

October 2014

NO. 10

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

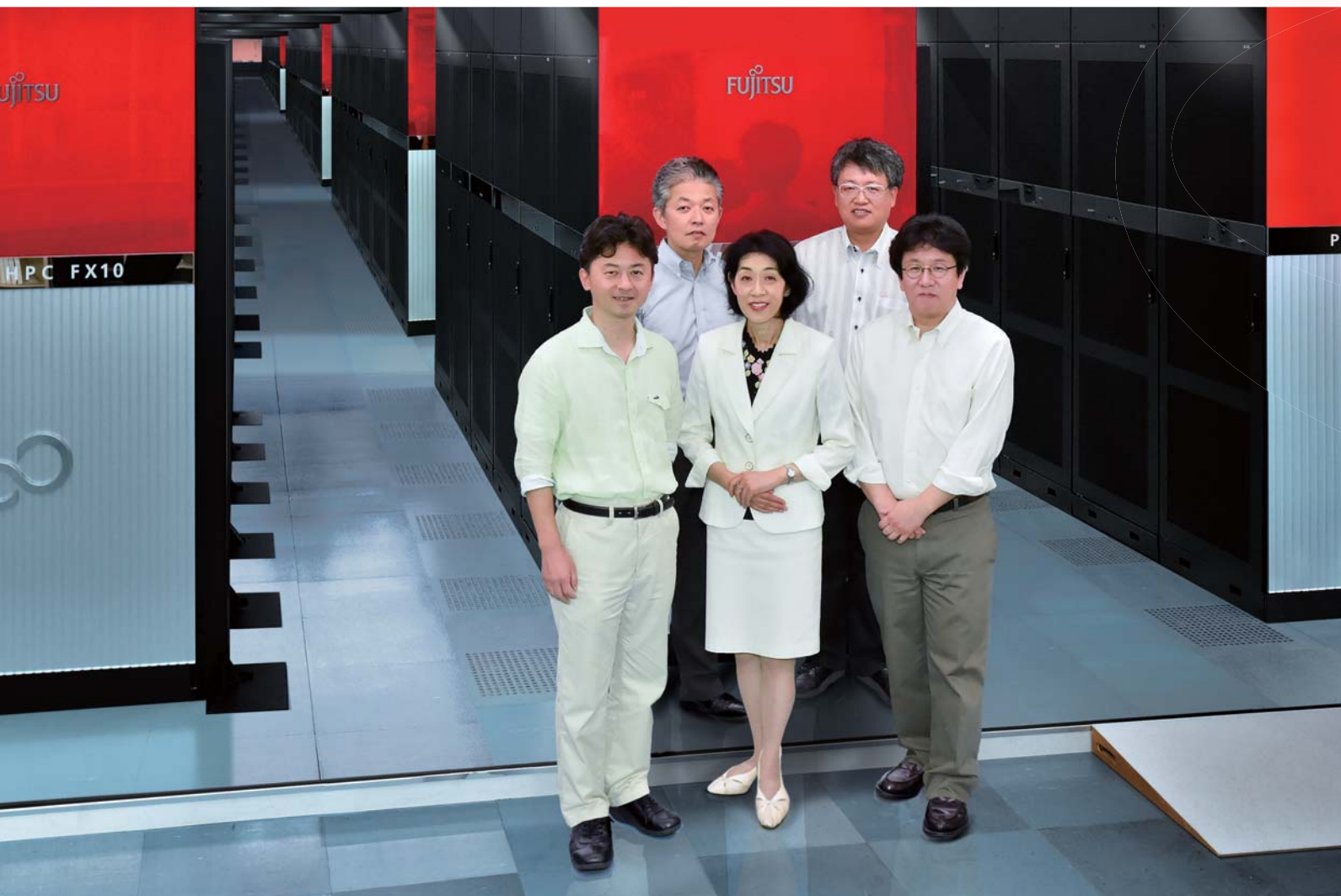
座談会

CMSIが拓いた計算物質科学：
分野振興の成果と次なるステップ

インタビュー

フェーズフィールド法の開発者・
高木知弘

CMSIが拓いた計算物質科学 分野振興の成果と次なるステップ



出席者 ● **金田千穂子** かねた ちおこ
富士通研究所 専任研究員

川勝年洋 かわかつ としひろ
東北大学大学院理学研究科 教授

中島研吾 なかじま けんご
東京大学情報基盤センター 教授

松林伸幸 まつばやし のぶゆき
大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

司会 ● **藤堂真治** とうどう しんじ
東京大学大学院理学系研究科 准教授

物性科学、分子科学、材料科学の3つの分野にまたがる「計算物質科学」。CMSIはその分野振興を3年半にわたって組織的に展開してきました(右ページの図参照)。さまざまな立場から分野振興を担ってきた方々に、これまでの活動を振り返り、ポスト「京」プロジェクトを見据えた次なるステップについて語っていただきました。

人材育成・教育

配信講義・eラーニング
若手技術交流会
大学院講義
サマー/ウィンタースクール・集中講義
社会人教育

「京」・HPCI利用研究支援

高度化合宿
高度化コンサルティング・Q&A
CMSI神戸拠点運営

分野を超えた取り組み

元素戦略プロジェクトとの連携
大型実験施設との連携シンポジウム
分野間連携ワークショップ
マテリアルズ・インフォマティクス研究会
計算機科学との連携

計算機資源の効率的利用

共同利用スパコン資源提供
情報基盤センタースパコン資源提供
CMSI計算システム運用

人的ネットワークの形成

国際シンポジウム・ワークショップ
連続研究会
産官学連携シンポジウム
研究会・セミナー

ソフトウェアの普及

ポータルサイト MateriApps
アプリケーション講習会
ソフトウェア公開支援

研究成果の普及

広報誌 Torrent
ホームページ CMSI web
見える化シンポジウム
シンポジウム・展示会・一般公開出展
記者勉強会



CMSIの分野振興活動: 東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の3機関を中核拠点とし、11の協力機関、および計算物質科学に関連する大学・研究機関、企業の人たちとともに計算物質科学の分野振興活動を進めています。

産官学連携へのキーワードは 問題意識の共有

藤堂 (司会) 最初に、自己紹介を兼ねて、CMSIで今までどんな活動をしてきたかを簡単にお話いただけますか。

金田 富士通研究所の金田です。産官学連携の小委員会に入っています。産官学の接点を見つけ、連携を促進するための研究会を、年に数回開いていますが、その企画を何度か担当しました。

中島 東大・情報基盤センターの中島です。当センターのスーパーコンピュータシステムの運用を担当しています。私はスパコン連携小委員会のメンバーで、われわれの計算機資源(FUJITSU FX10)をCMSIでもご利用いただいています。また、CMSI主催の各種講演会、若手のサマースクールなどでも講演しています。専門は並列数値アルゴリズムです。大学では全学的なHPC(High Performance Computing)プログラミング教育にも関わっており、センター主催の講習会も実施しています。

川勝 東北大学の川勝です。所属は人材育成・教育小委員会。東北大学には理学部

に教育拠点があり、その責任者としてCMSIの材料科学拠点(CMRI)である金属材料研究所と協同して教育プログラムを動かしています。昨年度と今年度は「マルチスケール材料科学」に関する連続セミナーを開催しましたし、企業と大学の研究者向けには高分子材料設計シミュレーションソフトウェアOCTAの講習会を毎年開いていて、OCTAを開発したメンバーを講師として招き実習をおこなっています。参加者は大学と企業が半々か2対1と、企業のほうが多いです。

松林 阪大の松林です。私の専門は分子科学で、分子集合系の計算統計力学を研究しています。いろいろな種類の分子集合系に共通する機能に着目し、その機能を解析する一つのソフトをつくって多くの人に役立ててもらおう立場でアプリの普及に寄与できたらいいなと思っています。

藤堂 ありがとうございます。私自身は広報小委員会代表を務めています。“Torrent”やCMSIのホームページの作成、最近では物質科学シミュレーションソフトウェアのポータルサイト「MateriApps」の整備を通じてCMSIのアプリ普及に力を入れています。また、

AICS(理化学研究所計算科学研究機構)との連携と交流にも取り組んできました。

では、まず産官学連携をテーマとして取り上げたいと思います。CMSIの活動によってどこが変わってきたのか、それがうまくいっているのか、あるいは空回りしてしまっているのかといったあたりをお話いただけますか。

金田 先ほどお話した研究会では、産業界の人の話に大学の人が興味をもってもらえないといったこともありました。理学系の人には「why」のところから入っていきませんが、産業界は「how」からです。興味のあるポイントが違うので、ギャップが大きいと痛感しました。

