

計算科学ロードマップ
～ 大規模並列計算によるイノベーションの目指す
社会貢献・科学的成果 ～

今後の HPCI を使った計算科学発展のための検討会

平成 28 年 X 月

目次

第 1 章	序論	1
1.1	はじめに	2
1.2	分野連携・大規模実験施設	3
1.3	将来実現しうる大規模計算機	4
第 2 章	各計算科学分野の課題	5
2.1	素粒子・原子核	6
2.2	ナノサイエンス・デバイス	7
2.3	エネルギー・材料	19
2.4	生命科学	20
2.5	創薬・医療	21
2.6	設計・製造	22
2.7	社会科学	23
2.8	脳科学・人工知能	24
2.9	地震・津波	25
2.10	気象・気候	26
2.11	宇宙・天文	27
第 3 章	アプリケーションの分類	29
3.1	ミニアプリとの対応	30
3.2	計算機アーキテクチャから見たアプリケーションの分類	31
第 4 章	各課題の詳細	33
4.1	素粒子・原子核	34
4.2	ナノサイエンス・デバイス	35
4.3	エネルギー・材料	68
4.4	生命科学	69
4.5	創薬・医療	70
4.6	設計・製造	71
4.7	社会科学	72

4.8	脳科学・人工知能	73
4.9	地震・津波	74
4.10	気象・気候	75
4.11	宇宙・天文	76
第 5 章	おわりに	77
付録 A	用語集	79
付録 B	執筆者一覧	117

第 1 章

序論

1.1 はじめに

1.2 分野連携・大規模実験施設

1.3 将来実現しうる大規模計算機

第 2 章

各計算科学分野の課題

2.1 素粒子・原子核

2.1.1 分野の概要

2.1.2 長期目標と社会貢献

2.1.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.1.4 ロードマップ

2.1.5 必要な計算機資源

2.2 ナノサイエンス・デバイス

2.2.1 分野の概要

半導体材料や高分子材料など、20 世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100 種類ほどの元素の無限とも言える組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という三つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究をつなぐ役割をも担う、広大な学問分野である。

半導体材料や高分子材料など、20 世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100 種類ほどの元素の無限とも言える組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という三つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究をつなぐ役割をも担う、広大な学問分野である。

半導体材料や高分子材料など、20 世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100 種類ほどの元素の無限とも言える組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という三つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究をつなぐ役割をも担う、広大な学問分野である。

コミュニティからの意見は、物質科学分野では、討論会「エクサスケールコンピュータへの期待」(2012 年 7 月 13 日、東大物性研)、日本物理学会計算物質科学インフォーマルミーティング (2012 年 9 月 18 日、横国大)、TCCI 研究会 (2012 年 10 月 9 日、分子研)、計算物質科学シンポジウム (2012 年 10 月 22 日、東大物性研)、CMSI 研究会 (2012 年 12 月 3 日、分子研)、日本化学会特別企画「超巨大計算時代の化学」(2013 年 3 月 25 日、立命館大)、日本物理学会シンポジウム「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」において、実験家、企業研究者も含めたコミュニティ全体に対しロードマップを紹介し、パネルディスカッションなどを通じて意見収集を行った。具体的には、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との連携強化、元素戦略 (磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野) への計算物質科学からの貢献への期待などの意見を得ることができた。また、最先端 HPC だけでなく、非専門家が PC あるいはクラスターワークステーションでシミュレーションを実行できるよう計算物質科学コミュニティ全体でアプリケーション・ソフトウェアを整備することや、莫大なシミュレーション結果や実験結果を保存・公開する仕組みを整備することなどに対する強い要望があった。

この分野における諸外国の動向は、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

各課題の概要は以下の通り。

(i) 次世代先端デバイス科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(ii) 分子機能と物質変換

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(iii) エネルギー変換

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(iv) マルチスケール材料科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

2.2.2 長期目標と社会貢献

物性科学は 10^{23} ほどの膨大な数の原子、分子多体系から成る自然を理解する営みを通じて、相転移にともなう自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジー励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらし、素粒子物理学から経済学まで広がるさまざまな学問分野に大きな影響を与えてきた。

分子科学は、化学反応の理解とそれに基づく新しい分子・分子集合体の創製を通じて、物質科学研究に大きな展開をもたらしてきた。

材料科学は、一辺の長さが原子 10 個分くらいに相当するナノメートルのスケールで物質材料を捉えることにより、金属組織や粒界、複合材料など、材料としての利用に係る諸問題の解決を目指してきた。

これらの成果は、20 世紀以降の産業・先端技術革新を生み出す基盤となった。トランジスタ、トンネルダイオード、半導体レーザー、集積回路、巨大磁気抵抗素子、CCD（電荷結合素子）、有機 EL などの革新デバイス、合成樹脂や導電性高分子などの新材料は、ノーベル賞の受賞対象ともなった物質科学の基礎研究が生んだ例である。同じく物質科学の精華である超伝導は、最先端の医療用 MRI の超伝導マグネットに使われ、更に超伝導リニアモーターやエネルギー損失のない電力線として実用化されようとしている。高効率の太陽電池や高効率熱電素子など、地球規模のエネルギー問題解決に向けた新しい概念に基づくデバイスも、物質科学の基礎研究に基づいて提案され始めている。燃料電池に用いられる白金触媒、色素増感太陽電池に用いられるルテニウム、透明電極に使われるインジウム、リチウムイオン電池材料の

リチウムやコバルトなど供給量が希少、あるいは今後の需要増に応じて希少になると考えられる元素の代替材料を他国に先駆けて開発することが、わが国の産業競争力を高めるためにも必要である。

一方、原子の組み合わせからさまざまな官能基・分子ができ、その多様な組み合わせで、溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質・高分子・クラスレート・ハイドレートなどが形成される。これらの系では、環境の熱エネルギー程度の弱い相互作用の制御によって、分子の認識、分配、分離、輸送といった多様な機能を制御・設計することができ、ドラッグデリバリーシステム (drug delivery system; DDS)、高分子分離膜 (海水淡水化等)、食品・コスメティック、生体模倣材料、化学工学プラント設計、ガス分離、温暖化ガスの吸収、電池電解液、結晶成長といった広範な学術的・社会的ニーズに直結する。

界面系では、凸凹があり不純物も存在する現実系の取り扱いが可能になりつつある。分子素子やナノテクノロジー・トライボロジーの新展開の場であり、環境科学との関連も深い。

20 世紀の要素解明から 21 世紀には集団・階層解明と機能制御の時代に入ったと言われる現代科学の中核として、物質科学における基礎研究のフロンティアでは、量子ホール効果、トポロジ絶縁体、スピン液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新たな機構解明への挑戦が続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術へ展開する研究をますます活性化させているが、この基礎研究から応用研究、更には産業応用への多段階リレーは、高度な蓄積を持つわが国を含むきわめて限られた国でのみ追求し得る。

更に近年、高性能のスパコンを活用することで、近代までに確立された古典力学、量子力学、統計力学に基づいた、ナノ材料の物性・化学のボトムアップ的な予測に期待が寄せられている。

計算科学と実験・理論がタイアップし、次世代の半導体デバイス、触媒材料、各種電池、薬剤、触媒などの設計・開発に役立てることで、地球環境を守り、産業振興を助け、社会を豊かにすることにつながるができる。

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

各課題の長期目標は以下の通り。

(i) 次世代先端デバイス科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(ii) 分子機能と物質変換

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(iii) エネルギー変換

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

(iv) マルチスケール材料科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

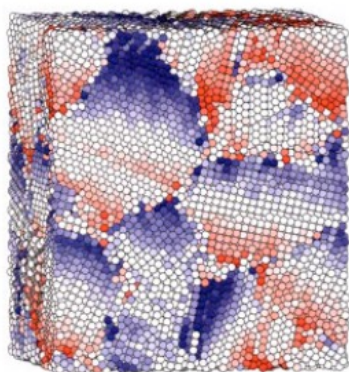


図 2.1 鉄の内部組織

出典：○○○○ (香山正憲 (AIST))

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]、[ダミー原稿]。

2.2.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

計算物質科学で使われるアプリケーションは非常に多岐にわたる。以下、計算物質科学分野における、現在の主要なアプリケーション・アルゴリズムの中から、凝縮系に対する第一原理計算、高精度分子軌道法、大規模分子軌道法、フラグメント分子軌道法、電子・電磁場ダイナミクス法、短距離力古典分子動力学法、長距離力分子動力学法、化学反応動力学法、量子分子動力学法、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法、変分モンテカルロ法、厳密対角化、階層的マルチスケールシミュレーションについてとりあげ、その概略・特性と、今後5～10年で必要となる計算機スペックをまとめる。

(i) 第一原理計算（凝縮系）

半導体材料、磁性材料、光学材料、金属材料などの固体材料を主な計算対象として発展してきた手法が密度汎関数理論（Density Functional Theory(DFT)）に則った第一原理計算手法であり、第一原理分子動力学法やバンド計算法という名前で呼ばれることもある。Kohn-Sham 方程式（一電子シュレディンガー方程式）と、電荷密度分布が自己無撞着場（Self-consistent Field=SCF）を満たすように、波動関数と電荷密度分布を繰り返し更新することで解くこの手法の計算需要は、より大きな系の電子構造を精度よく求めるということの他に、長時間の分子動力学計算や統計的処理を行うことにより反応経路や自由エネルギー差などを評価するという、二つの方向に広がりつつある。前者は大規模化を追求する方向性で

weak scaling 的である。後者には strong scaling を追求するものと、時間やレプリカなど別の軸に関する並列化により計算機能力の向上を有効利用しようとするものがある。また、励起状態、光学特性、電気伝導特性などの物性予測を高精度に行いたいという需要も大きい。

・ $O(N^3)$ 法

扱う原子数 N に対して演算量が N^3 に比例する計算方法を $O(N^3)$ 法、 N に比例する計算方法を $O(N)$ 法（オーダー N 法）と呼ぶ。伝統的な $O(N^3)$ 法の場合、波動関数 Ψ を表現する M 個の基底関数による M 行 M 列のハミルトニアン行列を対角化して固有値を得るために M^3 に比例する計算量が必要になるが、Car と Parrinello の提案した方法とそこから発展した方法では、SCF の繰り返しの中で反復解法を使ってより少ない演算数で固有値問題を解くことができる。基底関数の選び方には、結晶の周期性を利用した平面波を用いるもの、実空間格子点上の値を用いるものなどがある。全電子ではなく価電子だけを陽に扱う擬ポテンシャル法が大規模計算に適している。価電子軌道の数 B とすると演算数は B^2M に比例する。典型的には、 B は原子数 N の数倍程度、 M は 100 倍程度の値であり、 $O(N^3)$ ではあるが M^3 の演算数に比較すればずっと少ない。ここでは擬ポテンシャル法第一原理計算の中で、平面波基底を用いるプログラムとして、PHASE と xTAPP を、実空間基底を用いるプログラムとして RSDFT を挙げて解析する。平面波基底は古典的基底であり FFT を頻繁に使うが、原子位置に対して計算精度が不変、行列要素を厳密に計算するのが容易である。一方、実空間基底は、力の計算精度を上げるのに工夫がいるが、非局所ポテンシャルと波動関数の積の計算負荷が軽いこと、FFT 演算を含まないことなどから大規模化に適しているとされる。また周期境界条件に縛られない $O(N)$ 法への展開が見込める。平面波基底を使う手法で大規模計算を行うためには FFT 演算にともなう通信を極力局所化する必要がある。基底関数が何であれ、一回の SCF ループ内の計算は、(i) グラムシュミット法などにより規格直交化する部分、(ii) 波動関数を残差関数を使って更新する部分（残差最小化法 (RMM)、共役勾配法 (CG)、Block-Davidson 法、最急下降法 (SD) など）、(iii) 部分対角化する（波動関数のユニタリー変換を行う）部分、(iv) 波動関数から電荷密度分布をつくる部分、などからなる。

平面波基底の場合には、負荷の重い部分は、各種の行列・行列積 $O(B^2M)$ と固有値問題 $O(B^3)$ 、FFT 演算 $O(BM \log M)$ などに分解することができる。扱う原子数が多くなるに従い FFT 演算部分の負荷は相対的に小さくなる。波動関数に関する 3 次元 FFT はバンド（軌道関数）と FFT の 1 軸分あるいは 2 軸分を併せて分割することで、核心部のバタフライ演算はノード内（キャッシュ内）に閉じ込めて行い性能劣化を抑えることができる。ただし、分割軸を交換するために局所的な転置転送通信を行う必要がある。非局所ポテンシャルと波動関数の積は $O(B^2M)$ であるが、並列化効率の向上は容易である。これに対し (iii) の部分対角化で使う $O(B^3)$ の固有値問題はそれが難しい。大規模化するためにはこの部分の効率向上が必要であり、数値計算ライブラリの整備に期待する。また、波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている。これに代わる手法の開発も必要である（TSQR 法 (AllReduce QR 法) や Car-Parrinello 法を改良した波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている）。

実空間基底を用いる方法は、FFT 演算にともなう通信を局所化するなどの手間が要らない、非局所ポテンシャルと波動関数の積演算の負荷が軽いという違いはあるが、(i) 規格直交化や (iii) 部分対角化に関

して抱える課題は、平面波基底を用いる方法と同じである。

$O(N^3)$ のアプリケーションは、うえて述べたように大規模化と、規模の拡大よりも動的性質を予測するといった方向性の両方を指向するが、ここでは RSDFFT では 10~100 万原子規模の計算を目指し、平面波基底の手法は 1 万原子規模の系の動的性質を予測する方向を目指すものとして評価を行う。

(ii) 高精度分子軌道法

分子軌道法は、基本となる Hartree-Fock 法を出発点とし、摂動法、結合クラスター法、配置間相互作用法などにより電子相関を取り込み、計算精度を系統的に引き上げられるという特徴がある。行列積、行列対角化、連立一次方程式計算、そして基底関数の軌道角運動量によって演算内容が異なる 1 電子・2 電子積分計算が主な演算で、計算対象分子を分割しない限り、どの方法でも全対全通信を行う必要がある。電子相関計算では、中間データ量が系の 3 乗もしくは 4 乗に比例して増加するため、各ノードに分散させてもノード当たりの必要メモリ量は多くなる。

エクサスケール計算機では、分光学的精度で分子構造や機能を予測することが期待される。この目標は、露わに相関した結合クラスター法を完全基底関数極限で解くという、超高精度電子状態計算で達成される見込みである。ここで、電子相関の計算で必要になる 4 中心 2 電子分子軌道積分を、3 中心 1 電子分子軌道積分と求積点での分子軌道の値の積から数値求積法により計算する。多電子積分計算についても同様に数値求積法で行う。求積法で 2 電子積分を計算する部分と、それに続く計算部分をまとめることで演算量を減らすとともに、計算負荷およびデータ分散を容易にする。主要な演算は行列-行列積である。各ノードに分散されている求積点ごとのデータを集めるため、通信は allreduce、gather が大半である。以下、基底関数極限のフラレン分子 (2 万基底、100 万求積点) の計算、1 ノード性能 100TFLOPS、全体性能 1EFLOPS を想定して見積もりを行う。

【メモリ】 2 万 × 100 万 (160GB) の配列が 4 つ、更にその他の配列も考慮して 1 ノード当たり 1B が必要になる。メモリバンド幅は、(2 万 × 100 万) × (2 万 × 2 万) の行列積演算では、1 度だけメモリからデータが送られると仮定すると 40GB/s、余裕を見て 100GB/s が望まれる。一連の操作を波動関数が収束するまで数十回繰り返し行う。

【オンチップメモリ】 求積法で計算する 3 中心 1 電子積分用として 1GB 程度は必要になる。

【通信】 2 万 × 100 万の配列を gather で集めた後、上記の行列積演算を 4 回続けて行うので、計算時間の 1 割で受信を完了させるためにはノード当たり 50GB/s のバンド幅が必要になる。

【ストレージ】 計算中のデータはすべてメモリに保存するため、出力するファイルは計算結果のみである。そのサイズは 100TB 程度であり、0.01TB/s のファイル I/O 性能が必要となる。

(iii) 大規模分子軌道法

Hartree-Fock 法、密度汎関数法によるナノスケール分子の計算を行う。大部分が 2 電子クーロン反発積分の計算であり、演算自体は複雑であるが比較的少量のデータを何度も利用するという特徴がある。Gauss 関数の局所性を利用するため、IF 文によるカットオフを多用している。3 次元ナノスケール分子 (1 万原子系、10 万基底) 計算を想定すると、30TFLOPS マシン 1 万ノードの場合、計算時間は 1 回当たり 30 分である。安定構造を求めるためには、この計算を数十回繰り返す。

【メモリ】 10 万×10 万 (80GB) の配列を、Fock 行列、正準化変換、基底重なり、分子軌道、密度行列用に 5 つ用意するため、1 ノード当たり 400GB 必要になる。10 万×10 万の行列積をうため、密度汎関数計算での数値積分で 1 原子当たり 1 万点グリッドを発生させる場合、ノード当たりの Fock 行列へのアクセスデータ量は、10 万×10 万×1 万 (点数/原子) × 1 万 (原子 / 1 万 (ノード)) × 8Byte = 800TB となる。カットオフによるデータ量削減 (約 10% に削減) 考慮し 1 分でこのアクセスを完了させるためには、ノード当たりのバンド幅は 1.8TB/s 必要になる。

【オンチップメモリ】 2 電子積分計算のため、1 コア当たり 1MB 必要となる。これは、(gg|gg) 型積分では、15 × 15 × 15 × 15 のサイズの配列にデータを蓄え、同等程度の計配列も必要になるためである。

【通信】 計算 1 回 (30 分) あたり、80GB 配列を allreduce で集める操作を 30 回程度行う。通信時間を全体の 5% にするには、バンド幅 30GB/s が必要になる。

【ストレージ】 出力するファイルは計算結果のみで、そのサイズは 100GB 程度である。ファイル I/O 性能は 0.0001TB/s 程度で十分である。

(iv) フラグメント分子軌道法

フラグメント分子軌道 (FMO) 法は並列処理を駆使し、タンパク質の電子状態を量子論 (QM) 的に丸ごと計算することが可能な手法の一つである。FMO 計算は実際には、基本の Hartree-Fock から高次相関法まで多種の近似がある。一般に相関計算では、DGEMM 等の BLAS を使ったテンソル縮約が支配的で、軌道の添字を複数持つ多次元配列の操作となるために B/F が高いほうが性能的には有利である。ただし、タイリングやブロッキング等を適宜導入することで 0.1 程度までは性能の保持が可能である。メモリ要求値に関して述べれば、FMO2 のダイマーでクラスター展開の計算では、作業配列の総容量はアミノ酸残基の組み合わせと基底関数にもよるが、数十 GB には容易に達する。

現時点で、数百残基のタンパク質の PDB 構造をベースにした一点での FMO2 計算はルーチン的に行えるようになってきているが、より実在的なモデリング手法として信頼性を高めるには、水和条件を課したうえで揺らぎを考慮するために分子動力学的に生成された多数の構造サンプルを扱った統計的な算定が望ましい。また、3 体や 4 体の展開 (FMO3、FMO4) を行うことが、精度向上の観点から望ましい。フラグメントのトリマーやテトラマーの相対計算コストは数的には単純組み合わせよりは少ないが、個々のサイズが大型化するために増加する。2 次摂動で数百残基のタンパクを扱う場合、FMO2 に比して FMO3 で 3~5 倍、FMO4 では 10 倍程度である。サンプル数の設定によるが、FMO4 で相関レベルを上げることまで考えれば、現行計算に比して要求される計算コストは数万~十万倍になるため、エクサ計算機で“統計的ジョブ”の高速実行が可能となれば、その科学的な恩恵はきわめて大きくまた本質的なものとなる。

FMO 計算は、光応答タンパク質の電子遷移エネルギーの定量的な算定でも使われてきている。これは、応答部位 (クロモフォア) を特定したうえで限定的に励起状態計算を行うものだが、エクサ級の超並列計算資源があれば、タンパク質全体について求めることも可能であろう。物性値評価としても、2 次高調波などの非線形光学応答核磁気共鳴などの磁気応答などもカバーされる。光合成系 (PSC) の電荷分離のモデリングについても、FMO 計算から得られるフラグメント MO を再構成する (FMO-LCMO) などの技法を用いて大域での電子移動度の算定が行えるようになると思われる。そこでは数千万次元の非疎行列の固有値問題を解く必要がある。

計算機環境について付言すると、米国の NWChem ですでに活用されている多ノード共有メモリ空間構築と行列積ツール (GA) 等が提供されると大規模フラグメントの処理には福音となると思われる。また併せて、ノード間をまたぐスレッドベースの並列化もサポートされるとコードの発展には有利であろう。“統計ジョブ”に関連しては、計算結果をダンプする半導体メモリ (SSD) とともにフォルトトレランス機構が考慮されることが望まれる。

(v) 電子・電磁場ダイナミクス法

光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを理論的に設計するための、電子・電磁場ダイナミクスの数値計算シミュレーションソフトウェアである。対象とする系は、1 辺十数 nm から数十 nm 程度の実在系ナノ構造体。原子数は 100 万原子から 200 万原子、時間ステップ数は 2.5 万～5 万ステップである。

