi-scale computing", "Computer science in the atomic energy", and "Computer simulation in the fusion research" and so on were presented. As a result of the activities, we proposed that "the committee for promoting multi-disciplinary computer science" is effective for creating a new methodology for using the next generation super computer. Furthermore, as the key projects of the next generation super computer, "the computational energy science" and "the computational material science" were proposed, which includes material science and photon/plasma science. The proposals were presented in the committee on promoting the next super computer project at MEXT in February 2009.

2009 fiscal year:

In the year of 2009, as examples, the Molecular dynamics combined with calculation of electronic state with density functional method (Abinitio MD), the multi scale simulations with large scale computers in space plasmas and atmosphere, molecular dynamics in fuel cell, computational material design, multi-scale fusion plasma simulation, and so on were discussed for exploring the underlining common research issue.

In the three research meetings, we discussed the following issues. In the first meeting, the density functional method, simulations on molecular dynamics related to energy science, and simulations in the solar and atmospheric science and so on were discussed. In the second meeting, computational material design, multi-scale fusion plasma simulation, and so on were discussed. We also discussed about the possibility for the IAS group to contribute to the next generation super computer project. In the third meeting, the present status of the next generation super computer project was reported and the possibility of opening up a new field of the above interdisciplinary area was discussed.

研究活動総括 :

素粒子・原子核・原子分子・プラズマ を対象として、物理学、化学、生物学は研究を進めているが、その際それぞれでミクロな構成要素とマクロなダイナミクスとの関係が問題となる。コンピュータを用いて多数のミクロ構成要素の運動をシミュレートする研究はかなりの成功を収めることができたが、一方ではコンピュータの能力の限界、他方ではミクロとマクロという異なる階層を連結する理論の欠如で非定常状態等の取り扱いで壁に直面している。この問題に対して、数理情報分野、物質材料分野、光量子・プラズマ・流体分野、計算化学分野等対象を異にした分野で研究する専門家を結集し、それぞれで発展している理論とシミュレーションについて知識を交換し、新領域の開拓を目指した。特に、次世

代スパコンの戦略分野との関係でエネルギー科学に関わるシミュレーション、理論研究で学術融合をはかり、相互啓発により新しい学術の芽を育てることを目指して本フォーラムを組織した。

初年度には、フォーラムの活動により作成した報告書「エネルギー科学における多階層コンピューティング」をつくり、次世代スーパーコンピュータプロジェクトに関わるパブリックコメントとし文部科学省に提出した。これを受けて、2年度にはフォーラムのタイトルを「エネルギー科学における多階層コンピューティング」に変更し、多階層連結計算科学の現状と将来、原子力分野に置ける計算科学、分子動力学のシミュレーションの最先端、核融合分野に置ける計算機シミュレーション等について講演者を招き、今後の課題と融合分野の在り方等について議論した。また、神戸市に建設中の次世代スパコンの利用分野として「エネルギー科学における大規模シミュレーション」の重要性を指摘し、大規模シミュレーションの具体例につき、議論を交わした。その過程で、次世代スパコンを共用する体制として、多岐にわたる利用分野間で計算科学の共通する課題を連携して解決するために「連携推進委員会」を設けることを提案した。また、次世代スパコンの重点分野として計算エネルギー科学を提案するための方策とこの分野におけるプロジェクト計画書を作成した。その結果、本フォーラムと関係し、文部科学省主催の「戦略分野検討委員会」において、もの作り分野における計算機科学と、核融合分野における計算機シミュレーションに関する報告を行った。

ミクロな構成要素とマクロなダイナミックスの相互作用に関わる問題で、具体的な対象を物質科学における材料研究や電子デバイス設計等のツールとなる第1原理計算（時間依存汎関数法とMDを結合したもの）コード、プラズマに於ける運動論的シミュレーション（衝突粒子シミュレーション）と放射流体シミュレーションの結合等を例として取り上げ、物質材料分野、光量子・プラズマ・流体分野、計算化学分野間での共通認識と共通課題を探索した。特に、次世代スパコンの戦略分野との関係でエネルギー科学に関わるシミュレーション、理論研究で学術融合をはかり、新しい学術の芽を探索した。

Whole Achievement:

The objectives of physics, chemistry, and bioscience are to understand dynamics of elementary particle, nuclear, atom & molecule, and plasma. The common research issue in these fields is the relation between macro dynamics and microscopic processes. The computer science contributed to simulate dynamics of interacting many micro elements to find the macroscopic phenomena. However, not yet solved are the problems related to the multi scale phenomena in non equilibrium and non stationary state. because of the limitation of computer capability and the lack of knowledge for connecting macro phenomena with micro dynamics in non-equilibrium states, in particular.

This forum was organized for opening up a new interdisciplinary area to understand the relations between macro dynamics and microscopic processes of many elements and/or particles. The computer science has been a powerful tool for simulating dynamics of interacting many micro elements to find the macroscopic phenomena. In this research project, the leaders of the research in the fields of computational information science, material science, photonics, plasma and fluid science and computational chemistry got together to exchange the knowledge to open up a new horizon in these multi-disciplinary fields. As an achievement, in the first year, reviewed was the present status and future prospects of the multi-scale interconnected simulations. We also proposed that it is important for energy science and can be an appropriate subject for applying the next generation super computer. The proposal was sent to the MEXT in January, 2008. From April, 2008, the title of the forum changed to “the multi-scale interconnected computing for energy science” and the topics like Interconnecting multi-scale computing, “Computer science in the atomic energy”, “Computer simulation in the fusion research” and so on were discussed. As one of the actions, we proposed that “the committee for promoting multi-disciplinary computing science” is necessary to create a new methodology for using the next generation super computer. Furthermore, as the key

projects of the next generation super computer, “the computational energy science” and “the computational material science” were proposed, which includes material science and photon/plasma science. The proposals were presented in the committee on promoting the next super computer project at MEXT in February 2009.

In the year of 2009, as examples, the Molecular dynamics combined with calculation of electronic state with density functional method (Abinitio MD) , the multi scale simulations with large scale computers in space plasmas and atmosphere, molecular dynamics in fuel cell, computational material design, multi-scale fusion plasma simulation, and so on were discussed for exploring the underlining common research issue. For this purpose, we are discussing the possibility to join some projects related to the next generation super computer and trying to open up a new field of the above interdisciplinary area.

研究成果報告書 :

2011 年 2 月出版予定

担当 : 尾池所長