理学系と産業界を直につなぐのは難しいので、まずは工学のほうにつなげていく。あと、究極の産学連携というのは、人材を育てて産業界に送り込むというのが一つの最終的な形だと思っています。

藤堂 CMSIの中でも材料分野の人たちはかなり企業に近いのでは。

金田 確かに、企業からの委託研究をしている大学の研究室は多いのですが、将来的な産業界への普及や浸透を考えると、大学の研究室だけではカバーしきれないし、産業界



金田千穂子 Chioko Kaneta

CMSI産官学連携小委員会委員

「理学系の人の興味はwhyから、産業界はhowから。この間をどうやってつないでいくかが課題です」

の動きと同期するのも難しいので、それだけではしぼんでいってしまうでしょう。計算科学を専攻した大学生や大学院生を企業に入れて、そこで業績をあげてもらい、企業が活性化。その利益を大学側に還流するような大きな流れをつくらないと、分野全体が広がっていかないと思うのです。

藤堂 川勝さんが関わっておられるOCTAは産学連携で開発されたのですね。

川勝 OCTAは、私が名古屋大学にいたときのプロジェクトで、20数社の企業の人が集まり、名大の研究所でソフトウェアを開発しました。大学関係者はほんの数人でした。そこでつくったソフトウェアはフリーで公開されていて、今はたくさんの会社や大学の人、それも国内だけでなく海外でも使っていただいています。

藤堂 OCTAが成功したそのポイントは？

川勝 ソフトを全部フリーにしたことと、オリジナルの開発メンバーが10年以上経った今でもボランティアで改良していることだと思います。JSOL(ジェイソル)がバックアップしていて、商用版も出ています。

金田 そうですね。外国製で本当にうまくいっているソフトウェアは、使われるようになるのに20年から30年はかかっていて、その間に

改良を続けている人がいて、ユーザー会もできています。日本ではそういう例がこれまでなかったですね。

藤堂 そういう意味では、OCTAはアカデミアで開発されている他のソフトウェアとはかなり違ってきますね。

川勝 企業の方にはいっぱい使っていただけるのですが、一方で、学生にはあまり使ってもらえない。理学部の学生は自分でソフトをつくりたがりますから。

藤堂 コードを書いても、公開してみんなに使ってもらおうというのはけっこう大変です。

川勝 マニュアルを書かないといけませんからね。

藤堂 CMSIでつくったり高度化したりしているソフトはたくさんあるので、そのうちのよいものを残したいのですが、それにはCMSIとして何をやればよいでしょうか。

松林さんは今アプリを開発をされていて、実際に企業の方といっしょになって広げようとしている。それは感触としてはどうですか。

松林 まあ、喜んでもらっていると思います。先に理学の話が出ましたが、理学のよいところは、会社ごとにいろいろな問題があっても、共通の基盤となるような問題意識があって、そこを教えていることです。異なる業界に属する会社の課題であっても、同じような問題意識に「翻訳できる」ことがしばしばあります。問題意識が初めから共通化することはあまりないのですが、翻訳していったらいいのかなと思います。そうしたら、1本のソフトで何とかいけますから。

藤堂 人材を産業界に送り込むということでは、計算機関係というのはそういう交流が多いと思うのですが、大学側として何か努力や工夫をしているのでしょうか。人材交流が進まないと言われる物理や化学分野を、中島さんはどうご覧になっていますか。

中島 計算機科学の研究は即応性を求め

られるようなことが多いので、大学と企業の人で問題意識としては変わらないのではないかなという気がしています。HPC業界で産学の交流がうまくいっているのも、そのあたりにあると感じています。

あとは、ずっと大学の教員だったという人はむしろまれで、企業や研究機関出身の人も多い。就職先も最近は多様になってきて、Googleに行く人が増えていたりする。大学が特別ということもなく、企業との間でごく自然に交流がおこなわれているのではないのでしょうか。



川勝年洋 Toshihiro Kawakatsu

CMSI人材育成・教育小委員会委員

「配信講義はオンデマンドにすれば、時間が自由になるので、企業の人を含めて多くの人が受けられるでしょう」

アプリをつくる人、使う人、いじれる人、それぞれの人材育成

藤堂 産学の問題意識の共有は、大学院生のときから培っていく必要がありますね。CMSIでは連続研究会といった形で続けてきました。

金田 人材育成というとき、産業界のために大学があるわけではないので、アカデミアは研究の高いレベルを目指す。無理に産業界にすり寄る必要はないと思うのです。それぞれのあり方は違って当然です。

川勝 そうすると、人材育成委員会というのは

学生を育てればよいということになりますよね。

金田 そうではなくて、全部が同じ方向を向いたら困るだろうと思うのです。例えば、物質のある性質がわかったとしても、それでモノができるわけでありません。いろいろ組み合わせたりと工学的なプロセスを経て出来上がっていく。基礎と応用の間のところにもしかるべき人が必要で、そのような人材をどうやって育てるか。

松林 その真ん中の人というのは、相当に偉くないと難しいでしょう。基礎的な研究を見て、「これは使えるから、こっちに持っていこう」「応用の人が本当にほしいのはここだ、ここが抜けているから何とかしないとイケない」と判断できる能力が必要ですし、また誰かに「これをやれ」と指示できる立場にいないとイケない。これは人材育成というよりも、本物のエリート養成みたいなことになるのでは。

金田 難しいとは思いますが、技術者レベルでやれることもたくさんあり、そこをやらないと本当にはつながっていかない気がするのです。

中島 アカデミア側はどういうことをやればよいのでしょうか。ソフトウェアを一般の人に普及させるような活動のことですか。それとも、使いやすいような作り込みをすること。

金田 そこにどれだけ価値を感じるかです。大学の先生からしたら、たぶん普及活動などはいわゆる雑用になりかねない。

藤堂 もう一つの側面があって、計算科学を専攻する人口が増えている。すべての人が大学で研究を続けるわけではなく、産業界へ行く人と、間に立つ人をどんどんつくっていかないとイケない。例えばアプリを開発する人もいますし、アプリを使って何かを計算するノウハウを持った人が企業に行って、企業の研究開発の中で仕事をするとか、いろいろなレベルができてくる。CMSIでは拠点研究員という制度をつくっていて、いくつかの研究プロジェクトを回りながら分野共通のプログラムの開発に携わり、またアプリの普及活動もするという、間の立場になれる人をつくろうとしています。



中島研吾 Kengo Nakajima

CMSIスパコン連携小委員会委員

「次世代のスパコンの開発は、最初からソフト、ハードとも産官学がいっしょになって進めるのが前提になっています」

中島 その人たちのキャリアパスは？

松林 半官みたいな組織を育てて、それには企業からも寄付をもらって、そこに入るのが本当に価値があると認められるようにすれば、よいキャリアパスになると思います。

金田 企業が材料開発のためにシミュレーション分野の人を採るとしたら、優秀なユーザーであって、アプリをつくる人ではないですよ。シミュレーション結果の解析用に短いコードなどを書ければ尚可ですが、アプリを自前でつくっている企業はほとんどなくて、よいアプリがあればそれを持ってくる。いろいろなアプリやハードを駆使して、材料開発やデバイス開発における問題を解決していく、優秀な人材が必要なのです。

大学では、優秀なユーザーを育てていただいているのでしょうか。

川勝 いや、育てていないかもしれませんね。

中島 私も計算機科学の人材育成を大学で検討していて、育成する人材を、「使える人」、「つくれる人」、「いじれる人」に分けています。この種別によって教えることは違うと考えています。「いじれる人」というのは究極の人材で、例えばサイエンスと数値アルゴリズムの両方に精通していて、どちらもできる。「つく

れる人」というのは、アプリケーションを自分で開発できるような人。「使える人」というのがアプリのユーザーになりますね。

川勝 アプリのユーザーというのは、プログラムのバックグラウンドになる理論は理解できなくてもよいのですか。

中島 それはやはり必要です。「使える人」たちも最低限の理論とアルゴリズムは大学にいる間に勉強してもらうような教育プログラムを策定しています。

金田 ただ、今のプログラムは非常に巨大になっていますから、隅から隅まで読まなければ使ってはいけないということではなくて、使いながら気になったところを勉強していければいいでしょう。