【アルゴリズムの説明】 時間依存 Kohn-Sham 方程式 (方程式の形は時間依存シュレディンガー方程式と同一) を実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解く。 x, y, z 方向の格子点数を各々 N_x, N_y, N_z とすると、実空間グリッドの総数は $N_x \times N_y \times N_z$ となる。主要な演算は、ハートリーポテンシャルを価するためのポアソン方程式の計算、時間発展計算にともなうハミルトニアンの変動関数への作用の二つに大別できる。いずれにもラプラシアンの変動関数が含まれており、その演算は、 $((N_x \times N_y \times N_z) \times (N_x \times N_y \times N_z))$ の疎行列と $(N_x \times N_y \times N_z)$ のベクトルとの積と等価である。ただし、実際の計算では疎行列そのものを扱うのではなく、縮約してベクトルとベクトルの積に帰着する。マクスウェル方程式も実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解くが、Kohn-Sham 方程式に比べればその計算負荷は格段に低いので相対的に無視できる。

【想定する計算】 光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを設計するためには、最低 50000 ステップの時間発展が必要となる。C60 分子を立方体空間に 25 個 \times 25 個 \times 25 個 \sim 16000 個並べる系を想定してスペックを見積もる。この場合、原子数は 60 \times 16000 分子 \sim 960000 個軌道数は 120 \times 16000 分子 \sim 1.9M 軌道となる。

【想定する計算機】 時間発展 1 ステップ当たり 1 秒で計算を行うためには、630PFLOPS のシステムが必要になる。

【計算空間総メッシュ数】 メッシュサイズを 0.25 とすれば 1 辺当たり 33nm \div 0.25 \sim 1300。したがって、総メッシュ数は $(1300)^3 \sim 2.2G$ となる。

【総演算量】 1 ステップ当たり 2.2G(総メッシュ数) \times 1.9M(総軌道数) \times 30 回 (差分法演算回) \times 5 回 (テラー展開 4 次 + 軌道エネルギー評価) \sim 630P 回。

【総メモリ量】 計算グリッド上に波動関数をストアしておくためのメモリがほとんどを占める。2.2G(総メッシュ数) \times 1.9M(総軌道数) \times 16B(複素数) \times 3(作用前波動関数用配列、後波動関数用配列、テラー展開での総和の波動関数用配列) \sim 200PB。

【ネットワークバンド幅】 1 ステップ当たり 2.2G(総メッシュ数) \times 8B(実数) \sim 18GB の電子度用データの Allreduce による通信が発生する。通信を全実行時間の 1 割と考えるとノード当たり 180GB/s 必要となる。

【メモリバンド幅】 1 ステップ当たりの総メモリ量を 1 秒でアクセスするために 200PB/s 必要となる。

【オンチップメモリ】 1 軌道当たりが必要とされるメモリ量は 2.2G(総メッシュ数) \times 16B(素数) \times 3(波動関数用配列数) \sim 110GB。空間を 125 分割 (5 \times 5 \times 5 分割) して、各ブロック内分法演算に使う

データをすべてオンチップ上に載せるためには 0.9GB 必要になる。

【ストレージ容量】 波動関数を入力として読み込むために、 $2.2\text{G}(\text{総メッシュ数}) \times 1.9\text{M}(\text{軌道数}) \times 8\text{B}(\text{実数}) \sim 33\text{PB}$ が最低必要となる。

2.2.4 ロードマップ

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
半導体電子デバイス	100万原子系の第一原理計算($O(N)$ 法) ← 1万原子系の第一原理計算($O(N^3)$ 法) →			1000万原子系	1億原子系 ← 10万原子系 →	
光・電子材料	10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス ← →				数10nmの実在系ナノ構造体 ← →	
生体分子機能・創薬	1000万原子系の古典分子動力学計算 ← →			1億原子系 ← →	10億原子系 ← →	
分子構造・分子機能	ナノスケール分子系の高精度計算 ← →			分光学的精度での分子構造の予測 ← →		
ソフト分子		量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化 ← →			マルチスケール手法の開発、統計力学理論の高度化 ← →	

図 2.2 物質科学ロードマップ (1)

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
物質・エネルギー変換	数百原子系のQM/MM-MD ← →		1000原子系 ← →		数千原子系 ← →	
界面・表面	10nmサイズの気相・固相界面 ← →		数十nmサイズ ← →		100nmサイズの気液界面 ← →	
構造材料	数百パラメータのマルチスケール計算 ← →		数千パラメータ ← →		数万パラメータ ← →	
熱交換デバイス	100億原子系の分子動力学計算 ← →		1兆原子系 ← →		100兆原子系による気液混相流 ← →	
強相関電子系	100万格子点の量子モンテカルロ計算 ← 1000格子点の変分モンテカルロ計算 →		1000万格子点 ← 数千格子点 →		1億格子点の量子磁性体 ← 1万格子点の強相関材料 →	

図 2.3 物質科学ロードマップ (2)

2.2.5 必要な計算機資源

「物質科学」要求性能表

	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模
次世代先端デバイス	100	100	1.2	10	96	10	350000	第一原理計算 RSDFT(擬ポテンシャル法、実空間基底)	原子数：10 万
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2.2×10^6	第一原理計算 PHASE(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数：1 万 100MD を同時実行
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2.2×10^6	第一原理計算 xTAPP(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数：1 万 100MD を同時実行
次世代先端デバイス	100	20	5	10	240	10	860000	第一原理計算 CONQUEST(密度行列、最適化による $O(N)$ 法)	原子数：1 億 2 f s の時間刻みで 2 5 0 0 0 でナノ秒オーダーを想定 計算時間は要注意。時間ステップ数 10^4 。電子材料の電子状態計算・手法 1 と同じ計算だが、こちらは個々のケースを高速に計算する必要があり、ネットワーク性能をより要求する。ストレージ量の違いは出力頻度の違いによる。
光・電子デバイス ¹	1000	10	10	0.1	1	100	360000	高精度分子軌道法	2 万基底、100 万求積点
分子機能	300	18	4	0.0001	15	10	160000	大規模分子軌道法	原子数：1 万
分子機能（タンパク質の電子状態）	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	フラグメント分子軌道法	数百残基のタンパク質、数千万次元の密行列の固有値問題
熱交換デバイスの安全性向上・特性解析	20	6.4	51	44	24	10	17000	短距離古典分子動力学	粒子数：4000 億
分子機能と物質変換	1000	100	2	1000	150	10	5.4×10^6	長距離古典分子動力学	原子数：10 億
光・電子材料	600	200	200	33	14	10	300000	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	原子数：96 万，時間は 1 ステップあたり 1 秒で計算量は 0.63EFLOP。これを 50000 ステップでおよそ 14 時間
強相関電子系の機能解明 ²	3	390	10	10	10	100	11000	クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	原子数：1 億
強相関電子系の機能解明 ³	1000	300	0.2		8	100	2.9×10^6	変分モンテカルロ法	原子数 1 万 (次ページに続く)

「物質科学」要求性能表（続き）

	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模
物質・エネルギー変換 ⁴	500	50	0.008	6.4	2.8	10	50000	量子分子動力学法	1000レプリカ、100万ステップ
物質・エネルギー変換 ⁵	690	69	2	3.2	300	10	7.4×10^6	化学反応動力学・量子分子動力学法（分子軌道計算またはQM/MM）	QM1000 原子、10000 レプリカ、10000step, MM100,000 原子 (roadmap)
物質・エネルギー変換 ⁶	410	41	0.02	0.05	20	10	300000	化学反応動力学・量子分子動力学法（第一原理計算）	数万レプリカ
分子構造・分子機能 ⁷	1000	0.5	0.04		24	1	86000	分子動力学法（feram によるリラクサー強誘電体の誘電率の周波数依存）	512x512x512
新物質探索	4100	41	20		0.5	1	7400	クラスター展開法（第一原理計算）	原子数：1 万, 100 イオン配置の同時実行
新材料 ⁸	0.1	0.02	0.00012		24	10000	86000	第一原理計算（凍結フォノン法）	原子数：1 万
強相関電子系の機能解明	82	130	82	41	42	10	120000	厳密対角化（ランチョス法）	54 サイトのスピンの系 (S _z =0)
新物質探索 ⁹	690	1600	1.5	20	24	20	1.2×10^6	フェーズフィールド法	10 ¹³ 空間メッシュ、10 ⁷ 時間ステップ

¹ 100～1000 くらいのアレイジョブを想定² 整数演算がメイン³ メモリ使用量は MPI プロセス数に比例し最大使用量を記載した⁴ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁵ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁶ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁷ アレイジョブでノード間通信なし⁸ PHASE の 1/10 の規模であることから、同時実行はこの表では想定していない⁹ 1 ノード 100 TFLOPS, 10000 ノード並列を仮定

参考文献

- [1] 押山淳, 天能精一郎, 杉野修, 大野かおる, 今田正俊, 高田康民. 計算と物質 (岩波講座計算科学第3巻). 岩波書店, 2012.
- [2] 日本化学会編. 巨大分子系の計算化学 超大型計算機時代の理論化学の新展開. 化学同人, 2012.
- [3] 日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会. 理学・工学分野における科学・夢ロードマップ. <http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-21-h132.html>, 2011.

2.3 エネルギー・材料

2.3.1 分野の概要

2.3.2 長期目標と社会貢献

2.3.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.3.4 ロードマップ

2.3.5 必要な計算機資源

2.4 生命科学

2.4.1 分野の概要

2.4.2 長期目標と社会貢献

2.4.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.4.4 ロードマップ

2.4.5 必要な計算機資源

2.5 創薬・医療

2.5.1 分野の概要

2.5.2 長期目標と社会貢献

2.5.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.5.4 ロードマップ

2.5.5 必要な計算機資源

2.6 設計・製造

2.6.1 分野の概要

2.6.2 長期目標と社会貢献

2.6.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.6.4 ロードマップ

2.6.5 必要な計算機資源

2.7 社会科学

2.7.1 分野の概要

2.7.2 長期目標と社会貢献

2.7.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.7.4 ロードマップ

2.7.5 必要な計算機資源

2.8 脳科学・人工知能

2.8.1 分野の概要

2.8.2 長期目標と社会貢献

2.8.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.8.4 ロードマップ

2.8.5 必要な計算機資源

2.9 地震・津波

2.9.1 分野の概要

2.9.2 長期目標と社会貢献

2.9.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.9.4 ロードマップ

2.9.5 必要な計算機資源

2.10 気象・気候

2.10.1 分野の概要

2.10.2 長期目標と社会貢献

2.10.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.10.4 ロードマップ

2.10.5 必要な計算機資源

2.11 宇宙・天文

2.11.1 分野の概要

2.11.2 長期目標と社会貢献

2.11.3 課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション

2.11.4 ロードマップ

2.11.5 必要な計算機資源

第 3 章

アプリケーションの分類

3.1 ミニアプリとの対応

3.2 計算機アーキテクチャから見たアプリケーションの分類

第 4 章

各課題の詳細

4.1 素粒子・原子核

4.2 ナノサイエンス・デバイス

4.2.1 現在行われている課題

半導体材料や高分子材料など、20 世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100 種類ほどの元素の無限とも言える組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という三つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究をつなぐ役割をも担う、広大な学問分野である。

物質科学分野における大規模数値シミュレーションは、古くは Fermi-Pasta-Ulam の非線形励起・再帰現象、剛体球の Alder 転移などの概念革新への寄与に始まり、現代量子多体系では、分数量子ホール効果の数値検証、相転移と臨界現象の解明、高温超伝導の機構提案など、物質科学の基礎研究に欠かせぬものとなった。この分野では、電子状態を量子力学に基づいて第一原理的に計算する手法として、波動関数理論に基づいた量子化学計算や量子モンテカルロ計算、密度汎関数理論に基づいたバンド計算がある。また、大規模な原子・分子系の集団運動を古典力学・統計力学に基づいて計算する古典分子動力学法、古典モンテカルロ法などの分子シミュレーションがある。更に、物質を粗視化した連続体として扱う方法として、有限要素法やフェーズフィールド法がある。特に産業応用に直結する領域においては、単一の大規模ジョブだけでなく、アレイジョブ、すなわちパラメータサーチも重要となってきた。

物質科学分野においては、現在「次世代先端デバイス科学」、「分子機能と物質変換」、「エネルギー変換」、「マルチスケール材料科学」といった社会的にも重要な課題群に、それらの源流とも言うべき「新量子相・新物質の基礎科学」を加えた 5 つの課題が「京」コンピュータを用いて重点的に進められている。

(i) 次世代先端デバイス科学

半導体テクノロジーはポストスケーリング時代を迎え、ナノドット、ナノワイヤーなどの構造体が次世代デバイスに不可欠な要素となっている。それらナノ構造体の構造的安定性と電子機能についての高精度の予測を目指し、主に密度汎関数法に基づくシミュレーション技術が確立されてきた。海外では、ABINIT (白)・CASTEP (英)・CONQUEST (英日)・CP2K (欧)・CPMD (独)・QUANTUM ESPRESSO (伊)・SIESTA (西)・VASP (奥)・WIEN2K (奥)、また国内では、ASCOT・CMD・FEMTECK・OPEN-MX・PHASE・QMAS・RSDFT・TAPP・TOMBO・UVSOR など、それぞれ特色のあるコードが開発されている。国内ソフトウェアでは、超並列計算の実績のあるものも多く、代表的なものとしては、「京」コンピュータで 3PFLOPS (44% の実効効率) を達成し 2011 ACM Gordon-Bell Prize を受賞したプログラム RSDFT、初代地球シミュレータ 512 ノード (4096CPU) で 50% の実効効率を出したプログラム PHASE (12,288 原子系を「京」12,288 ノードで 23% の実効効率) などがある。これらの高度に最適化・高速化されたソフトウェアにより、1,000~100,000 原子規模のナノワイヤーの電子状態や伝導特性の計算、1,000,000 原子規模の Ge ナノ構造の解明などが進んでいる。

一方、実在系ナノ構造体を対象とした光・電子デバイスの第一原理計算に基づく理論設計の試みは、現状では国内外ともにほぼ皆無と言ってよいが、わが国ではデバイス設計に不可避である光と物質の露わな

相互作用を取り込んだナノ光学理論に基づく電子・電磁場ダイナミクス法プログラムが、「京」コンピュータ 24,576 ノードでの実機稼働に成功しており、十数ナノメートル程度のナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクスであれば十分に計算可能な状態となっている。今後、2016 年までの間に更なる超並列化を行い、実在系ナノ分子構造体を対象とした光・電子デバイス設計に展開する。

(ii) 分子機能と物質変換

分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の分子科学の確立を目指して、自己組織化により形成されるナノスケールの分子・分子集団の構造に基づき創成される機能の解明、環境との相互作用下での分子の電子状態に立脚した機能発現メカニズムの解明などが進んでいる。計算科学的手法としては、古典分子動力学法、自由エネルギー計算、FMO や分割統治法に基づく量子化学計算、およびそれらを組み合わせた、QM/MM 法、ONIOM 法、レプリカ交換法などが用いられている。

分子動力学計算においては、国内外でさまざまな競合ソフトウェアが開発されている。国外では AMBER (米)・CHARMM (米)・DESMOND (米)・GROMACS (蘭)・LAMMPS (米)・NAMD (米)・TINKER (米)、国内では MARBLE・MODYLAS・MPDYN・PEACH・PLATYPUS などがあり、非常に多岐にわたる。その中でも日本発の長距離古典分子動力学計算プログラム MODYLAS は、長距離相互作用計算に高速多重極展開法を導入し、更に隣接通信を最適化することにより「京」65536 ノードで実行効率 41.1%、並列化効率 80.9% を達成した。更にウイルスとレセプターからなる 1000 万原子系に至る巨大系に MODYLAS を適用し、生体のウイルス認識の分子論を展開している。

(iii) エネルギー変換

化学結合エネルギー、電気エネルギー、太陽光、熱エネルギーの間の相互変換における物質の機能の役割を明確化し、エネルギー変換の大幅な高効率化につなげるための計算手法の開発、コード開発、シミュレーションが進められている。燃料電池やリチウムイオン 2 次電池における電気化学過程、色素増感型の太陽電池の界面構造などの研究には、主として大規模な第一原理分子動力学計算が用いられている。また、水素・メタンハイドレートの熱力学過程の解明には古典分子動力学法などが、バイオマス利用における酵素反応の解明には有効媒質法 (3D-RISM 法) などが有効である。わが国においては、いずれのシミュレーション手法についても大規模並列環境への最適化・高度化が進んでおり、理論的な蓄積と合わせて国際的にも優位な立場にある。

(iv) マルチスケール材料科学

実用材料の飛躍的高性能化に向けて、マルチスケールシミュレーションで材料組織を設計し、評価する試みが進んでいる。一例として、高精度の自由エネルギー計算による相図計算、各相の自由エネルギーや界面・粒界・欠陥の第一原理計算と、フェーズフィールド法・分子動力学計算・モンテカルロ法などとの連結が挙げられる。これらの連成計算では、各スケールの計算規模はそれほど大きくないものの、それらを効率的に組み合わせて実行する必要がある。下部計算となる第一原理計算では、ABINIT・QMAS・TOMBO・OPEN-MX など国内外で開発されたさまざまなソフトウェアが対象に応じて使い分けられる。第一原理計算の結果を用いた上部計算 (分子動力学計算) を行う FERAM などのソフトウェアも開発され、広く使われている。

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

粒子間の相互作用の強い分子系や凝縮物質を取り扱う強相関多体量子科学・計算科学の汎用的手法の開発が進み、新奇な量子多体現象の発見と機構解明、新しい量子機能を持つ新物質の探索、化学反応や分子集団の非平衡ダイナミクスの理解を目指して研究が進められている。

強相関量子多体系のモデル計算については、厳密対角化や密度行列繰り込み群 (DMRG)、変分モンテカルロ法や世界線量子モンテカルロ法などさまざまな手法により、鉄系超伝導体・銅系超伝導体の機構解明、強相関電子系のダイナミクスの解明、新しい量子臨界現象の解明などが進んでいる。国内においては、「京」24,576 ノードでピーク性能比 10% 以上を達成した変分モンテカルロ法 MACE/mVMC、ピーク性能比で 70% を達成した動的密度行列繰り込み群法 DDMRG など、大規模並列環境への最適化も進んでいる。この分野は手法自体の発展が速く、コミュニティコードと呼ばれるものは、まだ十分に育ってきているとは言えないが、ALPS など量子格子模型に対するソフトウェアパッケージの開発も進みつつある。その中でも世界線量子モンテカルロ法 ALPS/looper は、非局所グラフ操作など従来の計算機が不得手とする演算が主体であるにもかかわらず、「京」24,576 ノードで MIPS ピーク性能比 10% 以上の性能を達成している。

一方、量子化学計算については、ADF (蘭)・GAUSSIAN (米)・GAMESS (米)・NWChem (米)・MOLCAS (典)・MOLPRO (独)・QCChem (米)・TURBOMOLE (独) など欧米各国では一般ユーザにも使いやすい汎用コードの開発が進んでいる。日本においても ABINIT-MP (X)・GELLAN・OPEN-FMO・NTChem・PAICS・PROTEINDF などが開発されている。しかしながら、超並列環境への対応は十分とは言えない。しかしながら、国内で開発されている量子化学計算プログラム GELLAN は、超並列機に対する最適化が進んでおり、「京」24576 ノードで実行効率 28%、並列化効率 80% を達成した。更に、ほぼ基底関数極限での露わに相関した 2 次の摂動法で C60 フラーレン 2 量体の相互作用エネルギーの計算を行い、ナノスケール分子系の超高精度計算が実現可能になったことを示した。

このように、物質科学全般において、国内外で超並列環境に最適化された大規模ソフトウェアの開発が進められている。一方で、基礎理論自体が多層構造をなしており、それぞれのレベルにおける方法論が非常に多岐にわたり、かつそれぞれが相補的に発展してきたことが、物質科学のもう一つの大きな特徴である。シミュレーションの大規模化・精密化を進めると同時に、全く新しい基礎理論・モデルの提唱、シミュレーション手法の開発・実装・高度化、最先端の計算機を使ったシミュレーションによる予言・検証と理論へのフィードバックというサイクルを効率よく進めていくことが、今後の計算物質科学分野の発展のために重要である。

4.2.2 長期的目標

物性科学は 10^{23} ほどの膨大な数の原子、分子多体系から成る自然を理解する営みを通じて、相転移にともなう自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジ励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらす、素粒子物理学から経済学まで広がるさまざまな学問分野に大きな影響を与えてきた。

分子科学は、化学反応の理解とそれに基づく新しい分子・分子集合体の創製を通じて、物質科学研究に

大きな展開をもたらしてきた。

材料科学は、一辺の長さが原子 10 個分くらいに相当するナノメートルのスケールで物質材料を捉えることにより、金属組織や粒界、複合材料など、材料としての利用に係る諸問題の解決を目指してきた。