松林 「こんなよい結果が出るのだから何かすごい理論が裏にあるに違いない、だから勉強してみよう」という順番のほうが、結果としては効率が良いのかなと思っています。

藤堂 では、「使える人」をつくるにはどういう教育をしたらいいのでしょうか。

中島 基本的には、商用コードでも、講義を担当する先生自身がつくったプログラムでもいいのですが、それを使っていろいろな結果がきちんと計算できるように教育をするということです。そして、結果を評価できるようなセンス、すなわちエンジニアリングセンスを養うことが重要です。

また、計算機科学に関連することも最低限は勉強してもらい、アプリケーションを開発している人たちとディスカッションができるくらいの知識を大学で身につけてもらえれば、「使える人」としてはけっこうやっていけるのではないのでしょうか。

ポスト「京」に向けた計算機教育とは

藤堂 一方で、ポスト「京」を見据えると、コア数1000万個という教育をしなければいけない。そこで使えるプログラムやアプリはまだで

きていません。CMSIでは、中島さんのような計算機の専門家とアプリの開発者による連続講義を、配信形式でおこなっています。それは受講者も多くて盛況なのですが、この先、もっと上のレベル、エクサスケールまで行けるだろうかという不安があります。

松林 うちの学生も行きましたが、やはり、非常に難しいとの意見が多い。週1回の講義ではなかなか目的に達しないのではないのでしょうか。実効性のあるものにしたかったら、どこかに詰めてもらわないと難しいのでは。

藤堂 実習ですか。

松林 研修ですね。

川勝 それで学生さんは出てくれますか。

松林 極端な言い方になりますが、とにかく行かせるべきで、わかるわからないは別として、どういう業界で働くかわからないから、キーワードだけでも全部インプットして、資料は全部もらってくる。わからなくても、そのうち見るときが来るからという考えです。

金田 確かに、何かあったときに「こんなものがあったな」と思い出すのが重要ですね。

松林 もう一つは、ポスト「京」が出てきたときにそのプログラミングに関与できる人材を育てるのは、別だと思うのです。本当にチューニングなどをしてもらわないといけなくて、テレビ講義の世界ではない。

藤堂 AICSでは毎年HPCサマースクールを開いていますが、対象は大学院生ですか。

中島 大学院生が多いですが、一部ポストドクもいます。内容はごく基礎的なことで、MPIでプログラムがある程度つくれる、理解できるくらいのレベルをまず目指しています。5日間にわたって実施しますが、漫然と並列プログラミング一般を教えるのではなく、ターゲットのアプリケーションを定め、それを並列化するための手法について教えています(注：本年度<2014年8月4日～8日実施>からこのような方針に変更)。これまでの経験でも、このほうが短期間の教育プログラムとしては有効です。



松林伸幸 Nobuyuki Matubayasi

CMSI戦略課題小委員会(第3部会)委員

「企業でのアプリ使用の事例が増えると、計算科学と社会の関わりが見えてきて、基礎と応用の両面に寄与できる人材の育成に役立つと思います」

現在は、有限要素法による三次元定常熱伝導問題を扱っています。ただ、有限要素法を知らない人もいるので、最初の1日は有限要素法そのものとそのプログラミングについて講義をしています。次に並列有限要素法のために必要なMPIについて、あとは実際の並列化について話しています。最後はOpenMPについても講義して、ハイブリッド並列プログラミングまで一通り習得するところまで5日間でこなしています。

内容的には盛りたくさんですが、本年度演習時間を1日2時間くらいは取れました。そのくらいやると、話として知っているというだけでなく、ある程度自分でプログラミングをやったという体験としても残るのではないのでしょうか。まだフィードバックが来ていないので、受講者にどういった受け止められ方をしたかわからないのですが、最後まで一所懸命にやってくれていたのではと考えています。やはり、1週間くらい集中してやると、けっこう身に付きます。

藤堂 そういう教育は、CMSIがやるというよりは、もう少しジェネラルな話なので、AICSであるとか情報基盤センターでやってもらって、うまく組合せてやるのがよいのかなという感

じはしています。中島さんから見た理想の計算機教育、計算機科学者を育てるための理想の教育というのは、どのくらいのことを、どのくらい時間をかけてやるとよいと思いますか。

中島 いちばん重要なのは、先ほど話題になった中間的な人材、いろいろな分野の橋渡しができる人を育成することなのですが、教育では難しい面があります。いろいろなことが制度としては試されています。例えば、専攻は物理で、コンピュータサイエンスの指導教員がもう1人つくということをやっている大学もあります。また、理学系の博士とコンピュータサイエンスの修士をいっしょに3～4年で取れるようにするとか。まずは、そのあたりが制度として大学側でやれることとなります。

本当に世の中の役に立つような中間的な人材となると、ある程度の実務経験を積んでからやらないと難しい。そういう意味では、やはり産学の連携が重要になりますね。

藤堂 実務経験というのは、実際に企業で開発なり研究なりをするということですか。

中島 そういうことですね。いろいろなニーズに応えられるような人をつくるのは、大学だけではできないという気がしています。

金田 企業の現場に行くと、アプリがこういうふうに使われているということがわかりますし、問題意識の持ち方が違う。課題があると、重要なのは時間で、ある限られた時間の中でリソースも限定されていて、それらをうまく使ってどうやってその問題を、100%でなくても80%でもいいから解決できるか考えなければならない。そのために、このプログラムがいいからこれを使うというだけではなくて、ほかにも選択肢があるかもしれないとか、アプリとしては精度は落ちるけど時間が速いからこっちを使ったほうがいいのかもしいかなとか、いろいろな判断をしなければいけなくなる。

そういう意味では、アプリケーションも一つだけではなくて、少なくとも二つか三つくら

いは多少使えるようにしておいてもらって、課題が出てきたときにどれを使ったらいいか考えるようなこともできると、現場では強いのではないかと思います。

CMSIとアカデミアに求められる意識改革

藤堂 先ほど、理学系でシミュレーションをしている人は企業に採ってもらえないという話がありましたが、CMSIとして後押しできることはないでしょうか。

金田 本当は理学系の人たちは基礎的な力があるのだから、どこに行っても大丈夫なはずなのですね。でも、そこがなかなかわかってもらえない。

中島 それを知らせるような機会をもつことが、いちばん重要なのではないですか。

川勝 理学の出身の人が、会社でがんばってくれればいいわけですね。

中島 そういうこともありますよね。

金田 直接的には、材料分野で今ホットなところのシミュレーションで成果を出して、それを企業の人が来ないような学会ではなくて、企業の方が来るようなところで大々的に発表して個人を戦略的に売り出す方法があると思うのです。

松林 「CMSIでこういうことをやるから来てください」だけではなくて、企業の方が集まるところに行って講習会や発表もするわけですね。

川勝 確かに、物理の学生たちはみんな物理学会には行こうとしますが、企業の方がいっぱい行くような学会や研究会を恐がってあまり行こうとしません。

藤堂 それは先生の教育が必要ですね。意識改革をして地道にやっついていかないと、産学連携の夢がしぼんでしまう。学生には、ネクタイの締め方とか名刺交換のしかたも教えないといけませんね。

金田 すそ野を広げていかないと、最後は研究予算も取れなくなりますから、そこは将来的なことを考えるとぜひ。

藤堂 戦略プログラムというのは、これまで研究課題の研究と分野振興の両輪で進んできたのですが、今年の後半からはポスト「京」に向けた研究課題がスタートする予定です。一方、分野振興活動のためのプロジェクトがどのような形で継続していくのか、まだ不透明です。

中島 ポスト「京」を目指すことになると、計算機の大規模化に伴い、アルゴリズムの研究が重要な課題になります。産官学にわたる各分野間の協力が重要になってくるので、CMSIでも推進してほしいですね。

金田 たくさんのプログラムが開発されたのですが、プロジェクトが終わったらどうなるんだろうということがすごく気になっています。よいものを残していくような仕掛けとして、階層の違うものをリンクさせて、連携させて使えるようなプラットフォームを作り上げれば、もっと産業界でも使いやすくなると思うのです。

藤堂 誰がやるかがいちばんの問題ですね。

川勝 共通のプラットフォームやフォーマットをつくって、リンクさせて使えるようにすればいいでしょう。

藤堂 あとは、シミュレーションの結果をどうするかという問題もあります。出力がそれぞれのプログラムでまったく違うので。

川勝 それも共通フォーマットで対応可能です。

金田 国の予算というのは新しいアプリをつくるにはついていても、その後の育てていくところにはつかない。そこは声を高くして要求したほうがいいですね。

松林 大学の先生より、「産業界の要請です」「産業界として育ててもらわないと困ります」と言うほうが効くでしょう。

中島 JST(科学技術振興機構)には産業

応用という枠があって、1回研究開発したものを継続させるときに使うことができるそうです。

松林 そこは、大学の附置研究所の役割としてあってもいいのではないかと思います。

藤堂 CMSIでいうと、物性研や分子研は、今はアカデミアの中だけの共同利用という意識しかなくて、企業の人というのは入りにくい。意識を変えていかないといけないですね。

松林 そうですね。箱があるのですから、いろいろな会社の人にも入ってもらって、日常的に交流できるようにする。1階・3階・5階は大学の研究所で、2階と4階はいろいろな会社のスペースみたいな感じになれば、面白くなっていくと思います。



藤堂眞治 Syngye Todo

CMSI広報小委員会代表

「計算科学を専攻する人が増えているので、産業界に行く人、産学の間立つ人など、いろいろなレベルの人を育てていく必要があります」

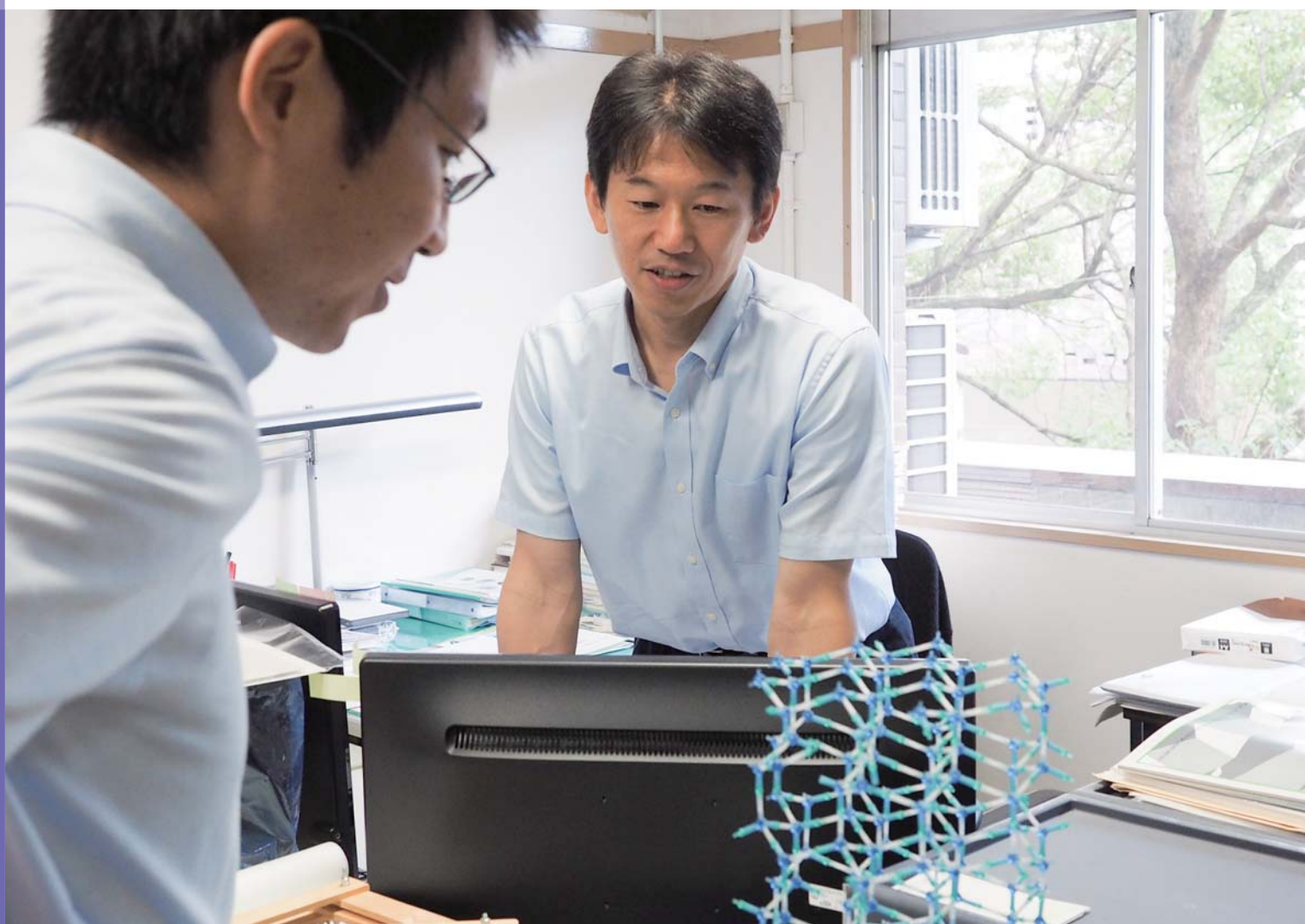
藤堂 附置研究所の役割は次の5カ年計画で大きく変わりそうなところがあります。要するに、運用をやってマシンを貸すだけではなくて、いろいろな支援をする役割を担うべきだと思うのです。これを実現するには意識改革が必要です。ポスト「京」を見据えたとき、意識改革が必要なのはCMSIだけではなく、日本のアカデミアすべてに言えることです。

(2014年9月5日東京大学本郷キャンパスで収録)

構成：福島佐紀子 撮影：由利修一
撮影協力：東京大学情報基盤センター

アプリケーション開発の最前線から 第7回

フェーズフィールド法の開発者・ 高木さんに聞く



話し手：

高木知弘

たかき ともひろ

京都工芸繊維大学工芸科学研究科 准教授

聞き手：

米澤進吾

よねざわ しんご

京大大学理学研究科 助教

あえて境界をぼやかすことでいいものが生まれることがある。例えば、京都の祇園祭に出向けば、山鉦の飾りには西洋や中東からの舶来品が使われており、和洋の境界にこだわらない姿勢がきらびやかな京文化を完成させていることに気付く。1と0に冷徹に支配される計算科学の世界にも、境界をぼやかすことで計算がうまくいくという手法がある。そんな手法である「フェーズフィールド法(PF法)」と、その研究に取り組む京都工芸繊維大学の高木知弘さんを紹介する。

界面をぼやかす計算手法

世の中には「界面」がたくさんある。例えば、水に氷を入れれば、水と氷の境界が界面となる。また、身の回りの金属の中を拡大してみればそこには結晶粒界や組成界面が存在しており、これらがその材料の性質のカギを握っている。そして、界面は動き成長する。前者のケースでは、氷が溶けたり水が凍ったりすれば界面は移動するし、後者のケースでも材料中の界面は温度や外力によって変形していく。こういった界面の挙動は科学的にも工学的にも極めて重要である。

では、界面の変化を正しくシミュレーションするにはどうしたらいいだろうか。単純に考えると、界面の位置を時々刻々と計算すればいいように思える(図1(a))。しかし、しばしば界面の形状は複雑になる。例えば雪の結晶が非常に複雑な構造をしているのは有名な話である。これはまさに氷と水蒸気の界面が雲の中で複雑な成長をしたためである。このように界面が複雑になればなるほど、界面を追っていく方法では計算が困難になってしまう。特に、形状が細かくなると界面の曲率に起因するエネルギーを正しく計算できなくなり、正確なシミュレーションをするうえでは致命的となる。

従来の見方では、界面のこちら側とあちら側と同じ数式では表現できないため、数式の使える範囲(=界面)を常に定義する必要があった。いいかえると、界面でさまざまな数式や変数が不連続に変わる点が問題だったのである。では、発想を変えて、界面を少しぼやかしてしまおう(図1(b))。すると、不連続性は解消され、界面を含めた全領域で数式が滑らかにつながる。しかし、これだと今度は