これらの成果は、20 世紀以降の産業・先端技術革新を生み出す基盤となった。トランジスタ、トンネルダイオード、半導体レーザー、集積回路、巨大磁気抵抗素子、CCD（電荷結合素子）、有機 EL などの革新デバイス、合成樹脂や導電性高分子などの新材料は、ノーベル賞の受賞対象ともなった物質科学の基礎研究が生んだ例である。同じく物質科学の精華である超伝導は、最先端の医療用 MRI の超伝導マグネットに使われ、更に超伝導リニアモーターやエネルギー損失のない電力線として実用化されようとしている。高効率の太陽電池や高効率熱電素子など、地球規模のエネルギー問題解決に向けた新しい概念に基づくデバイスも、物質科学の基礎研究に基づいて提案され始めている。燃料電池に用いられる白金触媒、色素増感太陽電池に用いられるルテニウム、透明電極に使われるインジウム、リチウムイオン電池材料のリチウムやコバルトなど供給量が希少、あるいは今後の需要増に応じて希少になると考えられる元素の代替材料を他国に先駆けて開発することが、わが国の産業競争力を高めるためにも必要である。

一方、原子の組み合わせからさまざまな官能基・分子ができ、その多様な組み合わせで、溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質・高分子・クラスレート・ハイドレートなどが形成される。これらの系では、環境の熱エネルギー程度の弱い相互作用の制御によって、分子の認識、分配、分離、輸送といった多様な機能を制御・設計することができ、ドラッグデリバリーシステム（drug delivery system; DDS）、高分子分離膜（海水淡水化等）、食品・コスメティック、生体模倣材料、化学工学プラント設計、ガス分離、温暖化ガスの吸収、電池電解液、結晶成長といった広範な学術的・社会的ニーズに直結する。

界面系では、凸凹があり不純物も存在する現実系の取り扱いが可能になりつつある。分子素子やナノテクノロジー・トライボロジーの新展開の場であり、環境科学との関連も深い。

20 世紀の要素解明から 21 世紀には集団・階層解明と機能制御の時代に入ったと言われる現代科学の中核として、物質科学における基礎研究のフロンティアでは、量子ホール効果、トポロジ絶縁体、スピン液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新たな機構解明への挑戦が続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術へ展開する研究をますます活性化させているが、この基礎研究から応用研究、更には産業応用への多段階リレーは、高度な蓄積を持つわが国を含むきわめて限られた国でのみ追求し得る。

更に近年、高性能のスパコンを活用することで、近代までに確立された古典力学、量子力学、統計力学に基づいた、ナノ材料の物性・化学のボトムアップ的な予測に期待が寄せられている。

計算科学と実験・理論がタイアップし、次世代の半導体デバイス、触媒材料、各種電池、薬剤、触媒などの設計・開発に役立てることで、地球環境を守り、産業振興を助け、社会を豊かにすることにつながるができる。

(i) 次世代先端デバイス科学

現有の半導体電子デバイスをベースとして更に高機能化したものは、次世代量子デバイスの有力候補の一つになると予想されるが、その一方で高機能化半導体電子デバイスの実現に際しては、微細化、高速化、大容量化、低消費電力化、熱対策等、解決すべき非常に大きな障壁があることも事実である。これらの問題に対して相補的な、あるいは理想的には根本的な解決策を与え、更には電子デバイスにはない高機

能性を備えた次世代量子デバイスの一つの候補として、ナノ分子構造体を利用した光・電子機能性デバイスが考えられる。分子の持つ合成設計柔軟性と構成原子の多様性に起因する高機能発現能力を最大限に利用したナノ構造体において、光と電子のダイナミクスの二つの自由度が結合することによってこれまでとは本質的に異なる機能が発現すると期待できる。今後はこのようなナノ分子構造体を使った光・電子機能性デバイスの理論設計を積極的に進める。このため、「京」コンピュータで開発された電子・電磁場ダイナミクス法プログラムを更に超並列化することにより、デバイスの理論設計を加速させる。

本研究の中核であるナノ光学理論が完成すれば、従前の光学応答現象を大きく超えた理学・工学の新たな研究領域を切り開くことが期待でき、その学術的意義は非常に高い。また、これらはいずれも次世代量子デバイス設計原理に大きく関わる現象であり、計算科学を通じて「ものづくり」の観点から社会へ大きな還元ができると考える。

(ii) 分子機能と物質変換

物質変換技術は、基盤産業の基礎であるとともに、人類の生活を豊かにした科学技術という点で最も成功した技術であると言える。

分子と化学反応の微視的理解に基づいて、さまざまなクロスカップリング反応のような精密有機合成反応、バイナップなどの使用による高立体選択的合成反応、重合反応や脱硝、脱硫反応など、新しい考え方による物質変換反応が次々に開発されてきた。衣類、家や車の構造物、更には液晶や有機ELのような電子材料、航空機の構造材料など、化学反応による物質変換の成果は枚挙にいとまがない。今後のわが国の産業競争力を更に強化し、地球規模での資源問題を解決するためには、目的の物質を安価で汎用的な材料から効率よく作り上げることが不可欠である。複雑な構造を持つ新しい有機分子触媒、金属微粒子、金属(酸化物)表面、金属錯体などをまるごと精密に計算することにより、分子の相互作用と化学反応過程を解明し、新しい物質変換法を理論先導的に開発することを目指す。

(iii) エネルギー変換

エネルギー問題はわが国の最重要課題の一つであり、エネルギー資源小国であるわが国が世界の中でこれまで以上の繁栄を目指すためには、あらゆる科学技術を駆使してエネルギー創成・変換・利用技術を他国の追随を許さないレベルにまで高める必要がある。そのためには、世界最高水準のわが国のエネルギー関連技術を科学にまで高め、試行錯誤というレベルとは異なる次元から物質開発を行うための道筋をつけることが必須である。

燃料電池や2次電池、太陽電池、あるいはバイオマス利用における電気化学過程、非平衡電気伝導などに対し、超並列大規模計算機を利用した第一原理に立脚したシミュレーション技術をかつてない高いレベルに押し上げる。これにより、物質とエネルギーの関連を理論とシミュレーションから突き詰めて考え、次世代の高効率エネルギー変換に寄与する物質・材料開発に資する知見を獲得し、その成果を社会全体へと還元する。

(iv) マルチスケール材料科学

熱エネルギーを効率的に機械・電気エネルギーに変換する耐熱材料や低燃費・省エネルギーに寄与する高比強度軽量材料等の飛躍的高性能化が、エネルギー問題の解決に向けて求められている。こうした材

料の強度・信頼性は、ミクロの原子間結合のみならず、メゾスケールの内部組織（析出相・粒界・異相界面・転移・点欠陥・不純物偏析等の集合体）に支配され、それらを系統的に設計・制御することが肝要である。そのために、第一原理による電子構造計算やエントロピーを考慮した自由エネルギー計算、更にミクロからメゾ、マクロをつなぐマルチスケール計算が必須となる。

超並列大規模計算機環境を用いて、大規模第一原理計算・自由エネルギー計算を実行するとともに、フェーズフィールド法等により、ミクローメゾーマクロをつなぐマルチスケール計算技術を確立し、内部組織の安定性、微細構造、強度、諸特性を解明する。(図 4.1)

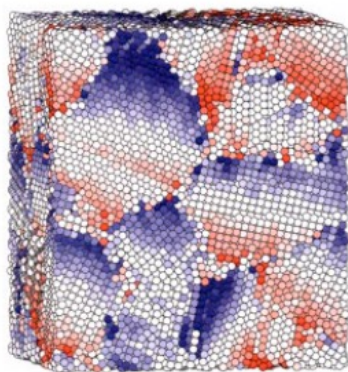


図 4.1 鉄の内部組織

出典：○○○○○ (香山正憲 (AIST))

(v) 新量子相・新物質の基礎科学

多体量子系の示す多様性や階層性の理解は、今世紀凝縮系科学の中心課題であり、人類の自然探索と理解の最前線でもある。とりわけ、強相関多体量子系は新しい現象と概念の宝庫であり、高温超伝導、巨大応答、トポロジで分類される量子ホール相やトポロジカル絶縁体などの物理を生み出し、遷移金属酸化物、希土類化合物、有機導体などの強相関電子物質群やナノチューブなどのクラスター化合物、量子ドットなどの微細加工構造、冷却中性原子などの新しい系の探索と理解へと導いた。

更なる進展のためには、物質科学の中核と基礎科学を担い、物理と化学の枠を超えて粒子間の相互作用の強い分子系や凝縮物質を取り扱う強相関多体量子科学・計算科学の汎用手法を確立し、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスに対する飛躍的な理解を図る必要がある。これにより、新しい量子相（新超伝導、新絶縁体、新量子液体）、すなわち、人類の知らない物質の新たな形態の発見を可能にするとともに、高温超伝導・高効率熱電素子・マルチフェロイクスなどの強相関新物質を次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として展開していく。

また、高精度電子相関理論の開発、相対論効果の導入により、複雑な電子状態を分光学的精度で計算することが可能となり、更に、部分系の電子状態を重ね合わせる方法や液体論などの開発により周囲の環境を含めた巨大分子系の計算も行えるようになった。これらの手法の融合や、より高次の電子相関の取り込みによる金属原子を含む巨大分子系や励起状態などの計算、また電子状態計算と分子動力学計算の組み合わせによる自由エネルギー面での化学反応の理論的研究を通して、分子レベルの触媒設計や電池の開発、創薬などを進めていく。

4.2.3 次世代に解決すべき課題

(i) 半導体電子デバイス

次世代技術では、高速動作／高集積／低エネルギー消費の観点から、デバイス構造をナノメートルオーダーに微細化（ダウンサイジング）することが強く要求されると同時に、配線／High-k（高誘電率の絶縁膜）／新しい不揮発性メモリなどの要請からデバイスを構成する材料の種類も多岐にわたってきている。デバイス材料に関して言えば、シリコン、その酸化膜、ドーピングする不純物元素や水素だけでなく、ゲルマニウム、各種高誘電率絶縁膜、化合物半導体、カーボンナノチューブなどに対象が広がっている。またデバイス性能に関して言えば、平衡状態に近い条件下だけでなく過渡的現象を含む非平衡状態に近い条件下での予測が要求されている。

計算手法として、主として第一原理計算 [4.2.4(i)] が用いられる。計算需要は①より大きな系の電子構造を求める、ということの他に、②電子相関を高精度化して異種材料界面のバンドギャップなどを正しく評価する、③熱的特性、電気的特性、分光学的特性などを第一原理計算により予測する、④長時間の第一原理または古典的分子動力学法により動的性質を知る、⑤電子励起された状態を精度よく求める、などと多岐にわたる。

このような多岐にわたる要求を満たすことができるシミュレーションの重要性は増大している。これらの要求のうち特に①に答えるために、第一原理シミュレーションで、少なくとも数千原子から 10 万原子規模のモデルサイズを扱う必要がある。現在、計算負荷が計算対象の原子数 N に比例する $O(N)$ 法の開発が盛んであり、近い将来 10 万超の大規模計算の標準的なシミュレーション手法となる可能性がある。また、古典的分子動力学法により数千万原子規模のデバイス特性を予測する必要性も高まる。第一原理 $O(N)$ 法、古典的分子動力学法は計算負荷が軽いため、④の動的性質を知るという要求にも応えることができる。また、第一原理計算と古典的分子動力学法（更には有限要素法）を連携して使うことで大規模計算を行う試みも数多く行われている。②の電子相関の高精度化に対する要求は特に強く、パラメータの第一原理に基づく自動設定や大規模並列化時の効率を上げることなどが課題である。③の電気特性の予測には非平衡グリーン関数法を使って行う手法が有効であり、これも 1 万原子程度の規模の計算が必要となる。（図 4.2）

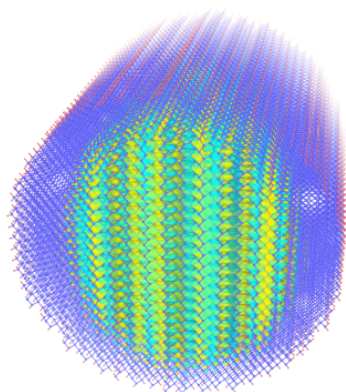


図 4.2 カーボンナノワイヤーの電子状態計算

出典：○○○○○ (押山淳 (東大))

$O(N^3)$ の第一原理計算に関しては、実空間密度汎関数法により 10 万原子の計算が可能であることが示され、実際に大規模手法が開発されている。また同じく平面波基底の手法でも、金属酸化物材料に対して 10 万原子規模の計算が視野に入ってきている。磁性材料や電子相関の強い材料などに関しては、大規模系を扱う場合の収束安定性が課題になると思われるが、この課題が解決するとこれまでの凝集系物理のかんりの問題を直接解明できる。

しかしながら、依然として更に一桁程度多い原子数の取り扱いが必要な問題も残されている。大規模な計算としては、自己無撞着な計算を一度行うもの、材料に関わるパラメータを変えた複数回の計算から実験的研究結果と比較し得る統計量を抽出するものなどがある。10 万原子を超える計算課題としては、次のような例がある。(1) 半導体金属界面における金属誘起ギャップ状態 (MIGS) の存在の有無およびその電気特性への影響。(2) 量子ドットによる新規デバイスの評価・特性予測。(3) 相転移の核形成の問題。(4) 合金における組成の微妙な違いによる塑性変形特性や、弾性特性の変化の予測。(5) 固液界面の問題。

$O(N^3)$ の手法では、原子数の規模は数万原子程度までで統計量を抽出する需要や反応経路探索などの需要が多くなるであろう。

(ii) 光・電子材料

電気・光学・磁気特性を持った機能性材料は、エレクトロニクス、フォトニクス、スピントロニクス等のデバイスを構築する必須要素である。従来の機能性材料の主役は、シリコン等の半導体に代表される無機物質であるが、近年、その機能性の向上に不可欠な微細加工におけるさまざまな限界が明らかになってきた。一方、有機化合物や遷移元素を含む有機・無機複合分子を基本とする機能性材料は、その構造および電子的な柔軟さと多彩な分子集合様式に起因するはるかに高い機能性と化学的・物理的制御可能性を備えており、無機材料を凌駕する次世代分子デバイスの基本要素として注目されている。これらの物質の機能発現機構解明やその合理的設計のためには、個々の分子からその集合相に至る構造・物性・反応の統一的な予測を可能にする高精度かつ大規模な最先端理論計算化学の方法の開発と実行が必須である。

近年、個々の分子やその集合相の相関量子状態において、「電子相関が新機能性発現の鍵となる」という新しい概念が化学と物理の学際領域において見いだされつつある。また、上述したように、電気・光学・磁気特性単独の機能性だけではなく、今後は電子と光が露わに結合したような状態に起因する電子・光新

規機能性次世代ナノデバイスの開発が盛んに行われると考えられる。具体的な例としては、広帯域・高効率光エネルギー変換デバイス、量子データ転送素子、電子回路に替わり得るフォトニックナノ回路、波長変換素子、メタマテリアル等、きわめて重要かつ新規な機能性を備えた次世代デバイスが挙げられる。これらの高い光・電子機能性を持ったナノデバイスの理論設計を実現するためには、電子ダイナミクスとミクロスコピックな電磁場ダイナミクスが結合した状態を記述するナノ光学理論とその理論に基づく超並列電子・電磁場ダイナミクス法 [4.2.4(v)] の開発が必須である。

(iii) 生体分子機能・創薬

近年の急速な構造生物学研究の進展により、膨大な数のタンパク質立体構造の決定が進んだ一方、構造決定が本質的に難しく未解明のものも多数残されている。この中には、本質的に特定の立体構造を取りにくい、いわゆる天然変性タンパク質や、機能のうえでは複合体を形成して作用するものの、複合体を構造生物学的に安定状態として測定することが難しい過渡的複合体などが含まれる。このような柔軟性が高く、離合集散して機能する生体分子の原子分子レベルの機能解析が待たれる。またタンパク質ーリガンド間相互作用については、タンパク質の3次元構造は実験によるところが大きいものの、より高い解像度の情報を得るためにQM計算(QM/MM法、フラグメント分子軌道(FMO)法 [4.2.4(iv)]、分割統治(DC)法)レベルでの構造最適化が求められている。また、拡張アンサンブルMD法 [4.2.4(viii)] などによって、タンパク質がリガンドと結合するプロセスを明らかにできるものと期待される。こうした中間状態の情報は、新しいタイプの阻害剤設計への重要な知見となる。更にはタンパク質分子に加えて脂質も結合した巨大複合体であるHIVやインフルエンザウイルスなど病原性の高いウイルスについて、細胞との結合・解離といった機能の分子レベルでの解明とともに、ウイルス性疾患の予防・治療薬開発への展開も期待される。このようなタンパク質複合体の構造形成においては、溶媒や塩の効果もきわめて重要であること、更にはタンパク質と脂質膜との相互作用について未解決であることから、全原子の分子シミュレーション [4.2.4(vii)] による生体機能の分子レベルでの解明が求められている。(図4.3)

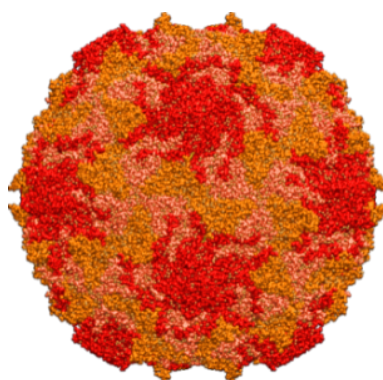


図4.3 ウイルスの全原子計算

出典：○○○○ (岡崎進 (名大))

(iv) 分子構造・分子機能の非経験的予測

新たな理論と計算方法の開発および計算機の発達とともに、分子構造や分子機能を非経験的に計算から解析・予測できるようになり、計算化学者のみならず実験化学者も量子化学計算を行うようになっていく。今後は、さまざまな分子の基底状態のみならず励起状態を分光学的精度で取り扱うため、相対論、露わに相関した電子状態理論、多参照理論などによる高精度計算 [4.2.4(ii)] がより一層重要になると考えられる。

また、FMO 法 [4.2.4(iv)] や DC 法、ONIOM 法、電子状態計算と古典力場計算を組み合わせた QM/MM 法、3D-RISM や MC-MOZ などの液体論、およびこれらを組み合わせた 3D-RISM-SCF 法などは、巨大分子や溶液系など大規模系の計算を可能にした。これらにより、実在系の化学反応過程を理解し制御することで、新しい物質変換の開発ができ、創薬、触媒や電池の分子レベルの設計につながると期待される。

更に、上記の領域分割手法に加え、金属などの非局在系を扱うため線形スケーリング手法による全系計算を実現し、ナノスケールで初めて得られる弱い相互作用や立体障害を効果的に利用した機能や構造の提案を目指す。

(v) ソフト分子集団機能

界面活性剤や脂質・高分子などの多官能性の分子は、温度や塩・共溶媒濃度のような外部パラメータによって、ミセル・膜・液晶といった多様なソフト構造体に自己組織化し、分子の認識、分配、分離、輸送の機能を発揮する。イオン液体や超臨界流体は、溶媒条件選択による物理的・化学的性質のチューニング幅が大きく、特異的な反応選択性や溶解性・電気特性を発現する。更に、水のような「通常」の分子集団も、制限空間やクラスレート内では、分子間相互作用を原子レベルで反映して、構造や動的性質を大きく変える。一般的な高分子材料も、分子配向を高度に制御することにより、従来にない高機能・高強度化を示す。上記は、規則性とランダム性を兼ね備えた原子・分子集団としての働きであり、ドラッグデリバリーシステム (DDS)、分離膜 (海水淡水化等)、食品・コスメティック、生体模倣材料、ガス分離、温暖化ガスの吸収、電池電解液 (図 4.4)、結晶成長といった広範な学術的・社会的ニーズに直結する。

ソフト分子集団の機能の解析・設計には、原子・分子レベルの相互作用の理解と大域的な集団形状の記述の両方が必要である。数桁に及ぶ空間・時間スケールの解析には、量子化学計算 [4.2.4(iii)]・分子シミュレーション [4.2.4(vii)]・粗視化シミュレーション・連続体モデルを融合したマルチスケール手法 [4.2.4(xiii)] の開発が必須である。特に、実地応用につなげるためには、熱エネルギー程度の分子間相互作用の効果を精度よく取り扱い、化学的個性を取り入れる必要がある。量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化に加え、自由エネルギーを中核とする統計力学理論やレアイベント探索アルゴリズムの高度化が必要である。

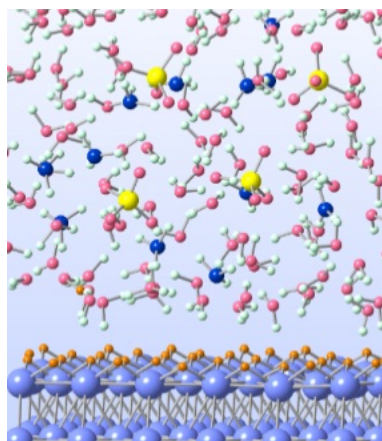


図 4.4 電極・電界液界面の第一原理計算

出典：○○○○ (杉野修 (東大))