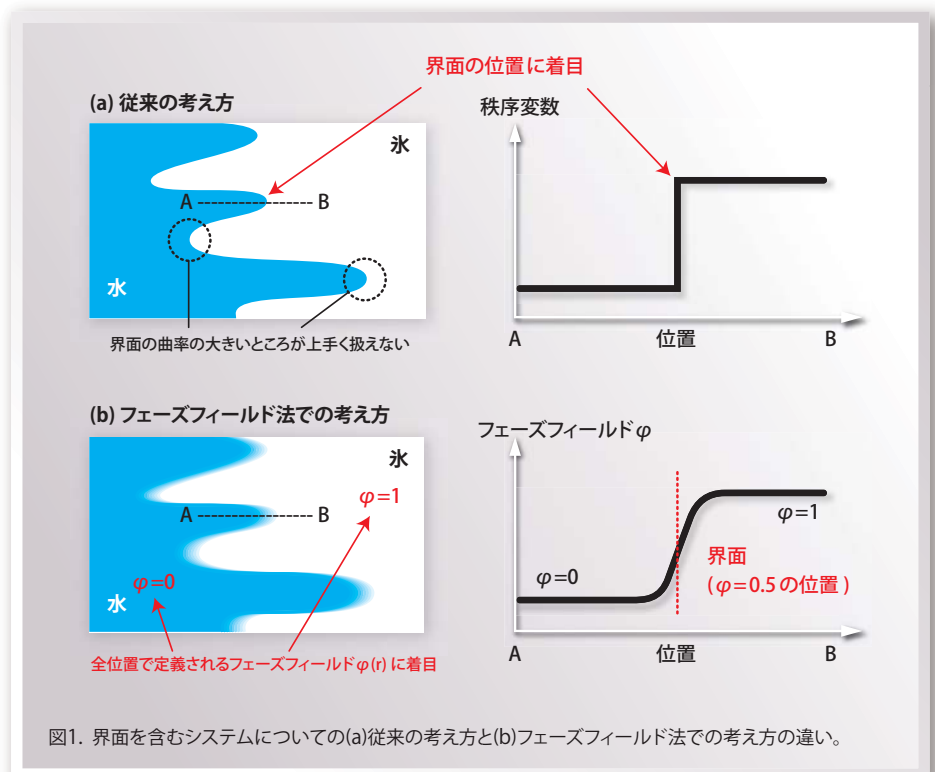
界面をうまく決められなくなってしまうので、全領域で定義され界面付近で急峻かつ滑らかに変化する変数 ϕ を導入する。例えば、氷の中で $\phi=1$ 、水の中で $\phi=0$ となるように決め、界面では ϕ が滑らかに1から0まで変化するようにする。そして、「本当の界面」を ϕ が0.5となる位置とすればよい。この変数 ϕ は界面の両側の相を定義する「場」のようなものなので、「フェーズフィールド(Phase-Field: PF)」と呼ばれる。あとは ϕ と他の諸量の関係を表す方程式やこれらの時間変化を記述する方程式を連立して計算すれば、界面の変化を計算することが可能になる。しかも、このモデルでは界面の曲率エネルギーが自然に取り入れられている。つまり、従来の方法では難しかった複雑な形状の界面の正確なシミュレーションが可能になるのである。このようにPFを導入して、界面を含むシステムを扱う方法

を「フェーズフィールド法(PF法)」と呼ぶ。

PF法の有用性を実証したのは広島大の小林亮さんである。小林さんは、粘菌による経路探索の研究でイグノーベル賞を二度も受賞した、非常に有名な応用数学者である。小林さんはPF法を用いて金属の樹枝状結晶成長のシミュレーションを行い、フラクタルのような特徴的な構造を再現することに成功した。実はこの研究はしばらく論文としては未発表だったが、海外の研究者からの要望にこたえて数年後によく論文化されたという逸話があるらしい。それでもこの論文は600件超の引用数を誇るマンモス論文になっている。

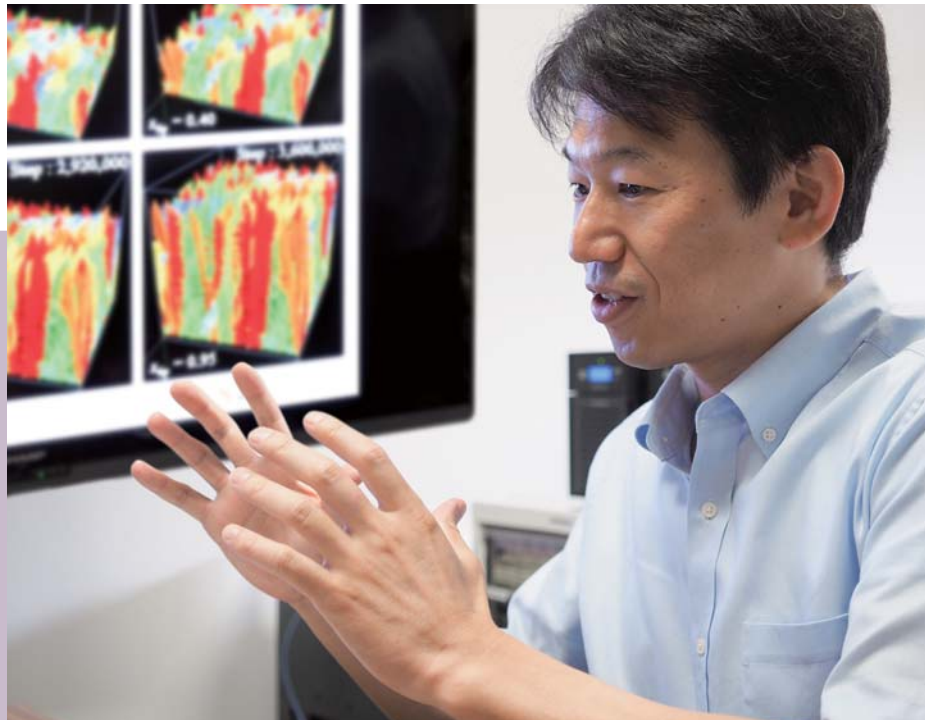
高木さんとPF法の出会い

高木さんは、PF法と出会う以前は機械部品の実験およびシミュレーションの研究をして



高木知弘 たかき ともひろ

京都工芸繊維大学准教授。機械分野だけでなくさまざまな分野にフェーズフィールド法を広めるべく研究している。フェーズフィールド法に関して2011年ゴードン・ベル賞特別賞をはじめとして、APACM Award for Young Investigators in Computational Mechanics、日本機械学会の講演賞・論文賞・業績賞など多数の受賞歴がある。



いた。主に用いていたシミュレーション手法は、物体を細かい領域に分割して計算を行う有限要素法であった。しかし2000年ごろになると、徐々に汎用の有限要素法ソフトが回り始め、企業も積極的に有限要素法に取り組むようになった。そのような状況の中、高木さんは「企業でもできるような研究を大学でやっていていいのか」という思いを持つようになった。そんな中、恩師の富田佳宏さんに提示されたテーマの中にPF法が含まれていた。当時の高木さんの研究対象であったマクロな物体の機械的な性質は、より微視的な結晶組織によって強く支配されている。例えば、日本刀を考えてみよう。刀鍛冶は鉄を熱して叩くことで元の原料よりもはるかに強靱な刀身を作り上げるが、ここには結晶組織構造の変化が大きくかかわっている。高木さんは、結晶組織の作られ方にまで踏み込めるPF法に魅力と将来性を感じて研究対象として取り組むようになった。

高木さんがPF法の研究を始めてすぐに、この方法の強みが理解できた。まず、さまざまな方法との親和性が高いのがPF法の特徴である。例えば、熱拡散方程式と組み合わせれば潜熱を発生する凝固のような現象が記述できるし、流体の方程式と組み合わせると対流のある場合の界面の移動も記述できる。また、機械分野との相性も予

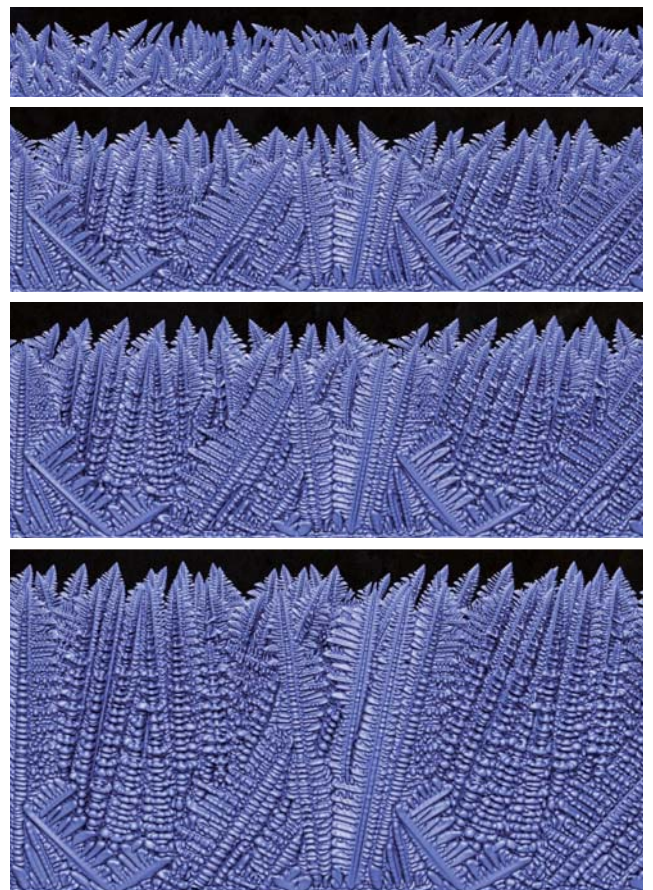
想通り非常に高いことが分かった。高木さんの所属する機械分野の学会でも、当初はほんの数名がPF法の発表をするにすぎなかったが、すぐにこの方法は受け入れられ広まった。「流行にうまく乗ることが出来た面もある」と当時のことを謙虚に振り返る高木さんだが、むしろその流行を作った中心が高木さんだったといえよう。