(vi) 物質・エネルギー変換

必要な物質を汎用元素から効率よく合成する物質変換法の開発は、わが国の産業基盤の強化に止まらず、地球規模での持続可能な社会を構築するために不可欠である。このためには複雑な化学反応の微視的理解と予測・制御が必要であり、自由エネルギー面での理論・計算化学研究の遂行が不可欠である。研究対象としては、複雑な構造を持つ新しい有機分子触媒、金属微粒子、担持触媒、金属表面、金属酸化物表面、金属錯体などが挙げられ、周囲の溶媒などについては数千原子を含めた実際の物質変換系について、1000 原子程度の主要部分は量子化学計算 [4.2.4(iii)]、周囲は分子力場計算による QM/MM-MD 計算を実行するといったアプローチがある。

また、世界的なエネルギー需要の急増にともない、低コスト・低環境負荷の新規エネルギー変換デバイスの開発が急務になっている。太陽電池・人工光合成素子の開発では、光吸収過程、電子/正孔キャリアのダイナミクスの理解と予測、燃料電池、リチウムイオン 2 次電池などの開発ではイオン伝導、電極と電解質界面での電気化学反応の理解が必要である。熱電変換素子の開発では、電気伝導度に対する熱伝導度の比率を極力下げる必要がある。これらすべてに共通する課題は、デバイス全体を構成する複合材料の有するサブミクロンオーダーの巨視的構造とエネルギー変換効率との相関の理解、使用される材料性能の劣化機構の解明と予測である。

これらの課題に対応するためには、有機・無機材料の大規模第一原理計算 [4.2.4(i)] が必要不可欠である。

(vii) 界面・表面

不均一触媒の反応場は典型的な気相・固相ナノ界面であり、半無限の周期性と乱雑さを併せ持つ固体表面と、反応に関わる分子群・微粒子の局所的電子相互作用を第一原理に基づきシミュレート [4.2.4(i), 4.2.4(iii)] することが可能となっはじめて、理論計算が実験を先導する時代が到来する。気相表面反応における周期性＋乱雑さ＋局所性を再現するには少なくとも 100 ナノメートル四方の領域を露わに扱う必要がある。

気液界面は、大気環境科学との境界領域として、近年特に重要な課題として位置づけられている。工学分野における気液二相流の制御にとっても本質的であり、マイクロバブルなど特異な反応場としての応用も期待されている。

また、固液界面では、固体側の親水性／疎水性を原子レベルで微細制御することが可能になってきている。界面構造にナノレベルでの凹凸を付けたり、親水性・疎水性の分子を自在に並べるなど、ナノテクノロジーの新たな展開が計算・実験の協業で行われつつある。また、液体側についても、多成分水溶液系はもちろんのこと、摩擦低減などに使用する炭化水素系の分子など、さまざまな工学応用を目指した物質についての網羅的計算が必要である。

今後、多成分系を含めた実在の界面の解明のためには、界面構造の動的なゆらぎや電気二重層構造のイオン分布を分子シミュレーション [4.2.4(vi), 4.2.4(vii)] で扱ったうえでマクロな理論につなげる必要がある。

従来の空間・時間スケールを超えたシミュレーションが新展開を示すと期待される。

(viii) 構造材料の構造と特性の高精度予測・設計

高精度自由エネルギー計算、第一原理計算、フェーズフィールド法 [4.2.4(xiv)] などを連成したマルチスケール計算 [4.2.4(xiii)] により、結晶相・化合物相、粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性を第一原理から予測し、強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の開発を目指す。

これらのシミュレーションには、典型的にはアレイジョブ、すなわちパラメータを変えた互いに独立で比較的小～中規模のジョブを複数（数十～数万）実行することが必要となる。小規模ジョブは1ノードで実行され、ノード間通信を必要としない。中規模ジョブは数ノード～100ノード、大きくても数百ノードで実行される。1EFlops級の計算機を用いることにより、数千～数万ジョブ規模の計算結果を一度で得ることができる。アレイジョブの結果からマクロな物理量を取り出し、次の計算へ素早くフィードバックするためにも、アレイジョブが一度に終了することは非常に重要である。

(ix) 熱交換デバイスの安全性向上・特性解析

火力、原子力発電所やボイラーなどの熱交換デバイスでは気相と液相が混在する、いわゆる気液混相流（気液二相流）が重要な役割を果たす。一般に気液混相流は相転移と流動運動がカップルした典型的なマルチフィジックス・マルチスケールな現象であり、マクロな流れとミクロな相転移のスケールの乖離、および相転移をともしなうことによる相境界の生成・消滅・移動が数値計算の障害となってきた。

この問題に対しては、これまでは現象をスケールに分け、それぞれの階層において現象論的な支配方程式を仮定することで全体の性質を調べる階層的アプローチが取られてきたが、この方法では各階層のモデル化に任意性が入る上、階層間の接続に経験的なパラメータが必要であった。

一方、気液混相流を構成するすべての粒子（分子）を陽に扱えば、ミクロな粒子間相互作用からマクロな現象を任意性なく再現、解析することが可能となる。エクサスケールではおよそ100兆粒子程度の自由度を持つ系の計算 [4.2.4(vi)] が可能と見込まれており、実験と直接対応可能なメソスケールに達する。この、気液混相流の全粒子計算により、より安全かつより高効率な熱交換デバイスの非経験的な設計・開発を目指す。

(x) 強相関電子系 (超伝導体、磁性体) の機能解明、新物質デザイン

強相関量子多体系は新しい現象と概念の宝庫である。実際、高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなど近年見出された新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、その新機能発現機構の解明は、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。また、近年実験技術の進歩が目覚ましい光格子中の冷却原子系においては、ボーズ・アインシュタイン凝縮をはじめ、ボーズ系モット転移、多種原子系における対超流動、双極子相互作用系での超流動固体状態など、固体中での実証の難しかった量子多体現象が次々に検証されており、更に理論予測を超え、概念の革新につながる系の設計も提案されつつある。

摂動論や平均場近似が破綻するような強相関系では、厳密対角化 [4.2.4(xii)] や量子モンテカルロ法 [4.2.4(x)] などの量子ゆらぎの効果を正しく取り込んだ第一原理的手法が不可欠である。エクサスケールでは、厳密対角化で 50 格子点以上、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法では 10 億格子点以上のシミュレーションが可能となる。種々の量子スピン模型、低次元系理論模型のランダムネスの効果も含めた大規模シミュレーションを実行し、物性物理と統計力学の教科書を書き換えるような新概念の数値検証、提案を目指し、物理学の基礎理論の発展に寄与する。

また、第一原理ダウンフォールディング法により、数千バンド、単位胞当たり数百原子以上を含む系の有効模型を第一原理的に導出したうえで、量子モンテカルロ法 (数万格子点)、変分モンテカルロ法 (数千格子点) [4.2.4(xi)] などのアルゴリズムを用いたシミュレーションにより、新機能を持った強相関物質材料の物性を高い精度で予測・解明し、材料開発や新デバイス開発を加速する。

4.2.4 課題を解決するために必要なアプリケーション群 (要求性能)

計算物質科学で使われるアプリケーションは非常に多岐にわたる。以下、計算物質科学分野における、現在の主要なアプリケーション・アルゴリズムの中から、凝縮系に対する第一原理計算、高精度分子軌道法、大規模分子軌道法、フラグメント分子軌道法、電子・電磁場ダイナミクス法、短距離力古典分子動力学法、長距離力分子動力学法、化学反応動力学法、量子分子動力学法、クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法、変分モンテカルロ法、厳密対角化、階層的マルチスケールシミュレーションについてとりあげ、その概略・特性と、今後 5~10 年で必要となる計算機スペックをまとめる。

(i) 第一原理計算 (凝縮系)

半導体材料、磁性材料、光学材料、金属材料などの固体材料を主な計算対象として発展してきた手法が密度汎関数理論 (Density Functional Theory(DFT)) に則った第一原理計算手法であり、第一原理分子動力学法やバンド計算法という名前でも呼ばれることもある。Kohn-Sham 方程式 (一電子シュレディンガー方程式) と、電荷密度分布が自己無撞着場 (Self-consistent Field=SCF) を満たすように、波動関数と電荷密度分布を繰り返し更新することで解くこの手法の計算需要は、より大きな系の電子構造を精度よく求めるということの他に、長時間の分子動力学計算や統計的処理を行うことにより反応経路や自由エネルギー差などを評価するという、二つの方向に広がりつつある。前者は大規模化を追求する方向性で weak scaling 的である。後者には strong scaling を追求するものと、時間やレプリカなど別の軸に関する並列化により計算機能力の向上を有効利用しようとするものがある。また、励起状態、光学特性、電気

伝導特性などの物性予測を高精度に行いたいという需要も大きい。

・ $O(N^3)$ 法

扱う原子数 N に対して演算量が N^3 に比例する計算方法を $O(N^3)$ 法、 N に比例する計算方法を $O(N)$ 法（オーダー N 法）と呼ぶ。伝統的な $O(N^3)$ 法の場合、波動関数 Ψ を表現する M 個の基底関数による M 行 M 列のハミルトニアン行列を対角化して固有値を得るために M^3 に比例する計算量が必要になるが、Car と Parrinello の提案した方法とそこから発展した方法では、SCF の繰り返しの途中で反復解法を使ってより少ない演算数で固有値問題を解くことができる。基底関数の選び方には、結晶の周期性を利用した平面波を用いるもの、実空間格子点上の値を用いるものなどがある。全電子ではなく価電子だけを陽に扱う擬ポテンシャル法が大規模計算に適している。価電子軌道の数 B とすると演算数は B^2M に比例する。典型的には、 B は原子数 N の数倍程度、 M は 100 倍程度の値であり、 $O(N^3)$ ではあるが M^3 の演算数に比較すればずっと少ない。ここでは擬ポテンシャル法第一原理計算の中で、平面波基底を用いるプログラムとして、PHASE と xTAPP を、実空間基底を用いるプログラムとして RSDFT を挙げて解析する。平面波基底は古典的基底であり FFT を頻繁に使うが、原子位置に対して計算精度が不変、行列要素を厳密に計算するのが容易である。一方、実空間基底は、力の計算精度を上げるのに工夫がいるが、非局所ポテンシャルと波動関数の積の計算負荷が軽いこと、FFT 演算を含まないことなどから大規模化に適しているとされる。また周期境界条件に縛られない $O(N)$ 法への展開が見込める。平面波基底を使う手法で大規模計算を行うためには FFT 演算にともなう通信を極力局所化する必要がある。基底関数が何であれ、一回の SCF ループ内の計算は、(i) グラムシュミット法などにより規格直交化する部分、(ii) 波動関数を残差関数を使って更新する部分（残差最小化法 (RMM)、共役勾配法 (CG)、Block-Davidson 法、最急下降法 (SD) など）、(iii) 部分対角化する（波動関数のユニタリー変換を行う）部分、(iv) 波動関数から電荷密度分布をつくる部分、などからなる。

平面波基底の場合には、負荷の重い部分は、各種の行列・行列積 $O(B^2M)$ と固有値問題 $O(B^3)$ 、FFT 演算 $O(BM \log M)$ などに分解することができる。扱う原子数が多くなるに従い FFT 演算部分の負荷は相対的に小さくなる。波動関数に関する 3 次元 FFT はバンド（軌道関数）と FFT の 1 軸分あるいは 2 軸分を併せて分割することで、核心部のバタフライ演算はノード内（キャッシュ内）に閉じ込めて行い性能劣化を抑えることができる。ただし、分割軸を交換するために局所的な転置転送通信を行う必要がある。非局所ポテンシャルと波動関数の積は $O(B^2M)$ であるが、並列化効率の向上は容易である。これに対し (iii) の部分対角化で使う $O(B^3)$ の固有値問題はそれが難しい。大規模化するためにはこの部分の効率向上が必要であり、数値計算ライブラリの整備に期待する。また、波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている。これに代わる手法の開発も必要である（TSQR 法 (AllReduce QR 法) や Car-Parrinello 法を改良した波動関数の規格直交化に用いるグラムシュミット法はスレッド並列版の BLAS を用いて実装しているが、逐次実行部分が残っている。これが並列化効率の制限因子の一つとなっている）。

実空間基底を用いる方法は、FFT 演算にともなう通信を局所化するなどの手間が要らない、非局所ポテンシャルと波動関数の積演算の負荷が軽いという違いはあるが、(i) 規格直交化や (iii) 部分対角化に関して抱える課題は、平面波基底を用いる方法と同じである。

$O(N^3)$ のアプリケーションは、うえで述べたように大規模化と、規模の拡大よりも動的性質を予測す

るといった方向性の両方を指向するが、ここでは RSDFT では 10~100 万原子規模の計算を目指し、平面波基底の手法は 1 万原子規模の系の動的性質を予測する方向を目指すものとして評価を行う。

・ $O(N)$ 法

より規模の大きい計算をするために複数のオーダー N 法が開発されている。Kohn-Sham 方程式の代わりに密度行列を用いる密度行列最適化手法、運動エネルギーを直接電子状態の汎関数で表す Orbital Free DFT 法、Wannier 軌道のような局在軌道を求める軌道最適化法 (Orbital Minimization 法)、分割統治法 (フラグメント分子軌道法もその一手法) などがある。オーダー N 法に関しては、現状ではさまざまな手法が持つ問題点や計算精度が完全に明らかになっておらず適用範囲が限定的であるが、これらの問題が解決され、いったん標準的な手法になった後は計算時間が原子数に比例するという特性から、特に大規模系に対して標準的に使われる手法になるであろう。ここでは密度行列最適化によるオーダー N 法第一原理計算手法プログラム CONQUEST のエクサスケール計算機に対する要求値などを評価する。この方法の演算負荷の重い計算には、(i) 行列要素計算、(ii) FFT、(iii) 局在軌道の実空間座標での値、(iv) 疎行列の行列積などがある。(i) は、密行列の行列積として BLAS3 を複数呼び出す方法を用いている。(ii) に関しては現在 Hartree 項の計算に FFT を使っている。これは数十万原子までの系では問題とならないが、数百万原子系からは別手法の導入を予定している。(iii) は基底関数とその展開係数から電荷密度メッシュ (FFT メッシュ) 上の値を計算する部分である。(iv) が最も重い計算であり、通信、行列積演算いずれに関しても、複雑である。通信は隣接通信だけでなく、第 4、5 近接ノード程度までを含めた近接通信が多い。また疎行列積はパターンの異なる二つの行列の行列積、更に非ゼロの項の一部だけを計算する場合もあるというような特殊な疎行列の積で、非常に複雑である。またオーダー N 性を保つために行列要素の非ゼロ項だけを集めて一次元配列にストアする必要がある、実際の行列要素との対応づけのための複雑なアドレス計算が欠かせない。更に並列計算では他プロセスから来る隣接原子情報から自分の隣接原子情報への対応表を、演算の前に毎回作成する必要がある、メモリ参照の量に比べて演算数がきわめて少ないという特徴がある。

【ターゲットとする研究対象】

計算対象は各種固体材料の他に、固相と液相の界面、固相と気相の界面を含む問題、生体材料などがある。 $O(N^3)$ 法は実空間基底を使うもの (RSDFT) が 10 万から 100 万原子規模の材料の電子状態計算を目指す、100 万原子規模の問題を対象とするには現在研究段階の新規アルゴリズムの実用化が必要である。 $O(N^3)$ 法で平面波基底を使うものは 1,000 から 10 万原子規模の計算を目指す。 $O(N)$ 法は一つの系の原子数は数十万から一億位を目指す。いずれの手法も、半導体や酸化物のナノ構造、固相・液相界面での安定構造や触媒反応などの反応シミュレーションの他に、バイオ系に対しても第一原理に基づく全原子分子動力学法、更に自由エネルギー計算を行う。同時に複数個 (100~1000 個程度) の第一原理計算を行い、拡張アンサンブル法や反応経路計算、自由エネルギー計算などを行うことが重要になる。この際、 $O(N)$ 法では一つの計算が数 10 万から 100 万原子、 $O(N^3)$ 法では 1,000~1 万個程度の原子を扱うことを想定している。

【要求スペック】

・ $O(N^3)$ 法実空間基底

RSDFT で 10 万原子規模を扱う場合、それが Si 原子などである場合、20 万程度の固有状態を求める

問題となる。また、格子点は 2000 万個程度必要である。対象が金属原子でノルム保存型ポテンシャルを使う場合には、格子点は 4 億点程度必要になる。計算主要部分は、共役勾配法、グラムシュミット直交化、部分空間対角化から構成される。この計算を 1 日以内で可能な限り短時間で行いたい。格子点の数を M 、固有値数を B とすると、必要なメモリ量は $16BM$ Byte となる。10 万原子では、60TB~1200TB である。ノード当たり 1TB のメモリがあると想定すれば、問題を乗せるだけで最低でも 60~1200 ノードが必要になる。部分空間対角化において $B \times B$ のサイズの行列の固有値問題を解く必要があり、ここで $O(B^3)$ の演算を行う。それ以外の箇所は行列行列積の形に還元して BLAS3 を呼び出して計算効率を上げることができる。グラムシュミット規格直交化部分では、演算性能 100TFLOPS/node、通信バンド 100GB/s、ネットワークレイテンシ $1\mu s$ を仮定して、1 エクサ FLOPS(10,000 ノード) のリソースを利用すれば、演算に 30 秒、通信に 21 秒要することになる。通信の大部分は reduction 通信である。部分空間対角化では、 $B \times B$ の密行列要素計算にともなう reduction 通信、固有ベクトルを求めたあとに各ノードにこれを配るための broadcast 通信などがある。行列対角化に要する時間の他に、演算に 40 秒、通信に 74 秒が必要である。

・ $O(N^3)$ 法平面波基底

xTAPP、PHASE は、波動関数を更新するソルバーの種類、グラムシュミット規格直交化を行うかどうか、3 次元 FFT の分割方法、並列化軸の設定などの違いはあるが、スペック要求はほぼ同じになるので、まとめて記述する。10,000 原子系の価電子バンド（固有値）の数 B を 5×10^4 、非局所ポテンシャルのプロジェクトの数 P も 5×10^4 、基底平面波関数の数 M を 2×10^6 であると想定する。また、FFT の格子点の数を $500 \times 500 \times 500$ とする。すると、波動関数用の必要メモリサイズは、平面波係数を倍精度複素数で持つとすると、 $5 \times 10^4 \times 2 \times 10^6 \times 16 = \text{約 } 1.5\text{TB}$ 、局所ポテンシャルと電荷密度用には約 2GB である。

ノード当たりの演算性能を 10TFlops とし、一つの構造（レプリカと呼ぶことにする）の計算を 1000 ノードで行う（1 レプリカの計算を 10PFlops で行う）ものとして考える。また、オンチップメモリは FFT の 2 次元分の計算ができるだけの大きさ（4MB 以上）があるとする。ネットワークは、リンク当たり 50GB/s、トポロジーは $10 \times 10 \times 10$ nodes の 3D mesh を想定する（Bisection BW は効率 50% として、2TB/s となる）。このシステムでレプリカ 1 個を担当し、これが 100~1,000 個並列で動くことで、全体で 1~10EFLOPS の計算機能力を使う。また、レプリカ相互は SCF 1 回、あるいは MD 計算 1 回に 1 度程度通信するものとする。

また、バンドと平面波基底係数の両方を並列化軸にとるのが、規格直交化をグラムシュミット法で行う場合には有利であり、PHASE では、並列ノード数が 1,000 の場合にはバンドに関する分割を 4、平面波基底係数に関する分割（G 分割）を 250 というように割り当てる。すると、FFT にともなう通信は、250 分割された（G 空間上では半径 G_{max} の球内に分布している）平面波展開係数を同じく（一つの軸に関して）250 分割された（立方体状に分布する）FFT 格子点に展開するための転置転送と、FFT の分割軸を変更するための転置転送である。2 次元分の FFT 演算は一つのノード内に閉じて行うことにする。バンド分割だけしている場合には、FFT にともなう通信は必要なくなる。分割の仕方に関係なくいずれの場合にも、ノード内当たり、 500×500 の要素の 2 次元 FFT を 25,000 回、一次元 FFT を 1.25×10^7 回行うことになる。通信時間を無視して、メモリバンド幅を 1TB とすると、全バンドの FFT を完遂するのに 3 秒要する。しかし、バンド幅が 10 分の 1 になると（ B/F 値=0.01）、30 秒程度要することにな

り、全体の計算時間を圧迫することになる。

行列行列積の大きなものは、非局所擬ポテンシャル (VNL) と波動関数 (Ψ) の積の計算である。P 行 G 列の行列と G 行 B 列の行列をかけて P 行 B 列の行列をつくり、これに P 行 G 列の行列をかけ B 行 G 列の行列をつくる。前半の積の演算数は $2PBG=10^{16}$ になり、10PFlops 構成では、計算時間は 1 秒である。後半の積の演算は 2 回行うので計算時間は 2 秒である。P、B、G それぞれが分割されているとすると、G 方向の reduction、B (P) 方向の broadcast あるいは allgather 通信が必要になる。バンド分割が 4 の場合、前半部分で 5GBytes のデータの reduction を行う。これは 50GByte/s の転送能力があれば、隣接ノードに送るのに 0.1 秒かかる。全体では G 分割数に応じた通信ステップ数に比例した時間がかかる。また、B (P) 方向の broadcast は各ノードが持つ $B/4 \times G/250 \times 16\text{Bytes}$ = 約 1.5GBytes のデータを送る。部分空間対角化にともなう行列要素の作成と、対角化した固有値・固有ベクトルを使って波動関数のユニタリー変換するのにも、同様の行列積計算を行う。

【計算時間】 PHASE を使って 12,288 原子を京速計算機の 12,288 ノード ($\times 8$ コア) で計算したとき 1SCF (ただし修正最急下降法で部分空間対角化を含まない) 当たりの計算時間が約 190 秒であった (ただし効率は 25 % 弱) ので、これから類推すると 10PFlops クラスターでは 1SCF に 30 秒程度かかることになる。他のソルバーを使う場合や部分空間対角化法を使う場合には、60 秒から 100 秒程度要すると予測される。10,000 原子に対して、xTAPP のプログラム解析から予測した値、66 秒から 127 秒とほぼ一致している。1MD 計算に 20SCF 必要であるならば、1MD 計算に 1300 秒から 2500 秒必要になる。

ここまでノード当たりの 10TFlops の計算能力があるとしてきたが、ノード当たり 100TFlops の能力がある場合には、1 構造を 100 ノードで計算することになる。ノード数の変化により、bisection B/W や reduction に必要な段数などが変わり、計算時間は最大 15% 程度減少する。

【メモリ】 全波動関数係数のデータを保持するのに、ノード当たり約 1.5GB 必要であるが、他に作業領域がバンド分割の数を掛けた量必要である。バンド分割数が 10 であれば、15GB 必要になる。他に $B \times B$ の部分空間行列、局所ポテンシャル、電荷密度分布などの記憶領域が必要である。ノード当たり 10TFlops の能力を想定すると、全部合わせて少なくともノード当たり 50GB~200GB 必要である。ノード当たり 100TFlops の能力を想定すると、ノード当たり 150GB~300GB のメモリが必要である。

【オンチップメモリ】 2 次元 FFT が載るのに十分な量としてチップ当たり 10MB とする。

【ストレージおよび I/O バンド幅】 10PFlops 相当のノード当たり、最低 1.5TB。1 エクサ当たり 15PB 必要である。I/O に一つの構造の計算時間の 5% 以下の時間を与えるとすれば、1000 ノード当たり 25GB/s 程度の速度が必要である。

【メモリバンド幅】 ここでは B/F 値を 0.1 程度として予測したが、これが 0.01 の程度になると FFT 演算に要する時間が 10 倍になり、実行効率を落としてしまう。また、規格直交化でグラムシュミットの直交化法を使う場合、並列化効率とノード内の効率が背反する傾向があり、特にノード当たりのバンド数が小さい場合 (例えば 10,000 ノードを使う場合) には、この傾向が顕わになる。更に、電子相関を高精度化するなどの演算を行う場合には、より大きなメモリバンド幅が必要になる。

【並列ノード数と B/F 値、扱う系の大きさの関係】 ここでは並列ノード数を 1,000 程度にして考えたが、 $O(N^3)$ 計算では並列ノード数を増やせば必要 B/F 値は大きくなる関係がある。またこの関係が系の大きさとも相関を持っており、系が大きいほど B/F 値は小さくてもよくなる。例えば、1,000 原子程度の大きさの系を 10,000 ノードで計算することがバンド幅律速になっており計算効率が悪い場合にはノー

ド数を減らして実行すればよい。この程度の規模の系の長時間 MD を行う目的である場合にはノード数を増やして strong scaling の効率を向上する必要があるが、他に例えば統計性を重視する場合には時間に変わる別の並列化軸を設定して、1 構造当たりのノード数を抑制することができ、計算機をより有効に使うことができる。Strong scaling の効率を向上するためのチューニング負荷は大きく、1 万原子程度の系に対して京速計算機以上の並列ノード数を使って高い実効効率を達成することは困難が大きいと考えられる。

・ $O(N)$ 法密度行列最適化法

CONQUEST で扱う行列には、補助密度行列 $L_{i\alpha,j\beta}$ や、局所軌道間の重なり行列要素 $S_{i\alpha,j\beta}$ があり、これらの項の積をつくって計算を進める。ここで、 i や j は原子の、 α や β は軌道の指標である。原子の指標 i に関して並列化を行う。行列のサイズは、(全原子の軌道の数 ($i\alpha$)) \times (平均の隣接原子数とその軌道の数 ($j\beta$)) となる。各行列は異なるカットオフ半径を持つ。行列積 LSL などは最も大きな行列の一つである。「京」の試験利用において、約 4000 ノードで 50 万原子系の計算を実現している。現在のサイズ (100 万原子より小規模な系) では静電ポテンシャルの計算に使われる FFT の計算時間はほとんど問題にならない。将来も古典分子動力学で使われる手法の導入などによりこの部分の計算時間は無視できると仮定する。1 億原子系の第一原理計算を行う場合を考える。10TFLOPS の性能の計算機ノードを 10 万ノード使って計算するならば、1 ノード当たり 1000 原子を扱うことになる。局在基底、オーダー N 法の計算は精度によって必要なメモリ、計算時間が大きく変わるが、シリコン系で典型的なカットオフ半径、DZP 基底関数の場合、現在 1 ノード 128GFLOPS で 1 ノード当たり 100 原子程度で MD 計算の 1 ステップに 20 分程度かかる。

【計算時間】 1 ノードで扱う原子数が 10 倍、1 ノードの速度が 100 倍になるとすると、計算時間は $1/10$ になり、2 分程度で MD 1 ステップの計算ができることになる。ただし、この実行性能は B/F 値が下がれば大きく減少する。

【通信】 1 ノードが扱う原子数が多くなると通信相手のノードがかなり近いものだけになる。ノード当たり 1000 原子を扱う場合には、ほとんど隣接ノードとの通信だけになる。CONQUEST では、各ノードが持つ行列要素 (と隣接原子の情報、インデックス) は、適宜分割し必要なノードに送られる。一度の通信におけるパケットサイズはユーザによって制御されるが、この時のサイズはレイテンシが問題にならないためにはある程度大きな量であることが望ましい。一方、受け取った行列要素を用いて行われる演算は一度に行われるために、受け取った行列要素のサイズがキャッシュに載るサイズであると効率的な計算が行える。送受信はノンブロッキング通信で行われ、通信と演算の時間を重ねることによって時間を短縮することが可能である。

【メモリ】 1 億原子の場合の最小基底のシリコンの場合を考慮すると、必要行列サイズは、 1×10^8 (i の数) $\times 1000$ (j の数) $\times 4$ (軌道の数 α) $\times 4$ (軌道の数 β) $\times 8(\text{bytes}) \cong 10^{13}(\text{bytes}) = 10 \text{ TB}$ となる。密度行列のカットオフ半径の大きさなどが大きくなる可能性があること、軌道の数も原子当たり 13 くらいにはなる可能性があること、更に同程度の規模の行列が 5~10 個あることを考えると、この見積り値に 500 程度を乗する必要がある、結局、 $5 \times 10^{15} \cong 5 \text{ PB}$ 程度必要になる。使用するノードが 1000 個であれば、ノード当たり 5TB のメモリが必要である。この他作業領域などを考えると 5~10TB 必要である。

【オンチップメモリ】 計算速度がノード当たり 100 倍程度になるとして、それに比例して現状必要な量の 100 倍として 200~300MB 程度必要である。

【B/F 値】 現状の「京」のシステムにおいても計算効率を律速する要因の一つとなっているので、0.2 を要求値とする。

(ii) 高精度分子軌道法

分子軌道法は、基本となる Hartree-Fock 法を出発点とし、摂動法、結合クラスター法、配置間相互作用法などにより電子相関を取り込み、計算精度を系統的に引き上げられるという特徴がある。行列積、行列対角化、連立一次方程式計算、そして基底関数の軌道角運動量によって演算内容が異なる 1 電子・2 電子積分計算が主な演算で、計算対象分子を分割しない限り、どの方法でも全対全通信を行う必要がある。電子相関計算では、中間データ量が系の 3 乗もしくは 4 乗に比例して増加するため、各ノードに分散させてもノード当たりの必要メモリ量は多くなる。

エクサスケール計算機では、分光学的精度で分子構造や機能を予測することが期待される。この目標は、露わに相関した結合クラスター法を完全基底関数極限で解くという、超高精度電子状態計算で達成される見込みである。ここで、電子相関の計算で必要になる 4 中心 2 電子分子軌道積分を、3 中心 1 電子分子軌道積分と求積点での分子軌道の値の積から数値求積法により計算する。多電子積分計算についても同様に数値求積法で行う。求積法で 2 電子積分を計算する部分と、それに続く計算部分をまとめることで演算量を減らすとともに、計算負荷およびデータ分散を容易にする。主要な演算は行列-行列積である。各ノードに分散されている求積点ごとのデータを集めるため、通信は allreduce、gather が大半である。以下、基底関数極限のフラレン分子 (2 万基底、100 万求積点) の計算、1 ノード性能 100TFLOPS、全体性能 1EFLOPS を想定して見積もりを行う。

【メモリ】 2 万 × 100 万 (160GB) の配列が 4 つ、更にその他の配列も考慮して 1 ノード当たり 1TB が必要になる。メモリバンド幅は、(2 万 × 100 万) × (2 万 × 2 万) の行列積演算では、1 度だけメモリからデータが送られると仮定すると 40GB/s、余裕を見て 100GB/s が望まれる。一連の操作を波動関数が収束するまで数十回繰り返し行う。

【オンチップメモリ】 求積法で計算する 3 中心 1 電子積分用として 1GB 程度は必要になる。

【通信】 2 万 × 100 万の配列を gather で集めた後、上記の行列積演算を 4 回続けて行うので、計算時間の 1 割で受信を完了させるためにはノード当たり 50GB/s のバンド幅が必要になる。

【ストレージ】 計算中のデータはすべてメモリに保存するため、出力するファイルは計算結果のみである。そのサイズは 100TB 程度であり、0.01TB/s のファイル I/O 性能が必要となる。

(iii) 大規模分子軌道法

Hartree-Fock 法、密度汎関数法によるナノスケール分子の計算を行う。大部分が 2 電子クーロン反発積分の計算であり、演算自体は複雑であるが比較的少量のデータを何度も利用するという特徴がある。Gauss 関数の局所性を利用するため、IF 文によるカットオフを多用している。3 次元ナノスケール分子 (1 万原子系、10 万基底) 計算を想定すると、30TFLOPS マシン 1 万ノードの場合、計算時間は 1 回当たり 30 分である。安定構造を求めるためには、この計算を数十回繰り返す。

【メモリ】 10万×10万 (80GB) の配列を、Fock 行列、正準化変換、基底重なり、分子軌道、密度行列用に5つ用意するため、1ノード当たり400GB 必要になる。10万×10万の行列積を行うため、密度汎関数計算での数値積分で1原子当たり1万点グリッドを発生させる場合、ノード当たりのFock 行列へのアクセスデータ量は、10万×10万×1万 (点数/原子) × 1万 (原子数) / 1万 (ノード) × 8Byte = 800TB となる。カットオフによるデータ量削減 (約10%に削減) を考慮し1分でこのアクセスを完了させるためには、ノード当たりのバンド幅は1.8TB/s 必要になる。

【オンチップメモリ】 2電子積分計算のため、1コア当たり1MB 必要となる。これは、(gg|gg) 型積分では、15×15×15×15のサイズの配列にデータを蓄え、同等程度の計算用配列も必要になるためである。

【通信】 計算1回 (30分) あたり、80GB 配列を allreduce で集める操作を30回程度行う。通信時間を全体の5%にするには、バンド幅30GB/s が必要になる。

【ストレージ】 出力するファイルは計算結果のみで、そのサイズは100GB 程度である。ファイルI/O性能は0.0001TB/s 程度で十分である。

(iv) フラグメント分子軌道法

フラグメント分子軌道 (FMO) 法は並列処理を駆使し、タンパク質の電子状態を量子論 (QM) 的に丸ごと計算することが可能な手法の一つである。FMO 計算は実際には、基本の Hartree-Fock から高次相関法まで多種の近似がある。一般に相関計算では、DGEMM 等の BLAS を使ったテンソル縮約が支配的で、軌道の添字を複数持つ多次元配列の操作となるために B/F が高いほうが性能的には有利である。ただし、タイリングやブロッキング等を適宜導入することで0.1程度までは性能の保持が可能である。メモリ要求値に関して述べれば、FMO2のダイマーでクラスター展開の計算では、作業配列の総容量はアミノ酸残基の組み合わせと基底関数にもよるが、数十GBには容易に達する。

現時点で、数百残基のタンパク質の PDB 構造をベースにした一点での FMO2 計算はルーチン的に行えるようになってきているが、より実在的なモデリング手法として信頼性を高めるには、水和条件を課したうえで揺らぎを考慮するために分子動力学的に生成された多数の構造サンプルを扱った統計的な算定が望ましい。また、3体や4体の展開 (FMO3、FMO4) を行うことが、精度向上の観点から望ましい。フラグメントのトリマーやテトラマーの相対計算コストは数的には単純組み合わせよりは少ないが、個々のサイズが大型化するために増加する。2次摂動で数百残基のタンパクを扱う場合、FMO2に比してFMO3で3~5倍、FMO4では10倍程度である。サンプル数の設定によるが、FMO4で相関レベルを上げることまで考えれば、現行計算に比して要求される計算コストは数万~十万倍になるため、エクサ計算機で“統計的ジョブ”の高速実行が可能となれば、その科学的な恩恵はきわめて大きくまた本質的なものとなる。

FMO 計算は、光応答タンパク質の電子遷移エネルギーの定量的な算定でも使われてきている。これは、応答部位 (クロモフォア) を特定したうえで限定的に励起状態計算を行うものだが、エクサ級の超並列計算資源があれば、タンパク質全体について求めることも可能であろう。物性値評価としても、2次高調波などの非線形光学応答核磁気共鳴などの磁気応答などもカバーされる。光合成系 (PSC) の電荷分離のモデリングについても、FMO 計算から得られるフラグメント MO を再構成する (FMO-LCMO) などの技法を用いて大域での電子移動度の算定が行えるようになると思われる。そこでは数千万次元の非疎行列

の固有値問題を解く必要がある。

計算機環境について付言すると、米国の NWChem ですでに活用されている多ノード共有メモリ空間構築と行列積ツール (GA) 等が提供されると大規模フラグメントの処理には福音となると思われる。また併せて、ノード間をまたぐスレッドベースの並列化もサポートされるとコードの発展には有利であろう。“統計ジョブ”に関連しては、計算結果をダンプする半導体メモリ (SSD) とともにフォルトトレランス機構が考慮されることが望まれる。

(v) 電子・電磁場ダイナミクス法

光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを理論的に設計するための、電子・電磁場ダイナミクスの数値計算シミュレーションソフトウェアである。対象とする系は、1 辺十数 nm から数十 nm 程度の実在系ナノ構造体。原子数は 100 万原子から 200 万原子、時間ステップ数は 2.5 万～5 万ステップである。

【アルゴリズムの説明】 時間依存 Kohn-Sham 方程式 (方程式の形は時間依存シュレディンガー方程式と同一) を実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解く。x,y,z 方向の格子点数を各々 N_x, N_y, N_z とすると、実空間グリッドの総数は $N_x \times N_y \times N_z$ となる。主要な演算は、ハートリーポテンシャルを評価するためのポアソン方程式の計算、時間発展計算にともなうハミルトニアンの変動関数への作用の二つに大別できる。いずれにもラプラシアンの変動関数が含まれており、その演算は、 $((N_x \times N_y \times N_z) \times (N_x \times N_y \times N_z))$ の疎行列と $(N_x \times N_y \times N_z)$ のベクトルとの積と等価である。ただし、実際の計算では疎行列そのものを扱うのではなく、縮約してベクトルとベクトルの積に帰着する。マクスウェル方程式も実空間 3 次元グリッド上で差分法を用いて解くが、Kohn-Sham 方程式に比べればその計算負荷は格段に低いので相対的に無視できる。

【想定する計算】 光機能性を持った量子ナノ構造体デバイスを設計するためには、最低 50000 ステップの時間発展が必要となる。C60 分子を立方体空間に 25 個 \times 25 個 \times 25 個 \sim 16000 個並べる系を想定してスペックを見積もる。この場合、原子数は 60 \times 16000 分子 \sim 960000 個、軌道数は 120 \times 16000 分子 \sim 1.9M 軌道となる。

【想定する計算機】 時間発展 1 ステップ当たり 1 秒で計算を行うためには、630PFLOPS のシステムが必要になる。

【計算空間総メッシュ数】 メッシュサイズを 0.25 とすれば 1 辺当たり 33nm \div 0.25 \sim 1300 点。したがって、総メッシュ数は $(1300)^3 \sim 2.2G$ となる。

【総演算量】 1 ステップ当たり 2.2G(総メッシュ数) \times 1.9M(総軌道数) \times 30 回 (差分法演算回数) \times 5 回 (テラー展開 4 次 + 軌道エネルギー評価) \sim 630P 回。

【総メモリ量】 計算グリッド上に波動関数をストアしておくためのメモリがほとんどを占める。2.2G(総メッシュ数) \times 1.9M(総軌道数) \times 16B(複素数) \times 3(作用前波動関数用配列、作用後波動関数用配列、テラー展開での総和の波動関数用配列) \sim 200PB。

【ネットワークバンド幅】 1 ステップ当たり 2.2G(総メッシュ数) \times 8B(実数) \sim 18GB の電子密度用データの Allreduce による通信が発生する。通信を全実行時間の 1 割と考えるとノード当たり 180GB/s 必要となる。

【メモリバンド幅】 1 ステップ当たりの総メモリ量を 1 秒でアクセスするために 200PB/s 必要となる。

【オンチップメモリ】 1軌道あたりに必要とされるメモリ量は $2.2\text{G}(\text{総メッシュ数}) \times 16\text{B}(\text{複素数}) \times 3(\text{波動関数用配列数}) \sim 110\text{GB}$ 。空間を 125 分割 ($5 \times 5 \times 5$ 分割) して、各ブロック内で差分法演算に使うデータをすべてオンチップ上に載せるためには 0.9GB 必要になる。

【ストレージ容量】 波動関数を入力として読み込むために、 $2.2\text{G}(\text{総メッシュ数}) \times 1.9\text{M}(\text{総軌道数}) \times 8\text{B}(\text{実数}) \sim 33\text{PB}$ が最低必要となる。

(vi) 短距離力古典分子動力学法

主にカットオフのある Lennard-Jones 型ポテンシャルなど、短距離相互作用の粒子モデルを古典分子動力学法により時間発展させ、気液二相流を全粒子計算によりシミュレーション、解析を行うというものを想定する。この場合、計算コストの大部分は二体力の計算であり、並列化は 3 次元空間分割、通信は隣接ブロックとの粒子座標交換となる。なおプロセス全体のフラグ同期を毎ステップともなう。想定する計算機の性能は、100TFLOPS の計算能力と 10TB のメモリを持つノードが全体として 1EFLOPS を構成しているとし、この計算機上で粒子数 10^{12} から 10^{14} 程度、粒子数 \times ステップで $10^{18} \sim 10^{20}$ 程度の計算を行うとして通信およびストレージへの要求性能の見積もりを行う。

【計算可能な総自由度の見積もり】 例えばカットオフ 3、密度 0.5 の系を想定すると、粒子当たり 50 回の力の計算が必要となる。粒子対当たりの浮動小数点演算回数はおよそ 50 回であり、力の計算を全体の 5 割、1 ステップを 1 秒以内で行うことを考えると、100TFLOPS 程度の計算能力があれば、20G 個程度の粒子の計算が可能となる。しかし、現在の実装では密度揺らぎのバッファも含めて粒子当たり 2KB のメモリを必要とするため、ノード当たり 10TB のメモリがあるとすれば 5G 個の粒子までしか扱うことができない。このように短距離古典分子動力学法においては、計算が比較的軽いため、扱うことができる粒子数は計算能力よりもメモリ容量によって規定される。以上のようにノード当たり 5G 個の粒子を扱い、1 万ノードあれば、50T 個、すなわち 50 兆粒子の計算が可能となる。

【メモリバンド幅】 理想的にキャッシュ、レジスタが使えた場合、一つの力の計算を行うのに粒子座標の 3 成分を読み込み、運動量の 3 成分を書き込む必要があるため、1 粒子対当たり 48Byte の読み書きが生じる。1 粒子対当たり 50 演算を行うため、演算器を使い切るためには B/F 値は 1.0 程度必要となる。しかし、力の計算を理想的に行った場合でも演算器を半分程度使うのが限度であると思われるため、ピーク性能比として 20% を目指すのであれば、B/F 値は 0.20 程度でよい。

【通信バンド幅】 100TFLOPS の計算能力を持つノードに 5G 個の粒子を載せた場合、粒子直径を 1 としておよそ $2000 \times 2000 \times 2000$ の領域に対応する。したがって、通信量は 1step 当たり $2000 \times 2000 \times 3(\text{カットオフ}) \times 6(\text{方向}) \times 24\text{Byte} = 1.73\text{GB}$ 程度となる。1step の計算に 0.25 秒程度かかると推定されるため、通信が 0.01 秒程度で完了することを要求すると、100GB/s から 200GB/s 程度必要となる。ただし、通信と計算を完全にオーバーラップさせることができれば、5GB/s から 10GB/s 程度でよい。また、アルゴリズム上、毎ステップすべてのプロセスで同期が必要となるが、1step が比較的長いいため、通信および同期のレイテンシはほとんど問題にならないと思われる。