2007年に京都工芸繊維大学に移った後も、PF法を軸として研究を進めている。PF法を、自分の研究分野に応用する手段として研究する研究者は多い。一方高木さんは「PF法を軸としてできることをなんでもやってみたい」と語る。PF法を研究の出发点としている意味では日本で唯一の「PF法の専門家」といっていいかもしれない。現在では、結晶組織の成長・変化の問題だけでなく、神経細胞の成長モデル、材料内の亀裂発展のシミュレーション、または力を支える構造形状

の最適化など、幅広い分野の研究を手がけている。

スパコンが拓くさらなる実力

PF法の一つの問題点は、計算時間の問



ゴードン・ベル賞を受賞した樹枝状結晶成長のフェーズフィールドシミュレーション。画像提供：東京工業大学 青木研究室

題である。複雑な界面構造を記述しようとするだけで計算に用いるメッシュを細かくしなければならず、計算量が大きくなってしまふのである。特に、シミュレーションを現実役立てようとする三次元の計算が必要になるが、三次元計算に必要なメッシュの数は二次元の場合よりも数ケタも大きく、通常の計算機では手に負えない。そこで、スパコンが威力を発揮する。

スパコンとPF法の相性の良さをまざまざと見せつけたのが、「スパコン界のノーベル賞」とも呼ばれるゴードン・ベル賞受賞(2011年)であろう。高木さんらのグループによる、東工大のスパコンSUBAME2.0を用いた合金の樹枝状結晶成長の数千×数千×数千メッシュもの三次元シミュレーションが受賞対象だ。実はPF法は1メッシュあたりの計算量が比較的大きいため、スパコンの実力を発揮しやすいという特徴をもともと持っているのである。そこに、メモリアクセス方法などに多くの改良を施すことによって、2ペタフロップスという非常に高い実行性能を達成した。高木さんは、受賞によって明らかに「PF法が分野外の人の目につくことが多くなった」という。この受賞がPF法の一つのターニングポイントに後世位置づけられるのは間違いない。

さらにスパコンの実力を発揮すると期待されるのが、マルチスケール計算である。まず、マクロスケールの試料を有限要素法で分割し、それぞれの変形や内部応力などを計算する。通常はここで終わりなのだが、高木さんはそれぞれの要素の中で生じる結晶組織の変化をPF法で計算できるようにしたのだ。この組織変化によって各要素の機械的性質が変わるため、それを反映して再び有限要素法とPF法を繰り返すのである。このように

すれば、例えば「強く変形した部分は固くなる」というような現実的な現象をマイクロレベルで取り込みながらマクロスケールの変形をシミュレートすることが可能になる。こういったマルチスケール計算は、非常に時間がかかるために小さい領域しか扱えなかったが、スパコンを用いれば現実的な大きさの材料のマルチスケール計算も可能になるであろう。

PF法の未来

今後、PF法はどのように発展していくのだろうか。高木さんは、第一に、対流の効果をより正確に取り上げた上での凝固シミュレーションが重要ではないかと考えている。物質が凝固する際には液体側に必ず対流が生じているはずで、それを取り入れなければ再現できない現象も多いはずである。また、第一原理計算のような原子スケールの計算とPF法をつなぐ方法論の構築も必要であるという。これらが実を結べば、材料を作るうえで

のあらゆるプロセスをシミュレーションできるようになり、材料研究に革新を起こせるであろう。第二に、理論と実験をより詳細に比較する地道な取り組みを進めていくことも大切であると高木さんは考えている。

高木さんはPF法の普及にも努めている。PF法に関する話題を集約したホームページ(<http://www.pfm.kit.ac.jp/>)を立ち上げたり、初学者向けの著作を出版したり、講習会を開催したりと、幅広い活動をおこなっている。一方、独立のアプリケーションとして整備するという取り組みはまだ途上である。PF法は単独ではあまり意味を持たず、他の方程式と組み合わせることで意味のあるシミュレーションができる。そのような特性があるため、「何にでも使える一般的なPF法アプリケーション」というのは開発が難しそうである。まずは、ライブラリのように、他のプログラムに組み込むツールとして公開することで、より多くの人がPF法を使えるようにするための第一歩を踏み出していく。

高木さんとPF法が起こすさらなるイノベーションはすぐそこに迫っている。

◆インタビュー後記

米澤進吾 よねざわ しんご

取材は8月の暑い日に行われたのですが、面白いシミュレーション結果を幾つも見せて頂いて、驚きの連続でした。特にマルチスケールのシミュレーションは「こんなことまでできるのか!」と感銘しました。実はフェーズフィールド法の基本式と、私の研究している超伝導状態を記述する理論式はほとんど同じ形式をしており、親近感を感じた取材でもありました。



5

卒業生を訪ねて

齊藤正一郎 さいとう しょういちろう

日東電工株式会社 全社技術部門研究開発
本部機能設計技術センター 第4グループ

大阪大学工学研究科で計算物理を専攻し、半
導体・絶縁体界面の第一原理計算に関する研
究で博士号を取得。日東電工に入社。



製品開発に応用できる シミュレーションをめざす

「卒業生を訪ねて」第5回は、日東電工の齊藤正一郎さんを訪問。
齊藤さんの大学時代の研究から、同社でおこなわれている京コン
ピュータを用いた接着剤のシミュレーションまでをお話いただき
ました。



小西 優祐 こにし ゆうすけ

産業技術総合研究所
ナノシステム研究部門
CMSI産官学連携拠点研究員

京コンピュータも使ったの 研究開発

小西 早速ですが、日東電工ではどのような
研究開発をされているのですか。

齊藤 日東電工は、粘着テープ、高分子膜、
医療部材、情報材料などのメーカーとして知
られています。私の業務は、大きく分けて二
つあります。一つは製品開発に直結する課
題の解決です。さまざまな製品を開発する
際に障害となる技術課題に対して、分子シ
ミュレーション技術を用いてスピーディに解決
していくことが求められます。もう一つは、将
来の製品開発において、必要とされるであろ

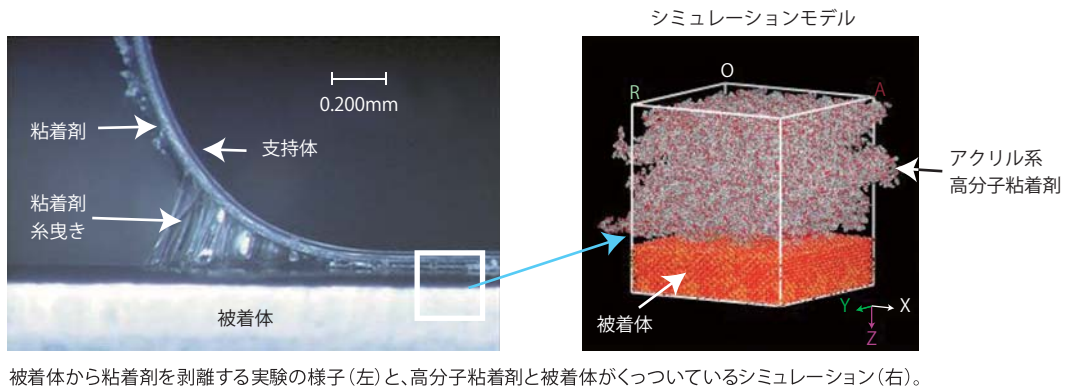
う分子シミュレーション技術の開発です。私
の部署では、ミクロな分子シミュレーションから
マクロな連続体シミュレーションまでをおこなっ
ています。

小西 齊藤さんは電子状態計算などのミク
ロな計算のご担当だということですか？

齊藤 そうですね。電子状態計算も用いて
います。また拡散など、動きが重要になってく
るような系に対しても、分子動力学法を用いて
シミュレーションをすることに挑戦しています。

小西 京コンピュータも使っているそうで
すが、齊藤さんはどんな研究をされているので
すか。

齊藤 数百万原子を用いた粘着剤につい
て、京コンピュータでシミュレーションをおこな
いました。粘着剤は膨大な原子数から成る
高分子が成分であるため、全原子について、
現実系に近い空間スケールのシミュレーショ
ンをおこなうためには、高性能なスーパーコン
ピュータの利用が必要になりました。従来より
も現実系に近い系をモデルとしてシミュレー
ションをおこなうことで、現実的な材料開発に
資する知見が期待できます。このような観点
から、京コンピュータを用いたプロジェクト研
究テーマがスタートしました。私はその中で、
粘着剤の分子構造のモデル化を主に担当し



被着体から粘着剤を剥離する実験の様子(左)と、高分子粘着剤と被着体がくっついているシミュレーション(右)。

ています。シミュレーションのソフトとしては、大規模分子系について並列化効率の高い分子動力学プログラムを利用しています。

小西 どのような結果が得られましたか？

齊藤 粘着剤を基材から剥離するときのシミュレーションをおこない、剥離するときの生じる力の挙動が、実験で観測される挙動と定性的に近いことがわかってきています。

小西 シミュレーションで苦労したことは？

齊藤 まず、実際に京コンピュータ上でプログラムを実行しようとする、エラーでプログラムが終了してしまいました。弊社で使用しているコンピュータと京コンピュータで環境が違うので、プログラムをそのまま京コンピュータに転送してもうまくいかない。プログラムをアーキテクチャに対応させるところで時間を取られてしまいました。

私が担当していたのは粘着剤分子構造のモデル化からモデルの安定化です。粘着剤の分子モデルは、原子の数に対応する自由度だけでなく、分子同士の絡みあい等の自由度が含まれるために、エネルギー準安定構造を決定するのに苦労しました。

学生時代の教訓—正しい情報を伝える基本ルール

小西 齊藤さんは大阪大学工学研究科で学位を取られていますが、どんな研究をされていたのですか。

齊藤 私は、学部4年生のときから小野倫也

助教(現 筑波大学准教授)の下で第一原理計算を用いた研究をしていました。同じ専攻内で、電子デバイスを研究している研究室から、当時シリコンに変わる物質として注目されていたゲルマニウム(Ge)系材料の界面物性の第一原理計算による解析の依頼が小野先生の方からありました。当時、学部4年生だった私が担当することになり、大学院を卒業するまで取り組みました。大学院時代の主な研究はGe系材料の界面物性だけにとらわれず、半導体・絶縁体界面の研究を引き続き行いました。

小西 現在の仕事に生かされているのはどのあたりでしょうか？

齊藤 電子論を用いて物性を考えると実験で観測される現象の理解が深まることも多く、私の知識が役に立っていると考えています。学生時代に学んできたことを利用できているので、自分の武器を生かすことができていると思います。

小西 大学院生活を通じて学んだ教訓は。

齊藤 先生からは、文章の論理構成について多くのことを教わりました。論文だけでなく、メール、日常会話に至るまで、正しい情報を伝える、わかったふりをしないとといった基本的な部分から指導を受けました。それは社会人としても必要なことで、今も心がけています。

小西 企業に就職しようと思った動機は何だったのですか。

齊藤 博士号を取得すると、大学に残るか、企業に行くかということで悩みました。大学

に残ることができたとしても、指導される立場から指導する立場になってしまう可能性もあると思います。私自身にはまだいろいろと学ばなければならないことが多いと考え、企業のように上司や先輩がいる立場のほうが良いのではないかと思ったことが大きかったですね。それで、分子シミュレーションの人材を採用している企業を探して、日東電工に入社しました。

メソスケールのシミュレーションに向けて

小西 入社して2年目だそうですね。仕事への抱負をお聞かせください。

齊藤 弊社には、「チャレンジする人を応援する」という社風があります。私も、分子シミュレーションという枠組みだけでなく、新しいことに挑戦していくつもりです。

小西 計算シミュレーションになりますか？

齊藤 将来的に、日本の製品開発において、シミュレーションの役割は大きなものとなっていくと考えています。近い将来実現するといわれるエクサスケールのコンピュータを使うことができるようになれば、メソスケールのシミュレーションがマイクロなモデルからも可能になると思います。その結果を反映させた製品設計ができればと考えています。また、製品開発に応用できるシミュレーション技術を開発し、お客様にシミュレーションの価値を感じていただけるようにしていきたいと思っています。



東京大学物性研究所

野口博司 のぐち ひろし

東京大学物性研究所 物質設計評価施設／計算物質科学研究センター 准教授

物性科学拠点は物性物理における大規模計算の研究を推進するため、スパコンの共同利用を担うとともに、理論系だけではなく実験系の研究者にも計算機の利用が広がるようにソフトウェアの普及活動や開発支援をおこなっています。その活動を野口博司さんが紹介します。

ニーズに応じて既存ソフトの提供も

物性科学拠点は東京大学物性研究所内に計算物質科学研究センター [Center of Computational Materials Science (CCMS)]として設置されています。物性研は2000年に東京・六本木から千葉県柏市に移転しました。移転当初、キャンパス自体ができたばかりで周辺は閑散としていましたが、2005年のつくばエクスプレスの開業後は人口もほかに増え、今では駅前のショッピングセンターは若い子供連れであふれる活気のある街になっています。

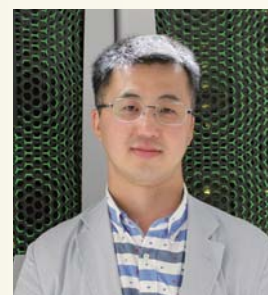
物性研では1995年よりスーパーコンピュータの全国共同利用をおこなっています。物性物理の計算に適した計算機を提供することを第一に考えて計算機の仕様を決めてきました。1995年に導入されたFUJITSU VPP500/40から約5年ごとに更新されてきており、現在稼働中のNEC SX9 (System A) および SGI Altix ICE 8400EX (System B) で4世代目となります。2000年から、主にベクトル的な計算をおこなうシステム A と、超並列スカラ計算をおこなう

システムBの2種類の計算機を供用するようになりました。また、2013年4月より、4.5世代目となるFUJITSU PRIMEHPC FX10 (システムC)を京コンピュータとの連携のため、運用をしています。来年度にはシステムA、Bの更新を控えており、現在、導入へ向け作業をしています。

物性研スパコンでは各自で作成したプログラムコードを用いて計算する利用者がほとんどでしたが、最近は特に第一原理電子計算において既存のソフトウェアを使用する方が増えてきています。そこで、平面波第一原理計算ソフトVASP、局在基底第一原理計算ソフトOpenMX、強相関係格子模型のライブラリALPSについては、コンパイル済みの実行ファイルの提供を開始しました(注：VASPの使用には利用者各自がユーザーライセンスを購入する必要があります)。

高度な並列計算をおこなえる 環境整備のための研究

物性研スパコン共同利用は、国内の研究機関の研究者による物性研究を目的とする



矢田裕行
やた ひろゆき

東京大学理学部卒業後、物性研でスーパーコンピュータの運用が始まった1995年に着任しました。

ユーザにとって使いやすいだけでなく、運用する側にとっても使いやすいシステムが提供できるよう努力していきたいです。

計画であれば、どなたでも利用申請を行うことができます。申請の機会は年2回(6月と12月)の定期申請のほか、特に緊急度の高い大規模計算についてはDクラスとして、お試し計算についてはAクラスとして、随時申請を受け付けています。特にスパコンでなければ実行できない大規模計算かどうかなど、審査員による評価に基づき、CPU時間などの計算資源を配分しています。現在は88名もの審査委員の先生方にボランティアで協力していただいています。また、一般の共同利用とは別に2割の計算資源をCMSIに提供しています。

スパコンの運用をおこなっているのは物性研
 附属の物質設計評価施設設計部(電子計
 算機室)です。川島直輝教授と杉野修准
 教授、私、渡辺宙志氏と笠松秀輔氏の2名
 の助教、矢田裕行氏、福田毅哉氏、荒木繁
 行氏の3名の技術職員が中心となり、所内外
 の先生方の協力の下、業務を進めています。
 特に助教と技術職員の尽力なくしてはとて
 も運用できないので、彼らにはいつも感謝し
 ています。

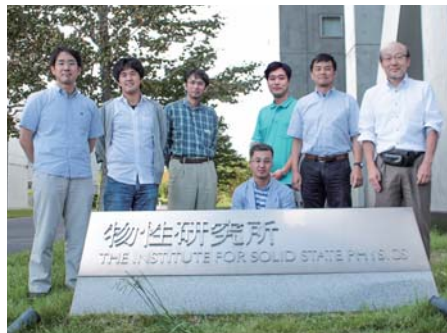
また設計部では、ソフトウェアの開発と公
 開・普及に努め、共同利用者がより簡便に
 高度な並列計算をおこなうことができる環
 境を整備する計画を立てています。その
 ための開発支援をおこなう特任研究員2名
 が2015年4月から新たにスタッフとして加わ
 ります。