【ストレージ】 物理量は原則として計算中に TB オーダーまで粗視化したうえで出力することを想定している。そこで、ストレージはチェックポイントファイルがストレスなくはける程度でよい。50T 個の粒子情報をすべて出力すると 2.4PB 程度となる。一度のプロダクトランで数回出力するとして 10PB 程度。頻繁に保存しないため、数十秒かかってもよく、0.1PB/s 程度の I/O 速度があればよい。

(vii) 長距離力古典分子動力学法

脂質膜や高分子の大域構造やダイナミクス、特に、単純な球や平面を超えた現実的な曲率を持つ系の取り扱い、また、タンパク質複合体の解析には、1 億～10 億原子系を対象として、マイクロ秒～サブミリ秒の計算が必要となる。ナノ界面の取り扱いにも、原子レベルの凸凹を含めて、固体部分と液体部分の分子を露わに取扱うために、数千万原子系についてマイクロ秒～ミリ秒の計算が必要となる。

ここで必要な計算スペックを、modylas の「京」での MD 計算のパフォーマンスを基に試算した。マシンの性能を 5 EFLOPS と想定し、単ノード当たり 10 TFLOPS であったとすると、ノード数は 50 万となる。よって単ノード当たりの原子数は $1 \sim 10 \text{ 億} \div 50 \text{ 万} = 200 \sim 2000$ となる。「京」ではノード当たり 160 原子程度が最適であったので、ノード当たりの負荷は約 1.2～12 倍となる。メモリについては、MODYLAS による実測に基づき 10 億原子系について試算した結果より、全ノード合計で 2PB 程度必要となる。また「京」と同程度の容量の L1,L2 キャッシュが装備され、SIMD 機能が備えてあればよい。更に単ノード当たりの性能は「京」に比べて $10\text{T}/128\text{G}=78$ 倍となっており、これが原子数増大による負荷 1.2～12 倍および 1 MD ステップ当たりの処理速度の向上（6～60 倍程度）に費やされれば十分に実行可能である。

ノード当たりの通信量は、ノードに含まれる原子数に比例するとして、約 1.2～12 倍となる。「京」での数十マイクロ秒の 12 倍時間を要したとするとサブミリ秒程度である。目標は 1 MD ステップを 0.1～1 ミリ秒程度なので、通信速度は「京」よりやや速いものが必要となる。更に、「京」においてはレイテンシにサブミリ秒を要しているが、高速化のためにはこれを数分の一にする必要がある。

MD のトラジェクトリは、1 ps ごと程度に保存することが妥当である。この場合に必要な総ストレージ容量は、約 100～1000 PB となる。

(viii) 化学反応動力学法

反応経路上に複製された多数のレプリカ構造を等間隔に配置しつつ構造緩和させることで最小エネルギー経路を求める String 法や Nudged Elastic Band 法、反応経路のアンサンブルを発生する Transition Path Sampling 法や Onsager-Machlup 法、反応座標を拘束した分子動力学計算から反応自由エネルギー曲線を計算する Blue Moon Ensemble 法、バイアスポテンシャルを用いて反応自由エネルギー表面を探索できる Metadynamics 法などがある。また、少数自由度系について網羅的に探索することのできる GRRM 法や AFIR 法もある。非断熱遷移をとまなう反応には Surface Hopping 分子動力学法などが不可欠である。更に、分子振動状態を扱う vibrational SCF 法などがある。これらの手法の場合、レプリカを多数（数十～数万）用いた同時並列計算になるが、レプリカ間は座標・エネルギー・力などを交換や収集するだけで、通信量は少なく済む。

(ix) 量子分子動力学法

経路積分法により虚時間軸上に複製されたレプリカについて分子動力学計算を同時に並列で実行すると、零点振動・トンネル効果など量子現象を考慮した分子シミュレーションが可能になる。これを更に電子状態計算と組み合わせると、電子と原子核からなる量子多体系を丸ごと第一原理的に解ける。この方法によれば、水素をはじめとした軽元素の物性の定量的解析が可能となり、水・DNA・酵素など水素結合

系の分野で貢献できる。また、この特徴を活かし、実験とのタイアップのもと、次世代エネルギーとして期待される水素貯蔵材料、燃料電池材料の研究開発に役立てることもできる。

経路積分分子動力学法では、数十～数百レプリカそれぞれについて、延べ数十万～数百万ステップ程度の統計量をとる必要がある。隣接するレプリカ同士には調和振動子の相互作用が作用するため、各ステップで、座標・エネルギー・力などの通信が発生する。

(x) クラスタールゴリズム量子モンテカルロ法

量子スピン系、ボゾン系などの量子格子多体系において、量子ゆらぎの効果と温度ゆらぎの効果を厳密に取り入れた量子モンテカルロシミュレーションを行うというケースを想定する。具体的には、連続虚時間経路積分を用いて、量子格子模型を一つ次元の高い古典模型にマップ（世界線表示）して計算を行う。この手法の特徴は、世界線の更新にループクラスタールゴリズムを用いる点にある。すなわち、世界線を局所的に更新するのではなく、ループと呼ばれる大域的な単位（かたまり）で更新する。ループの生成は、ループのサイズが系の内部自由度の相関とちょうど対応するように、かつ厳密につりあい条件を満たすように構成される。そのため、マルコフ連鎖の緩和は非常に速く、数百万～数億原子系においても自己相関時間は1～100程度である。これにより、計算機のメモリをフルに利用するような超大規模系においても、精度の高い平衡状態のシミュレーションが可能となる。

一方で、毎モンテカルロステップにおいて、全系の中でループを認識する必要があり、そのためのunion-find アルゴリズムが計算時間の大部分を占める。ここでは、リンクリストをたどる、リンクリスト同士を結合する、など非浮動小数点数演算が主であり、ベクトル化やSIMD化は非常に困難である。CPU単体性能としては、条件分岐やキャッシュミスのペナルティが小さいことが求められる。すなわち、レイテンシの短い演算器、レイテンシが短くインダイレクトアクセスの速いメモリが必要である。更に、ノード間ではバタフライ型の通信により、大域的なループ認識処理を行うので、輻輳を抑えるためにも高次元のネットワークが必要となる。

(xi) 変分モンテカルロ法

数百～数万原子からなる大規模な強相関電子模型・量子スピン模型の基底状態波動関数を計算するというものである。多数の変分パラメータを持つ変分波動関数について、エネルギーの期待値をモンテカルロ法で評価し、変分パラメータを最適化することで、基底状態の波動関数・エネルギー・さまざまな物理量の評価を行う。他の手法では扱うことの難しい2次元以上の強相関電子系やフラストレーションのある量子スピン系を精度よくシミュレートすることが可能である。例えば「京」では1000格子点規模のシミュレーションにより鉄系超伝導特性の物質依存性が明らかにされつつあるが、これを超える高温超伝導体の設計指針を確立するためには、より高い精度での理論予測の検証や実験系との定量的な直接比較による新機能発現機構の解明が必要である。そのためのシミュレーションには、多軌道効果や格子歪効果を取り入れた数万格子点規模の計算が必要であり、「京」の100倍程度の計算機環境が必要となる。

変分モンテカルロ法のボトルネックは、変分パラメータの最適化における逆行列の高速更新である。行列のサイズは電子の数（数千～数十万）である。5回=40Byteの読み書きに対して32の演算があるため、B/F値は1.25と見積もることができる。また、計算条件によっては、行列のパフィアン（行列式の種類）の高速更新における行列ベクトル積（B/F値=8）がホットスポットとなる場合もある。アプリ

ケーション全体としての B/F 値は 1.5 程度と見積もられる。ノード数 10000、1 ノードの理論ピーク性能 100TFLOPS、合計で 1EFLOPS の計算機を想定すると、20% の実効性能を実現するためにはメモリ B/F 値=0.3 が必要となる。ノード当たりのメモリ容量は 1TByte、ネットワークバンド幅とディスク容量については「京」と同程度で十分である。

以上の性能を持つ計算機を 1 ヶ月程度専有することで、上記の目的を達成することができると考えられる。

(xii) 厳密対角化

量子スピンの相互作用する多体系のハミルトニアン行列をランチョス法により対角化することを想定する。量子多体系のハミルトニアン行列は、疎行列であるが、非零要素が対角要素から遠く離れたところにも多く表れるのが特徴である。計算コストの大きな箇所は、行列を巨大ベクトルに作用させる部分で、計算は、この演算の繰り返しとなる。行列要素は on the fly で計算する。行列作用の回数は、バタフライ型の転送を要する行列と転送なしのケースがあり、総回数は 10 万～100 万回。巨大ベクトルの次元に比例する時間とメモリ (分散メモリの合計でよい) が必要である。以下、ノード当たりメモリ量、バイセクションネットワークバンド幅としては比較的高い値を持つハードウェア、具体的には、1 ノード性能として 5TFLOPS (整数演算も同じ性能と仮定)・5TB メインメモリ・512MB オンチップメモリ、総ノード数 $2^{14}=16384$ 、全体性能として 82PFLOPS・メモリ 82PB、バイセクションバンド幅 2PB/s (High-radix 型のトポロジーを仮定) のハードウェアを想定し、性能の見積もりを行う。

【計算する物理系と計算規模】 1 次元の $S=1/2$ スピン系を考える。スピン (格子点) 数は 54 とする。このとき、行列・ベクトルの次元は ${}_{54}C_{27}=1,946,939,425,648,112$ 、1 ノードのメモリ使用量最大値 (40 スピン分) $={}_{40}C_{20}(\text{要素}) \times 8(\text{B/要素}) \times 5(\text{本})=5,513,861,152,800\text{B}=5\text{TB}$ 、総メモリ使用量 $={}_{54}C_{27}(\text{要素}) \times 8(\text{B/要素}) \times 5(\text{本})=77,877,577,025,924,480\text{B}=69\text{PB}$ となる。この超巨大規模の行列・ベクトル積演算を一回当たり 100 秒程度で行うことを想定する。

以下では、キャッシュ (オンチップメモリ) 上にロードしたデータを最大限に利用するため、ベクトルを (最大) ${}_{26}C_{13}=9.9\text{M}$ 要素 (79MB) 単位でブロック化してメインメモリからオンチップメモリにロードするものとする。ブロック数は $2^{14}=16\text{K}$ となる。また、インデックスの逆引き用分割テーブル (少し大きい) と局所ハミルトニアンの行列要素のテーブル (非常に小さい) は計算の最初から最後まで常にオンチップメモリ上にあるとする。

【1 ノード内での演算量・メモリ転送量】 対角ブロック部分は計 16K 個のブロックからなる、各ブロックは 9.9M 要素の対角成分と、 $25 \times 9.9\text{M}$ 要素の非対角成分からなる。対角成分の乗算にはインデックス計算は必要ないが、行列要素の計算には、1 要素当たり、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算に 5 整数演算 (shift $\times 2$ + and $\times 2$ + or $\times 1$)、その和に 1 浮動少数点数演算が 25 セット必要である。ベクトルの要素との乗算には 2 浮動少数点数演算が必要となる。また、非対角成分の乗算には、1 要素当たり、ベクトルのインデックス計算 (6 整数演算)、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算 (5 整数演算)、ベクトルの要素との乗算 (2 浮動少数点数演算) が必要となる。

一方、非対角ブロックは、合計で $14 \times 16\text{K}$ 個あるが、非対角ブロックの非零要素 (9.9M 個) はすべて非対角成分である。1 要素当たり、ベクトルのインデックス計算 (6 整数演算)、局所ハミルトニアン行列のインデックス計算 (5 整数演算)、ベクトルの要素との乗算 (2 浮動少数点数演算) が必要となる。

以上を合計すると、ノード内非並列部分合計として、1回ハミルトニアンを掛けるのに必要な演算数は、浮動小数点数演算 $=((1 \times 24+2) \times 9.9M+2 \times 24 \times 9.9M+2 \times 20 \times 9.9M) \times 16K=181,00G=17.6T$ 、整数演算数 $=((5 \times 24 \times 9.9M+(6+5) \times 24 \times 9.9M+(6+5) \times 20 \times 9.9M) \times 16K=95,700G=93.4T$ となる。一方、メインメモリアクセスは、左辺ベクトルの load/store が $79MB \times 16K \times 2$ 、右辺が $79MB \times (1+20) \times 16K$ 、合計 $29,100G=28.4TB$ 必要である。したがって、ピーク性能を出すために必要な B/F 値 $=28.4/17.6=1.61$ (もしくは $B/(F+I)$ 値 $=0.256$)と見積もられる。

【並列部分】 1回のハミルトニアン乗算に以下の転送演算が16回必要となる。転送パターンはバタフライ型である。ノード当たり転送量は $1TB \times 2$ の send/receive、すなわちバイセクション転送量は $1TB \times 16384=16PB$ となり、一回の転送に8秒かかる計算になる。演算に関しては、インデックス計算・行列要素計算はほぼ無視できる一方、浮動小数点数演算数は $2 \times 0.125T=0.25T$ であるので、0.05秒で完了、また、メインメモリへのアクセス量は $3 \times 1TB=3TB$ であるので、0.6秒で完了する。以上の見積もりから、律速となるのはノード間転送であることがわかる。すなわち演算とメインメモリアクセスはすべて転送の裏に隠せることになる。ノード間計算部分では「バイセクションバンド幅」が計算の律速となる。

【全体性能】 全計算時間は $((17.6+93.4)/5+8 \times 16) \times 1000iteration=150,200sec=42hour$ と見積もられる。このうちノード間転送時間が全体の85.2%を占める。仮にバイセクションバンド幅が10倍になると全計算時間は9.7hourまで短縮される。逆に iteration を100sec(すなわち全計算時間を106sec)以内で終わらせるためには、3.3PB/sのバイセクションバンド幅が必要となる。

【ストレージに対する要求】 最終的な結果の出力はごくわずかであるが、チェックポイント用にベクトル3本(計41PB)分の入出力が必要である。この読み書きを30分程度で終了するI/O性能が要求される。

(xiii) 階層的マルチスケールシミュレーション

階層的マルチスケールシミュレーションとは、二つ以上の異なるプログラムを縦列に接続することにより、個々のプログラムでは得られない物性を引き出す手法である。具体的には、下部プログラムである第一原理電子状態計算(量子化学計算、バンド計算、FMO計算、ONIOM計算など)や古典力場計算(短距離力、長距離力)あるいはその組み合わせ(QM/MM計算やRISM-SCF計算など)を同時に複数並列で実行し、これに必要な入出力情報(原子核の位置、エネルギー、力、その他の物性情報)を通信で交換または収集する。次に、上部プログラムである分子シミュレーション法(分子動力学法、モンテカルロ法、拡張アンサンブル法など)や理論(統計力学、線型応答理論、化学反応論、経路積分理論)に基づいて追加的に処理を施す。以上が基本工程になっている。そして、目的とする物性データを最適化したり、統計的処理を施したりするのに、この基本工程を大量に繰り返す必要がある。この際、下部プログラムが全計算の大半を占めるため、計算に必要なスペックは下部プログラムの種類に準じて決まる。通信は不可欠であるものの、通信量は限られていることから、超並列アーキテクチャをうまく活用できるという特徴があり、化学反応、量子分子動力学、相転移、相図、熱物性、分光学的・電気的物性、材料強度など、広範な応用が期待される。

このシミュレーションでは、上部ソフトウェアと下部ソフトウェアが独立している場合、現状ではシステム・コールとディスクI/Oを介した情報交換を多用せざるを得ない。これを避けるためには、各ソフトウェアのインターフェースやMPIコミュニケータを著作権に注意しながら適宜書き換える必要が生じる。

・クラスター展開法：相図の第一原理計算

クラスター展開法での相図の第一原理計算では、100～10,000 原子のスーパーセルを対象とし、100～1,000 の異なるイオン配置について平面波基底の第一原理分子動力学法を同時に並列で実行し、それぞれの安定構造と全エネルギー値を収集する。次に、これをもとに決定されたイオン間の相互作用から、1,000 から 10,000 のモンテカルロ計算を行い、相図を求める。

エクサスケール計算機の活用により、2 元系合金にとどまらず 3 元系合金の相図を一度の計算で求める等の応用が期待される。例えば ATAT (<http://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/>) や CLUPAN (<http://clupan.sourceforge.net/>) が代表的なアプリケーションである。

・凍結フォノン法：熱物性の第一原理計算

凍結フォノン法は、第一原理計算から得られるフォノン分散関係から熱物性を計算する手法である。比熱評価のためには、約 100 原子のスーパーセル中の一つのイオンを微小に変位させた多数の構造で平面波基底の第一原理計算を同時に並列で実行し、それぞれで得られた各イオンに働く力を収集して得られるダイナミカル行列を対角化して、フォノン分散関係を求める。

熱伝導率評価のためには、高次の非調和相互作用項の計算が必要であり、そのためにはより大きなスーパーセル (100～10,000 原子) を用いてスーパーセル中のイオンを複数個変位させた第一原理計算を同時に実行する必要がある。例えば phonopy (<http://phonopy.sourceforge.net/>) が代表的なアプリケーションである。

・有効ハミルトニアンに基づいた分子動力学法：強誘電体物性

強誘電体を擬スピンの格子状に並んだモデルとして考える。その有効ハミルトニアンは第一原理計算から決定する。有効ハミルトニアンを温度、圧力、ひずみ、バルクか薄膜か、外部電場などさまざまな環境下で分子動力学法により時間発展させることで強誘電体の物性、すなわち相図やリラクサーの誘電率の周波数依存性などが決定できる。このためには、 $256 \times 256 \times 256 \sim 512 \times 512 \times 512$ ほどの 3 次元 FFT (実数→複素数、複素数→実数) を多用する、1 ノードに載る比較的小規模の計算を数百～数万個実行する必要がある。例えば feram (<http://loto.sourceforge.net/feram/>) が代表的なアプリケーションである。

(xiv) フェーズフィールド法

フェーズフィールド法は、合金材料の組織形成をシミュレートする連続体モデルであり、実用合金の実プロセスにおいて問題となる組織形成過程の解析に応用されつつある手法である。合金凝固過程を対象とすると、流体の速度場、温度場、溶質拡散場および秩序変数の方程式を連立して解くことになる。フェーズフィールド法において、デンドライト組織形成を高精度にシミュレートするためには、 $10^{-8} \sim 10^{-7}$ m 程度の空間分解能を要する。一方で、デンドライト集団の統計的挙動の議論において対象とする空間スケールは 10^{-3} m 程度のスケールである。したがって、凝固組織形成の高精度シミュレーションには、およそ $10^{13} \sim 10^{14}$ 規模のメッシュ数が必要となる。並列化による大規模計算における主たる演算は陽解法によるステンシル型の計算であり、袖領域のデータ通信が並列化における通信時間の主となる。現在、TSUBAME2.0 を用いた GPU 並列により、 10^{12} メッシュ規模の計算で 2PFlops の実行性能が達成されている。

ミリメートルの空間スケールにおける数分間の実用合金の一方向凝固を、24 時間程度の計算時間でシミュレートするために要する性能を見積もる。総メッシュ数は $10^{13} \sim 10^{14}$ 程度であり、1 万ノード並列

を仮定すると、1ノード当たりのメッシュ数は 10^9 程度となる。また、実時間スケールで数分間のシミュレートのために必要な総時間ステップ数は 10^7 程度であり、一ステップあたり 10^{-2} s程度の計算時間である。これに基づく、1ノードの理論ピーク性能は100TFLOPSが必要となり、全体で1EFLOPSを要する。そして、この計算に必要な1ノード当たりのメモリは約150GBとなる。また袖領域の通信容量は一ステップあたり300MBと見積もられ、通信には少なくとも30GB/sが必要となる。

(xv) まとめ: 物質科学分野が必要とする計算機環境

計算物質科学におけるアルゴリズム・シミュレーションの特徴として、以下が挙げられる。

- 1回の時間発展の計算だけではなく、相関の強い系や平衡状態や定常状態に興味がある。
- 非平衡状態を議論する場合には、フェムト秒からピコ秒、ナノ秒といった非常に長時間のシミュレーションが要求される。
- シミュレーションする系の次元は3次元とは限らない。相関の強い量子多体系のシミュレーションでは、相互作用が非局所的であることも多い。
- 遠くの相関の効果を正確かつ効率的に取り込む、または、できる限り少ない反復回数で平衡状態にたどりつくためのアルゴリズム上の工夫として、非局所的な操作が導入される場合も多い。

このため、局所性が乏しくデータの再利用が困難、物理的に遠くのノードとの通信が必要となり高次元のネットワークポロジが必要など、一般的に高い性能を持つハードウェアが要求される。

【演算器・メモリ】

計算物質科学分野のアプリケーションが要求する性能は、演算重視、メモリバンド幅重視、クロック重視など、さまざまである。しかしながら、他の分野と比べ、一般的に大メモリ、高メモリバンド幅を必要とするアルゴリズムが多いと言える。一方で、浮動小数点数演算が少なく、SIMDが全く効かないアプリケーションも存在する。物質科学分野としては、「京」と同様のアーキテクチャー、あるいはメモリと演算とのバランスをより重視したアーキテクチャーを中心とした、複数のシステムが望ましい。