CMSIの中核拠点として

CCMSはCMSIの活動をサポートするた
 めに2011年4月に設立されました。メンバ
 ーは常行真司センター長、川島直輝教授をは
 じめ、教授5名、准教授3名、助教5名、特任
 研究員12名、学術支援員2名、事務補佐員
 5名からなります。こう書くとは非常に大所帯

に見えますが、他との兼任や勤務地が神戸
 など他の地域になるメンバーが多く、柏に常
 駐する人員はそれほど多くありません。

設計部がスパコンの共同利用を主におこ
 なっているのに対して、CCMSではソフトウェ
 アの普及、開発支援に特に力を入れていま
 す。CMSI全体の活動として、ソフトウェアを
 紹介するポータルサイトMateriAppsを2013
 年に構築しました。講習会やシンポジウム
 の企画もおこなっており、10月にはALPS
 チュートリアルを開催します。このような取
 り組みを通して、理論家だけではなく、実験家
 にも数値計算を気軽におこなえる環境を整
 えていきたいと考えています。



スパコンの運用にあたる設計部のメンバー。
 左より、渡辺、笠松(助教)、荒木、矢田、福田(技術職員)、
 川島(教授)、杉野(准教授)。

CMSIカレンダー

詳細は CMSI ホームページ
<http://cms-initiative.jp> をご覧ください。

●【配信セミナー】“金属の計算材料物性”
 –マルチスケールのアプローチ–
 日程：2014年11月7日(金)
 場所：東北大学よりCMSIの13拠点に
 配信予定

●CMRIシンポジウム/International
 Workshop on Multiscale Computa
 tional Materials Science
 日程：2014年11月10日(月)～11日(火)
 場所：東北大学金属材料研究所

●International Symposium on
 Extended Molecular Dynamics
 and Enhanced Sampling: Nosé
 Dynamics 30 Years (NOSE30)
 MD計算国際シンポジウム(能勢メモ
 リアル)
 日程：2014年11月10日(月)～11日(火)
 場所：慶應義塾大学日吉キャンパス

●物性研究所計算物質科学研究セン
 ター 第4回シンポジウム・物性研ス
 ーパーコンピュータ共同利用報告会
 日程：2014年11月12日(水)～14日(金)
 場所：東京大学物性研究所

●第9回産官学連続研究会
 「炭素繊維複合材料と分子シミュレ
 ション」
 日程：2014年11月20日(木)
 場所：秋葉原(東京)

●超並列化技術国際ワークショップ
 日程：2014年11月23日(日)、24日(月)
 場所：東京大学本郷キャンパス工
 学部6号館

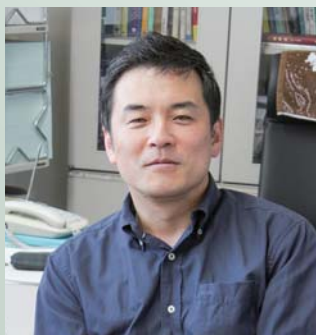
●International Symposium on
 Compuics – Quantum Simula
 tion & Design (ISC – QSD) 2014
 日程：2014年12月1日(月)～3日(水)
 場所：小柴ホール(東京大学本郷キ
 ャンパス)

●立体視プロジェクションシステムを
 使った分子科学研究講演会
 (3DCMS2014)
 日程：12月5日(金)～6日(土)
 場所：九州工業大学情報工学部飯
 塚キャンパス

●第5回CMSI研究会
 日程：2014年12月8日(月)～10日(水)
 場所：東北大学

●TCCIウインターカレッジ：量子化学
 日程：2014年12月15日(月)～16日(火)
 場所：自然科学研究機構岡崎コンフ
 レンスセンター

●第10回 CMSI産官学連続研究会
 「構造用金属(鉄鋼)材料における計
 算材料科学」
 日程：2014年12月19日(金)
 場所：秋葉原ダイビル5階



物性科学拠点長からの メッセージ

川島直輝 かわしま なおき

私が大学院に入った80年代後半は、計算機が大学院生にも
 手軽に利用できるようになってきて、問題の特性を巧妙に生か
 したアルゴリズムが次々と提案されていました。大抵の場合、
 シングルプロセッサでどれだけ速く計算するかを考えればよ
 く、アルゴリズム自体が普遍的な価値をもつと素直に感じられた時代でした。時代は変わって、大規模
 並列計算時代に入っていますが、分散メモリ並列計算モデルで最速の物性計算アルゴリズムはなに
 か、という問題は、依然としてハードウェアの詳細に左右されない普遍的な問いです。計算物性科学研
 究者がのびのびとこの普遍的な問いの答えを考えられる環境をつくることができればと考えています。

拠点研究員のプロフィール

2014年4月にCMSIに着任した拠点研究員を紹介します。

David Sulzer

Molecular Science
Division Researcher

Graduate School of Information Science, Nagoya University

Graduated in physical-chemistry at the University of Strasbourg (France), and received a doctorate in theoretical chemistry in the same university. Engaged in research to enhance solar panel using theoretical methods at the Graduate School of Information Science, Nagoya University.

Motivation for applying for the position

To decipher the properties of matter and propose new technologies, I would like to develop and apply quantum chemistry methods. I think that using them to help finding alternative and more ecological ways to produce energy is an important and motivating purpose.

Mission/Role

To develop a new approach to model and understand the electron transfer process in Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) at the edge between molecular and solid state simulations.



Ambition

Provide a better understanding of the process occurring in DSSC and propose new molecules that could enhance the overall efficiency and cost of currently available solar panels.

西原 泰孝

にしはら やすたか

分子科学拠点研究員

東京大学分子細胞生物学研究所

京都大学大学院で理論化学を専攻、博士(理学)を取得。

東京大学分子細胞生物学研究所でタンパク質の構造と機能の関係を研究。

応募の動機

タンパク質の構造変化の研究対象は、より広い空間スケール・より長い時間スケールにシフトしています。そのため大規模並列計算が必要で、その技術の獲得と応用を行いたいと考えました。

ミッション/役割

カスケード型の分子シミュレーション法のさらなる改良を行うことで、タンパク質・膜系の構造変化を効率良く引き起こす手法の開発に取り組みます。



抱負

タンパク質の動きを分子レベルで解明することで、タンパク質の機能発現のメカニズムの解明や機能制御の手法の確立に貢献したいと思います。

Moshiour Rahaman

Condensed Matter Physics Division Researcher

Department of Materials Engineering, The University of Tokyo

Majored in Materials Science at KTH Royal Institute of Technology, Stockholm and received his Ph.D.

Motivation for applying for the position

Conducting research at the nanoscale level in materials science.

Mission/Role

To develop the non-equilibrium Green's function (NEFG) techniques combined with real-space density functional theory (RSDFT) for investigating the electron transport of nano-materials.



Ambition

Understanding the physical properties of materials using the state-of-the-art first-principles method.

Torrent

No.10 October 2014

2 | 座談会

CMSIが拓いた計算物質科学：
分野振興の成果と次なるステップ

金田千穂子／川勝年洋／中島研吾／松林伸幸／藤堂真治

8 |

アプリケーション開発の最前線から 第7回
フェーズフィールド法の開発者・
高木さんに聞く
高木知弘×米澤進吾

12 |

卒業生を訪ねて 第5回
製品開発に応用できる
シミュレーションをめざす
齊藤正一朗×小西優祐

14 |

CMSIの拠点 第3回
物性科学拠点：
東京大学物性研究所
野口博司

15 |

CMSIカレンダー

16 |

拠点研究員のプロフィール

表紙:この画像は何だと思えますか? 森のようですね。これは、金属の凝固をスパコンで計算した答えです。スパコンで計算すると、小さい金属の森の中を自由に散歩でき、また、遠くから見ることも可能です。小さな世界に支配された大きな現象の解明、スパコンはそれを可能にします(CG制作:高木知弘×京都工芸繊維大学)。

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.10, October 2014

© Computational Materials Science Initiative, 2014 All rights reserved
CMSI(計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム(SPIRE)」
分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 <http://cms-initiative.jp> ISSN 2185-7091

制作協力:サイテック・コミュニケーションズ デザイン:高田事務所



Computational Materials Science Initiative