また、物質科学分野においては、非常に短いサイクルで新しい手法・アルゴリズムが次々と生まれていくため、分野全体として必要とする演算の種類、B/F値などをあらかじめ想定すること不可能である。したがって、ヘテロな構成のCPUの場合、ほとんどの場合その性能を使い切るとは困難であると考えられる。

演算精度については、安定性、精度の面から単精度では不十分な場合が多く、通常倍精度演算が必要である。一方、現状では4倍精度への要求はそれほど強いとは言えない。しかしながら、エクサスケールの計算機により長時間シミュレーションが可能になると、倍精度の限界が見えてくる恐れも十分にある。

【ネットワーク】

物質科学分野のアプリケーションにおいては、3次元の隣接通信だけではなく、4次元あるいはより高次元の通信パターンが必要となる場合も多い。そのため「京」のような3次元メッシュ/トーラスではネットワークがボトルネックとなり演算性能が発揮できない場合も多い。

エクサスケール機のネットワークとしては、high-radixタイプのものが望ましい。あるいは、遠くは3

次元トラス、近くはより次元の高い密な結合といったハイブリッドタイプのネットワーク構成と、特に allreduce, allgather, alltoall といった全対全通信を効率よく行うための機構や、FFT、疎行列の対角化、クラスターモンテカルロ法におけるバタフライ型通信・演算のための機構を組み合わせた全く新しいネットワークの開発が求められる。一方、strong scaling で長（実）時間の計算を行う場合のボトルネックはレイテンシである。近接通信、あるいはリダクション演算を現状と同程度あるいは現状より更に低いレイテンシで実行可能なネットワークが望まれる。

「物質科学」要求性能表

	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模
次世代先端デバイス	100	100	1.2	10	96	10	350000	第一原理計算 RSDFT(擬ポテンシャル法、実空間基底)	原子数：10 万
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2.2×10^6	第一原理計算 PHASE(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数：1 万 100MD を同時実行
次世代先端デバイス	100	100	2	15	60	100	2.2×10^6	第一原理計算 xTAPP(擬ポテンシャル、平面波基底、 $O(N^3)$ 法)	原子数：1 万 100MD を同時実行
次世代先端デバイス	100	20	5	10	240	10	860000	第一原理計算 CON-QUEST(密度行列、最適化による $O(N)$ 法)	原子数：1 億 2 f s の 時間刻みで 2 5 0 0 0 でナノ秒オーダー を想定 計算時間は要 注意。時間ステップ 数 10^4 。電子材料の 電子状態計算・手法 1 と同じ計算だが、こ ちらは個々のケースを 高速に計算する必要 があり、ネットワーク 性能をより要求する。 ストレージ量の違い は出力頻度の違いに よる。
光・電子デバイス ¹	1000	10	10	0.1	1	100	360000	高精度分子軌道 法	2 万基底、100 万求積 点
分子機能	300	18	4	0.0001	15	10	160000	大規模分子軌道 法	原子数：1 万
分子機能（タンパク質の電子状態）	1.1	0.19	1	0.001	1	100	400	フラグメント分子軌道法	数百残基のタンパク質、数千万次元の密行列の固有値問題
熱交換デバイスの安全性向上・特性解析	20	6.4	51	44	24	10	17000	短距離古典分子 動力学	粒子数：4000 億
分子機能と物質変換	1000	100	2	1000	150	10	5.4×10^6	長距離古典分子 動力学	原子数：10 億

(次ページに続く)

「物質科学」要求性能表（続き）

	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリバンド幅 (PB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要と計算手法	問題規模
光・電子材料	600	200	200	33	14	10	300000	ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法	原子数：96 万，時間は 1 ステップあたり 1 秒で計算量は 0.63EFLOP。これを 50000 ステップでおよそ 14 時間
強相関電子系の機能解明 ²	3	390	10	10	10	100	11000	クラスターアルゴリズム量子モンテカルロ法	原子数：1 億
強相関電子系の機能解明 ³	1000	300	0.2		8	100	2.9×10^6	変分モンテカルロ法	原子数 1 万
物質・エネルギー変換 ⁴	500	50	0.008	6.4	2.8	10	50000	量子分子動力学法	100 レプリカ、100 万ステップ
物質・エネルギー変換 ⁵	690	69	2	3.2	300	10	7.4×10^6	化学反応動力学・量子分子動力学法（分子軌道計算または QM/MM）	QM1000 レプリカ、10000 レプリカ、10000step, MM100,000 原子 (roadmap)
物質・エネルギー変換 ⁶	410	41	0.02	0.05	20	10	300000	化学反応動力学・量子分子動力学法（第一原理計算）	数万レプリカ
分子構造・分子機能 ⁷	1000	0.5	0.04		24	1	86000	分子動力学法（feram によるリラクサー強誘電体の誘電率の周波数依存）	512x512x512
新物質探索	4100	41	20		0.5	1	7400	クラスター展開法（第一原理計算）	原子数：1 万，100 イオン配置の同時実行
新材料 ⁸	0.1	0.02	0.00012		24	10000	86000	第一原理計算（凍結フォノン法）	原子数：1 万
強相関電子系の機能解明	82	130	82	41	42	10	120000	厳密対角化（ランチョス法）	54 サイトのスピンス（S _z =0）
新物質探索 ⁹	690	1600	1.5	20	24	20	1.2×10^6	フェーズフィールド法	10 ¹³ 空間メッシュ、10 ⁷ 時間ステップ

¹ 100～1000 くらいのアレイジョブを想定² 整数演算がメイン³ メモリ使用量は MPI プロセス数に比例し最大使用量を記載した⁴ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁵ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁶ 電子状態計算の要求性のは第一原理計算の xTAPP、古典 MD は MODYLAS、I/O の部分は東大渡辺による短距離古典 MD（東大渡辺さん）のデータをベースに概算⁷ アレイジョブでノード間通信なし⁸ PHASE の 1/10 の規模であることから、同時実行はこの表では想定していない⁹ 1 ノード 100 TFLOPS, 10000 ノード並列を仮定

4.2.5 他分野との連携

理論物質科学、すなわち理論物性物理、理論分子科学、理論材料科学は、古くから実験分野との強い連携の下に研究が進められてきたのは言うまでもない。今後は、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との、より一層の連携が求められる。また、物性理論分野は、素粒子、原子核、宇宙といった他の基礎物理分野とも強い関連があり、伝統的に研究交流も盛んである。近年では、生体分子研究における生命科学分野との連携や、エネルギー・環境分野におけるものづくり分野との連携も進んでいる。

4.2.6 公的な意見交換とそのサマリー

物質科学分野では、討論会「エクサスケールコンピュータへの期待」(2012 年 7 月 13 日、東大物性研)、日本物理学会計算物質科学インフォーマルミーティング (2012 年 9 月 18 日、横国大)、TCCI 研究会 (2012 年 10 月 9 日、分子研)、計算物質科学シンポジウム (2012 年 10 月 22 日、東大物性研)、CMSI 研究会 (2012 年 12 月 3 日、分子研)、日本化学会特別企画「超巨大計算時代の化学」(2013 年 3 月 25 日、立命館大)、日本物理学会シンポジウム「エクサスケールに向けて歩み出す計算物理学」において、実験家、企業研究者も含めたコミュニティ全体に対しロードマップを紹介し、パネルディスカッションなどを通じて意見収集を行った。具体的には、J-PARC、SPring-8、SACLA といった大型実験施設との連携強化、元素戦略 (磁石、触媒・電池、電子材料、構造材料分野) への計算物質科学からの貢献への期待などの意見を得ることができた。また、最先端 HPC だけでなく、非専門家が PC あるいはクラスターワークステーションでシミュレーションを実行できるよう計算物質科学コミュニティ全体でアプリケーション・ソフトウェアを整備することや、莫大なシミュレーション結果や実験結果を保存・公開する仕組みを整備することなどに対する強い要望があった。

4.2.7 ロードマップ

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
半導体電子デバイス	100万原子系の第一原理計算($O(N)$ 法) ← 1万原子系の第一原理計算($O(N^3)$ 法) →			1000万原子系	1億原子系 ← 10万原子系 →	
光・電子材料	10数nmのナノ構造体の電子・電磁場ダイナミクス ← →				数10nmの実在系ナノ構造体 ← →	
生体分子機能・創薬	1000万原子系の古典分子動力学計算 ← →			1億原子系 ← →	10億原子系 ← →	
分子構造・分子機能	ナノスケール分子系の高精度計算 ← →			分光学的精度での分子構造の予測 ← →		
ソフト分子		量子化学計算と分子シミュレーションの大規模化 ← →			マルチスケール手法の開発、統計力学理論の高度化 ← →	

図 4.5 物質科学ロードマップ (1)

年代 課題	2012 ～	2014 ～	2016 ～	2018 ～	2020 ～	2022 ～
物質・エネルギー変換	数百原子系のQM/MM-MD ← →		1000原子系 ← →		数千原子系 ← →	
界面・表面	10nmサイズの気相・固相界面 ← →		数十nmサイズ ← →		100nmサイズの気液界面 ← →	
構造材料	数百パラメータのマルチスケール計算 ← →		数千パラメータ ← →		数万パラメータ ← →	
熱交換デバイス	100億原子系の分子動力学計算 ← →		1兆原子系 ← →		100兆原子系による気液混相流 ← →	
強相関電子系	100万格子点の量子モンテカルロ計算 ← 1000格子点の変分モンテカルロ計算 →		1000万格子点 ← 数千格子点 →		1億格子点の量子磁性体 ← 1万格子点の強相関材料 →	

図 4.6 物質科学ロードマップ (2)

参考文献

- [1] 押山淳, 天能精一郎, 杉野修, 大野かおる, 今田正俊, 高田康民. 計算と物質 (岩波講座計算科学第3巻). 岩波書店, 2012.
- [2] 日本化学会編. 巨大分子系の計算化学 超大型計算機時代の理論化学の新展開. 化学同人, 2012.
- [3] 日本学術会議第三部拡大役員会・理学・工学系学協会連絡協議会. 理学・工学分野における科学・夢ロードマップ. <http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-21-h132.html>, 2011.

4.3 エネルギー・材料

4.4 生命科学

4.5 創薬・医療

4.6 設計・製造

4.7 社会科学

4.8 脑科学・人工知能

4.9 地震・津波

4.10 気象・気候

4.11 宇宙・天文

第 5 章

おわりに

付録 A

用語集

用語	解説
A	
ABINIT-MP(X)	望月・中野らが開発している国産 FMO 計算用のプログラムシステム。4 体のフラグメント展開までが可能。
AFO	FMO 計算を 2 体展開の範囲内で固体系に適用するための技法の 1 つ。
Allreduce QR 法	QR 分解の手法の一種。高並列環境で高い並列性能を実現するために近年提案された新しい手法。
allreduce, allgather, alltoall	計算ノード間での集団通信の様式。接頭辞の all はすべてのノードに渡って結果を共有する事を示す。allreduce は総和などリダクション型の演算を計算ノードにまたがって行うこと。allgather はすべてのノードから部分データを集めて全体データを作ること。alltoall は全体全通信によって、データの転置を行うこと。
AU	天文単位 (Astronomical Unit) の略称。天文単位とは長さの単位であり、地球と太陽間の距離に由来する。今日では 149,597,870,700 メートルと定義される。
B	
Bi-CGSTAB 法	疎行列の連立一次方程式の解法の一つ。反復解法の一つである双共益勾配法 (BiCG 法) の残差を減少させ、安定化した手法。比較的高速・安定とされる手法で、偏微分方程式を解く多くの物理問題 (熱流体・構造・電磁場など) の核となるソルバとして広く使用されている。
Bisection BW	バイセクションネットワークバンド幅のこと
BLAS	Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS)。ベクトルと行列に関する基礎的な線形代数演算のサブプログラム集のこと。線形代数演算ライブラリ API のデファクトスタンダードでもあり、高度に最適化された実装がインテルなどの各ハードウェアベンダーなどから提供されている。

(次ページに続く)

用語	解説
B 中間子	ボトムクォークを含む中間子の総称。
C	
CP 対称性	C は荷電共役変換（粒子 \leftrightarrow 反粒子）、P はパリティ変換（鏡映変換）を表す。これらの変換の組み合わせによって理論が不変であるとき、その理論は CP 対称性を持つという。
D	
DGEMM	倍精度汎用行列乗算のための BLAS のサブルーチンのひとつ。LINPACK ベンチマーク内で多用されているため、DGEMM 実装の性能はベンチマーク結果に大きな影響を与える。
DZP 基底関数	double zeta polarization 基底関数。1s, 2p などの原子基底の各成分を、二つの短縮ガウス型関数を用いて表現した基底を DZ(double zeta) 基底と言い、それに分極関数を加えたもの。
E	
EDA 標準技術	電子情報技術産業協会 EDA 標準技術専門委員会配下の EDA 標準化小委員会において推進している国際標準化機構の活動に対応した EDA (Electronic Design Automation) の標準化活動のこと。
ESR	電子スピン共鳴の略。開殻系の電子状態に関する情報が得られる。
F	
Fermi-Pasta-Ulam の非線形励起	非線形なバネで互いにつながれた多数の粒子の運動において孤立した波が生じる現象。ソリトンと呼ばれる
Finite-difference Time-domain 法	電磁場解析等で用いられる計算手法の一つ。空間を差分近似し陽的な時間進行法を用いる。
FMO	フラグメント分子軌道法 (FMO 法: Fragment Molecular Orbital Method) は、北浦和夫教授（現神戸大学）によって開発された量子化学理論。分子全体を小さなフラグメントに分割して計算をするため、通常の量子化学計算では不可能なタンパク質のような大規模分子系の量子化学計算が実行可能。また、分割した小規模のフラグメントごとに並列計算を実行することが可能なため、非常に効率よく並列計算を実行可能。
Fock 行列	多数の電子の振る舞いを平均化されたポテンシャル中を動く、一電子のシュレディンガー方程式を行列表現した行列のこと。
G	
GAMESS	米ゴードン研が DOE などの資金で開発を続けている汎用の分子軌道計算プログラム。10 年ほど前から FMO 計算機能が導入されている。

(次ページに続く)

用語	解説
gatherv	MPI のデータ転送関数 (MPI_GATHERV)。全てのプロセスから一つの宛先プロセスにメッセージを転送する。
Gauss 関数の局所性	中心からの距離が大きくなるにつれて急速に値が減衰する Gauss 関数の性質。2 電子クーロン反発積分などの計算で、これを利用したカットオフ、演算削減は大きな効果がある。
GCC	GNU Compiler Collection. 自由に使える C/C++ 言語などのプログラム言語のコンパイラ。
(gg gg) 型積分	2 電子クーロン反発積分は 4 つの基底関数中心を持つが、その 4 つの基底関数ともに全角運動量 5 の g 軌道関数を含む 2 電子クーロン反発積分のこと。
GMRES 法	疎行列の連立一次方程式の解法の一つ。反復解法の一つで、比較的ロバストなクリロフ部分空間法の一つとして知られている解法。同時に使用する前処理法や計算条件によって、並列計算性能が高く、高速に収束解が得られるため、偏微分方程式を解く物理問題の一部で使用されている。
G タンパク質共役受容体	細胞外の神経伝達物質やホルモンを受容してそのシグナルを細胞内に伝える受容体。その際 G タンパク質と呼ばれる三量体タンパクを介してシグナル伝達が行われる。多くの薬剤のターゲットになっている。
H	
HF 交換相互作用	密度汎関数法において、交換相互作用を表現する汎関数に Hartree-Fock(HF) 法の交換相互作用を使ったもの
High-radix 型	ある計算ノードからもう一つの計算ノードへの通信が、その他の計算ノード同士の間通信と同時に実行しやすいネットワーク。すなわち他のノードに妨害されずに通信できる一ノードあたりのノード数が多いネットワーク。
Hodgkin-Huxley formalism	イカ巨大軸索を対象に神経細胞における活動電位の発生メカニズムをゲート（後に実体としてこれに相当するイオンチャネルがあることが明らかにされた）の協同性を用いて電気回路として記述したモデルが Hodgkin-Huxley モデルである。この形式を Hodgkin-Huxley formalism と呼び、多くの種類のイオンチャネルやマルチコンパートメントモデルに対しても用いられる。
HPCI 戦略分野	スーパーコンピュータ「京」を中心とした HPCI (High Performance Computing Infrastructure) を最大限に活用することによって、戦略的に取り組むべき 5 つの研究分野
I	

(次ページに続く)

用語	解説
IACM	International Association for Computational Mechanics。国際計算力学連合。計算力学に関するいくつかの国際学術講演会を運営する。
L	
L1,L2 キャッシュ	CPU にはメモリとのデータ転送を節約するためのデータの一時的な保管場所があり、それをキャッシュという。キャッシュは演算装置とメモリとの間に多階層に配置されており、演算装置に近い順に L1, L2 という。
L1 正則化法	影響を与える因子の数を抑えることができる機械学習法
Langevin 方程式	ブラウン運動を記述する確率微分方程式
Leaky Integrate-and-Fire neuron モデル	積分発火モデルの中でリーク電流をつけたモデル
Lennard-Jones 型ポテンシャル	原子間の相互作用を記述する最も簡単なポテンシャルで、斥力の項と引力の項の 2 つによって記述される。
LHC	大型ハドロン衝突型加速器 (Large Hadron Collider)。欧州原子核研究機構 (CERN) で稼働中の加速器の名称。ヒッグス粒子の発見と超対称性粒子などの新しい物理の探索を目指している。
logP	化合物の脂溶性を表す量
LPB	LSI Package Board の略。
M	
MIPS ピーク性能	MIPS (ミプス) 値、あるいは MIPS ピーク性能は、100 万命令毎秒 (million instructions per second) の略で、コンピュータの性能指標の 1 つ。
MPI	並列計算のためのプロセス間通信ライブラリの業界標準
N	
NMR 分光	原子核の磁気を測定する手法。分子構造に関するデータが得られる。
NP 完全問題	クラス NP に属する問題でかつ、クラス NP すべての問題から多項式時間帰着可能な問題。このクラスに属する問題は多項式時間で解を見つけるアルゴリズムが存在しないと予想されている。(P≠NP 予想)
O	
on the fly	「実行中に」を意味し、プログラム中で繰り返し必要となるデータを、その度ごとに計算して用いるアルゴリズムを指す。これと対極にあるのは「あらかじめ計算して保存しておいたデータを、必要になる度に記憶装置から参照して用いる」やり方である。

(次ページに続く)

用語	解説
ONIOM 法	ONIOM 法は諸熊啓治教授（現京都大学）により考案された QM/MM 計算の代表的な方法。生体高分子などの巨大分子をいくつかのレイヤーに分け、レイヤーごとに量子化学計算や分子力学計算を行うことで、巨大分子の電子状態や分子構造の評価や反応機構の解析を行うことが可能。
P	
PDB 構造	Protein Data Bank(PDB) に登録されている NMR 解析や X 線構造解析などの実験的手法によって得られた蛋白質の構造。
pKa	化合物の酸性度を表す量
Q	
QueryDriven	データに対するクエリー（質問）を行いながら、対話的にデータを調べていく手法。
R	
RI（放射性同位元素） ビームファクトリー	安定な原子核に含まれる中性子の数よりも、中性子の数がかげ離れた原子核をエキゾチック原子核という。このようなエキゾチック原子核は不安定なため天然には存在しない。しかし超新星爆発などの高エネルギー現象による重元素合成では、エキゾチック原子核が中性子過剰核として重元素合成の反応経路にあらわれ重要な役割を果たす。このようなエキゾチック原子核の性質を解明することは原子核理論のチャレンジであるが、実験的にも生成が難しい。このようなエキゾチック原子核の性質を調べることのできる実験設備が理研の所有する RI ビームファクトリーである。エキゾチック原子核の生成率は低いいため大強度のビームが必要である。理研 RI ビームファクトリーは 2006 年から稼働しており、世界最強のビーム強度を誇り、これまでさまざまな新しいエキゾチック原子核を発見している。米国および独国においてもそれぞれ 2018 年と 2016 年の稼働を目指してより大強度の RI ビームファクトリーの計画がある。
r 過程	宇宙における重元素生成過程は主に、星の内部で安定線上を時間をかけて進む中性子捕獲反応 (s 過程) と、わずか数秒間の爆発的な過程で安定線から離れた原子核を作る r 過程に分けられる。図 4.5.3.1 も参照。
S	
SPICE モデル	SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis) はカリフォルニア大学バークレー校で開発された回路シミュレータであり、SPICE モデルとはこの回路シミュレータで使用される、受動素子（抵抗、インダクタ、コンデンサ等）と能動素子（トランジスタ等）の等価回路モデルのこと。

(次ページに続く)

用語	解説
STM	走査型トンネル顕微鏡。短針と固体側とのトンネル電流の観測により、表面構造や電子状態を知ることが可能。原理は異なるが、原子間力顕微鏡（AFM）なども表面解析に用いられる。
Structure-based drug design (SBDD)	タンパク質などの立体構造をもとにして薬剤のデザインをする方法
SU(3) 群	ゲージ群の一つ。QCD は SU(3) ゲージ群のゲージ理論である。
SuperKEKB/BelleII 実験計画	B 中間子の寿命や B 中間子がどのような粒子にどのような割合で崩壊するかを精密に測定する実験。高エネルギー加速器研究機構で行われている。2021 年頃に高精度データが取得できるよう計画されている。B 中間子に含まれるボトムクォークは、トップクォークに次ぐ質量を持つ重いクォークであり、ボトムクォークの性質を詳細に調べることで、素粒子標準理論に内在する階層性の起源や素粒子標準理論にない新しい物理を明らかにできる。
T	
tagSNP	ゲノムの特定の領域においてその領域中の他の SNP（一塩基多型）の代表となりうる SNP
Thin node	少数の演算器、メモリによって構成される計算ノード。
U	
uds ハドロン	6 種類のクォークのうち、軽い u,d,s の 3 種類のクォークから構成されるハドロン。
union-find アルゴリズム	グラフ構造の中から、連結クラスター（互いに辺でつながっている頂点の集合）を見つけ出す際に用いられるアルゴリズム。
V	
VOF 関数	Volume Of Fluid の略。空間を計算要素に分割した際、その計算要素に占める流体の体積比率を用いる手法を VOF 法と呼ぶ。このとき使用する全計算要素の VOF 値の事を VOF 関数と呼ぶ。
X	
XFEL	X 線自由電子レーザー (XFEL) は、波の位相がきれいにそろったレーザーの性質を持つ超高輝度の X 線を発生させることのできる光源
あ	
アーティフィシャルニューラルネットワークモデル	複数の同種神経の平均としての活動量関数とシナプス伝達関数を定義してネットワークを形成させるモデル。広義の McCulloch-Pitts Model
足場タンパク質複合体	細胞内情報伝達系において、複数の情報伝達タンパク質と結合して複合体を形成する足場となるタンパク質の複合体

(次ページに続く)

用語	解説
アパタイト	リン酸カルシウム（磷灰石）のことだが、生体では水酸基が入ったヒドロキシアパタイトとして歯や骨の主要構成要素となっている。
アルダー転移	剛体球の密度を上げると、ある密度を境に液体から固体（結晶）に相転移すること。
アンサンブルシミュレーション	沢山のシミュレーションを行い、その統計的性質を研究する計算手法
アンジュレータ	加速された電子の直線軌道に沿って、多数の N、S の磁極からなる磁石列を上下に配置して、その間を通り抜ける電子を周期的に小さく蛇行させて、明るく特定の波長を持った光を作り出す装置。
い	
位相空間	燃料プラズマ粒子の 3 次元位置と 3 次元速度を座標とする 6 次元空間。粒子間の衝突効果が十分に大きければ、局所的な熱力学的平衡を仮定して 3 次元流体モデルでプラズマを記述できるが、衝突効果が小さい高温プラズマに対しては 6 次元位相空間の粒子分布を記述する運動論モデルが必要になる。ただし、磁場閉じ込め核融合プラズマのような強磁場中の運動論モデルは 5 次元位相空間に簡約化できる。
位相空間密度	位相空間における密度。位相空間とは位置と速度（または運動量）を座標とした空間のことである。例えば、我々の世界ではそれぞれ 3 次元で合せて 6 次元の空間。
位相骨格	データを変化点の接続情報（スケルトン・骨格）により表し、大規模なデータを非常に小さなデータサイズで特徴付けることができる。
1 磁場散逸時間	磁場を作っている電流が電気抵抗により熱に変わる事（ジュール散逸）によって、磁場が指数関数的に減少する典型的時間。
一般相対性理論	アインシュタインによって提案された重力の理論。物質のエネルギーが時空の幾何学を決定する理論。時空の幾何学を重力とみなす。星の重力を決定するだけでなく、宇宙全体の幾何学をも決定でき、宇宙物理学における基礎となる理論。量子力学が重要となるミクロの世界での重力の振る舞いについては記述できない。
遺伝子プロモータ	特定の遺伝子の発現を促すタンパクなどの細胞内物質
イベント駆動型	現象や手順を有限の数の瞬間的に起きる事象（イベント）の連続として扱うやり方
陰解法	時間積分の一つ。時間微分の離散化において後退差分（現在と過去の値を使って離散化する）を用いて離散化を行う手法。元の偏微分方程式は未知変数の連立一次方程式にと離散化され、この連立一次方程式を解くことになる。

(次ページに続く)

用語	解説
インフレーション	宇宙誕生直後における宇宙の指数関数的膨張のこと。
う	
ウィーク・スケール	並列単位当たりの問題サイズを一定にして、並列数を増やしていく場合（つまり、問題サイズが並列数に比例して大きくなる）での、計算時間の変化
え	
エキゾチックハドロン	中間子（メソン）はクォークと反クォークから構成され、重粒子（バリオン）は3個のクォークから構成されると考える単純なクォークモデルからは予測できない異種のハドロン。
液体論	液体は気体に比べて原子、または分子間の相互作用が強く、また固体とは違いこれらの粒子が動き回るためその取扱いは容易ではない。液体そのものから溶媒としての性質等についても議論がされており、数値シミュレーションによる研究も盛んである。
エネルギースケールの階層性	素粒子標準理論のパラメータには以下のような階層性がある。(1) 弱い力の媒介粒子の質量が重い。(陽子の約80倍と約90倍) クォークやレプトンの質量はバラバラであるが、(2) トップクォークは特に重い。(陽子の約170倍) (3) ニュートリノの質量が直接測定不可能なぐらい軽い。質量はエネルギーと等価であるので、エネルギースケールの階層性という。このような階層性の起源を明らかにすることは現在の素粒子物理学の課題である。
エネルギー分散外挿法	通常、変分計算によって得られたエネルギー期待値は、真のエネルギー期待値の上限しか与えることができない。変分空間を徐々に広げて、エネルギー期待値をエネルギー分散期待値の関数として外挿することによって、精度よく真のエネルギー期待値を見積もる方法。
エピジェネティクス	DNA塩基配列の変化を伴わないが、細胞分裂後も継承される遺伝子発現あるいは細胞表現型を研究する学問領域。
円偏光	光を始めとした電磁波は、進行方向と垂直に電場と磁場が振動する横波である。円偏光では、進行方向と直交する平面上で電場もしくは磁場の向きが円運動を描く。進行方向を手前にとって時計回り、反時計回りのものが存在する。
お	
オーダリング	主に、メモリ空間でのデータの連続性を改善するために、数値データの格納順序を入れ替え、計算機による処理性能の向上を図ることを指す。
か	
カーテシアン座標系	直交座標系の事。空間の位置を示すのに互いに直交する座標系を用いる。

(次ページに続く)

用語	解説
カーネル最適化技術	プログラムにおいて主要なコストを占める逐次演算処理をカーネルと呼ぶ。プロセッサのアーキテクチャに依存して逐次演算処理の最適化方法は異なるため、特に、メニーコアプロセッサを効率的に利用するには新たな最適化技術の開発が必要となる。
カーパリネロ法	電子状態計算により原子にかかる力を直接見積もりながら、分子動力学計算を行う手法の1つ。電子状態に時間発展方程式を導入し、計算の高速化を実現している。
階層的時ステップ	要素により計算時ステップ幅に幅がある場合に例えば2の整数乗などのあらかじめ決めた規則に沿って時ステップ幅を決定する事で同期を容易にするやり方
カイラル凝縮	クォーク・反クォーク対が凝縮し、真空期待値を持つこと。
カイラルなゲージ対称性	フェルミオンの右巻き成分と左巻き成分が異なるゲージ対称性を持つ場合の対称性のこと
カイラル有効場理論	低エネルギー領域における物理現象を記述するために必要な自由度だけを取り入れた近似的な理論。
カイラル対称性	質量ゼロのフェルミオンが持つ対称性の一つ。光速で運動するフェルミオンはそのスピンの運動量に対して平行な場合（右巻き）と反平行な場合（左巻き）の2つの独立な自由度に分かれる。理論が、右巻き粒子だけで（または左巻き粒子だけで）、粒子の入れ替え操作に対し不変である場合にカイラル対称性があるという。標準理論は質量ゼロのフェルミオンによって構成されている。
核子	原子核を構成する陽子と中性子の総称。大きさはおよそ 10^{-15}m 。核子は3個のクォークが強い力で結合した粒子である。
核図表、安定線、エキゾチック核	原子核は陽子と中性子から構成されている。陽子数・中性子数をそれぞれ縦軸・横軸にとってこれを平面的に図示したものが核図表 (nuclear chart)。この核図表上で、自然界に存在する安定な原子核は1次元の線のようになるため、安定線と呼ぶ。この安定線から離れた原子核は有限の寿命で崩壊するが、陽子数と中性子数が大きくことなる原子核も存在し、ここではこれらをエキゾチック核と呼んでいる。
核変換テクノロジー	原子炉の廃棄物処理の一つとして、長い寿命をもつ放射性同位元素や特に毒性の強く危険なものを、核反応を利用して短い寿命のものに変換させ消滅させるために必要な技術、方法、基礎知識等。

(次ページに続く)

用語	解説
核力	核子やバリオンの間に働く力。陽子と中性子を結び付けて原子核を形作る。湯川秀樹博士は核力をパイ中間子の交換による作用であると提唱し、実際にパイ中間子が発見された。核力は基礎的な力でなく強い力による副次的な力であり、複雑な様相を呈する。たとえば、3つの核子の間に働く核力（3体力）は2つの核子間に働く核力（2体力）の単純な重ね合わせではないことが挙げられる。核力の性質の理解には、強い力の深い理解が必要である。
過減衰極限	Langevin 方程式において慣性力を無視できるとした場合の特殊ケース
火成活動	マグマの発生や移動に伴って生じる諸現象の総称。
可塑的触媒場	タンパク質の構造変化などにより変化可能な触媒を行う環境
カットオフ半径	短距離の成分のみを取り扱う場合に、どの程度の長さまで扱うかという距離。この距離より離れた成分は0と考える。
カラーガラス凝縮	高エネルギーのハドロンで、量子色力学で「色」をもつグルーオンが大量に生成されて高密度に凝縮した状態。
軽い原子核、重い原子核	陽子数と中性子数の和を質量数と呼び、原子核の質量はほぼ質量数に比例する。「軽い」「重い」とは、この質量数の大きさを指している。明確な線引きはできないが、質量数が10程度以下のものは軽い原子核、100に近くなると重い原子核と呼ばれる。
カルシウムイメージング	カルシウム感受性蛍光色素を標的細胞に導入して、蛍光観察を行う方法。一般にカルシウムの配位結合によるセンサー分子のコンフォメーション変化は大きく蛍光変化も大きい。そのせいか蛍光プローブを使った神経活動観察法としてはカルシウムイメージングは主流でありつづけている。脳組織内の多点同時観察を見据えると蛍光プローブの導入法が重要で特定神経組織へのローカルインジェクションや特定の遺伝子プロモータを標的としたカルシウムセンサータンパク質の遺伝子導入が2000年代になって多く行われている。
き	
季節内振動現象	中緯度帯にみられる高低気圧等の総観規模現象に比べて長く、季節変化より短い時間スケール（およそ10日～90日周期）の現象を総称して季節内振動現象と呼ぶ。有名な季節内振動現象として、地球規模の活発な積雲活動域が熱帯を東進していく Madden-Julian 振動や、アジアにおけるモンスーン活動が知られており、中長期予報を行う際の重要な現象と考えられている。

(次ページに続く)

用語	解説
基底重なり	電子雲を表現するために用いられる局在基底もしくは平面波基底間の空間的なオーバーラップ（重なり）のこと。異なった平面波基底間の重なりは全空間で積分をするとゼロとなるが、局在基底間では重なり積分はゼロでない場合がある。
基底関数極限	無限に多くの基底関数を用い、基底関数展開による誤差がなくなる極限。デジタルカメラの画素数が上がり、アナログ写真との差がなくなった極限のような概念。
逆引き用分割テーブル	配列の添字から対応する電子・スピンの状態を求めるためのテーブル。部分系に分割したテーブルを組み合わせて用いることで、そのサイズを大幅に小さくすることが可能となる。
ギャザー・スキヤッタ機構	配列に対する間接インデックス参照を効率的に行うためのハードウェア組み込み機構。
キャビテーション	液体の流れの中で局所的に圧力が変化することにより短時間に泡の発生と消滅が起きる物理現象であり空洞現象とも言われる。キャビテーションの発生は、発生する気泡により、ポンプなどの流体機器における振動・騒音の発生や性能低下の原因となる。また同時に発生する圧力波がこれらの機器表面のエロージョン（壊食）を起こして、効率を下げたり破壊することがある。
球面調和関数展開	球面調和関数は完全性をもち、球面上の任意の連続関数を一意に展開できる。このため、球面上のスカラー場の表現に用いられる。
境界埋込法	流体の運動と構造体の変形を同時（連成問題）にシミュレーションするときに用いる手法。流体をオイラー座標系で表現し、構造物をラグランジュ座標系で表現する。
虚時間軸	ある温度における統計力学的な平衡状態をあらわす式が、見た目上、通常の量子力学的な時間発展の式の「時間」のところに純虚数の値を入れた形になっており、「虚時間」と呼ばれます。単に見た目の問題というだけではなく、実時間 \Leftrightarrow 虚時間の対応を考えることにより理論的にも見通しが良くなることが多い。
強震動	明確な定義を持つ言葉ではないが、一般に、建築・土木構造物の被害に直接関与するような地表面での強い地震動のことをいう。
共発現解析	ある遺伝子の発現と相関の高い遺伝子を同定し特定の生物学的現象に互いに関係のある遺伝子群の機能などを解析する方法
共役勾配法	連立一次方程式を解くため、または制限付きの2次形式の極値を求めるための反復的アルゴリズムの一つ。
共溶媒濃度	溶液中の溶質および主なる溶媒のほかに含まれる第二の溶媒成分の濃度

(次ページに続く)

用語	解説
行列模型	弦理論の非摂動的定式化の一つ。
局在基底	量子力学的には電子は点ではなく雲のように広がっている。この広がりを表し電子の雲の状態を記述するために用いられる関数のこと。電子は周囲の環境により、電子雲の広がりがたの度合いはことなるが、特にその広がりが強くない場合に用いられる関数のことを局在基底と呼ぶ。分子・原子では、電子の広がりは限定的であるために、原子・分子中の電子雲の状態を記述するために局在基底はしばしば用いられる。
局在軌道	特定の原子あるいは結合領域に、空間的に局在した分子軌道のこと。分子の量子化学計算で得られる分子軌道は、通常、分子全体に広がった（非局在化）形状をしているが、これらの非局在分子軌道に特定のユニタリー変換を施すことによって、局在軌道に変換することが出来る。空間的に離れた局在軌道どうしの積は無視できるほど小さくなることを利用して、計算コストの軽減をはかることができるほか、計算結果の物理化学的な解釈を手助けする目的にも用いられる。
局所準粒子乱雑位相近似	量子多体系において、非平衡状態の規準モード（近似的に独立な運動）を決定する方法。
巨大応答	外部からの磁場や電場や光照射などの刺激によって物質中の集団秩序を変化させ、抵抗値などを劇的に変化させること。
均質化法	マルチスケール解析手法の一つ。材料の詳細マイクロ構造をマクロ解析に反映させるために、マイクロとマクロの連成解析を行う。
金属原子拡散	燃料極における多孔質構造を変化させる金属原子の移動、三相界面長さの減少を通じて反応性を低下させる。
金属誘起ギャップ状態	半導体と金属の界面において金属の電子状態が半導体にしみ出すことで半導体ギャップ中に生成される新たな電子状態・準位。
く	
クォーク	アップ、ダウン、チャーム、ストレンジ、トップ、ボトム、と名付けられた質量の異なる 6 種類のフェルミオンの族名。電磁気力、弱い力、強い力を受ける。アップクォークとダウンクォークは強い力により束縛しあい、陽子や中性子、中間子などの粒子を形成する。クォークの名前の違いは質量によって決まっており、質量の軽い順にクォークを並べると、アップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップとなる。
クォーク・グルーオン・プラズマ	通常、クォークはハドロンの中に閉じ込められているが、高エネルギー状態では自由に動き回れるようになる。クォークとグルーオンが電離したプラズマ状態。

(次ページに続く)

用語	解説
クォーク・グルーオンプラズマ相	クォークはハドロンの中に閉じ込められておらず、自由に動き回れる状態。
クォーク作用	クォークに対する作用。作用から運動方程式などが得られる。
クラスターモデル	非周期条件の下で、固体側を有限の原子数のクラスターとして表現するモデル化。適宜水素終端化処理した上で、分子の吸着などを計算する。
クラスレート	結晶構造中に異分子が共有結合をすることなく内包されたもの。包摂化合物。メタン分子が氷状結晶中に内包されたメタンハイドレートなどが知られる。
クラスレートハイドレート	複数の水分子で作るかご型の構造中に気体分子が取り込まれた結晶。気体分子と水の混合物を加圧することにより生成する水和物
グラフェン	六角形二次元平面に周期的に配置された格子構造を持つ炭素結晶。
グラムシュミット直交化	直交化とは、いくつかの「線形独立だが互いに非直交なベクトル（または関数）の組」を、「互いに直交するベクトル（または関数）の組」に変換する操作を指す。直交化を施すことで、数学的表現が簡素になって取扱い易くなる。グラムシュミット直交化は、いくつか存在する直交化法の中でも概念的に最もシンプルなもの。
クリープ構成則	主として金属材料が高温状態にさらされた際に呈する非線形挙動を応力とひずみの関係として記述したもの。各種金属に固有の温度を超えると、荷重が一定でもひずみが時々刻々変化する、いわゆるクリープ変形が顕著になる。その挙動を応力-ひずみ関係として記述したもの。
クリロフ部分空間解法	連立一次方程式の解を求める際に使用される行列解法の一つ。行列積を直接計算する代わりにベクトルを利用した解法の総称で、ロシアの数学者にちなんで名づけられた。現在最も主流の行列解法であり、具体例として Bi-CGSTAB 法、GMRES 法などがある。
グルーオン	強い力を媒介する粒子。
グルーボール、ハイブリッド粒子	グルーオンが複数個結合した複合粒子がグルーボール。これにクォークもからむとハイブリッド粒子と呼ばれる。
グローバルビュー	通常並列計算機は複数の計算機から構成される複合システムであり、個々の計算機間は別個のビュー、すなわち実行の状態（メモリ）をもつ。グローバルビューは特別なソフトウェアもしくはハードウェアにより並列計算機全体で単一のビューを共有する方式であり、これによって並列計算機のプログラミングが大幅に簡略化される。

(次ページに続く)

用語	解説
グローバルファイルシステム	並列計算機のすべての計算ノードから参照可能な共有ファイルシステム。一般に利用者の恒久的なファイル置き場として使われ、ローカルファイルシステムと比較して大容量かつ安定性を重視した構成となっている一方、読み書きの速度は限定的である。
け	
形態学	細胞の形状と組織の広がりなどを調べる方法
ゲージ群	力学系の作用が余分な自由度をもち、その自由度に対して変数変換しても作用が不変な場合がある。このような変換をゲージ変換といい、これは一般に群をなす。これをゲージ群という。ゲージ変換のもとで不変な理論をゲージ理論と呼ぶ。この場合余分な自由度は観測にかからない。
ゲート	Hodgkin-Huxley モデルの中で電流の開閉を司るスイッチの役割を果たす仮想概念
結合クラスター展開	無限次の摂動論に相当する電子相関理論。複雑なテンソル積和処理を伴う繰り返し計算が必要で、2 次 に比して精度は高まるが計算コストは高い。
原子核殻模型計算	原子核の構造を計算する手法の一つ。陽子と中性子の多体系である原子核を、適切な 1 粒子状態を基礎にして核力に忠実に、多体相関を含みつつ量子力学的に計算する。量子化学における配置換相互作用計算と類似した手法である。計算は大次元行列の固有値問題に帰着する。その解法としては行列の対角化に基づく従来型の方法と、重要な多体状態の基底を探す方法の 2 種類がある。
原子軌道基底	分子軌道を表現するための関数群。原子軌道を表す関数の線形結合で分子軌道を表現。
元素の起源	現在の宇宙の元素の組成は、ほぼ水素とヘリウムで構成されており、そのほかの元素の量は無視できるほどである。宇宙誕生後の物質進化の過程を追うことで、さまざまな元素の組成比を理解することが元素の起源を探ることである。
こ	
格子 QCD (格子量子色力学)	QCD はクォークとグルーオンの強い力の力学であるが、解析的に解くことはできていない。数値的に QCD を取り扱うことができるように、4 次元時空を格子に差分化した理論が格子 QCD である。100TFlops クラスの計算機が登場した 2008～2009 年に、クォークの複合粒子である陽子や中性子などの性質（質量やスピンなど）を計算で再現できるようになった。
格子気体法	流体問題を空間と流体の両方を離散化して解く計算手法

(次ページに続く)

用語	解説
構造緩和	最初に仮定した物質の構造（＝原子の配置）を原子に働く力が小さくなる方向に原子を動かすことでもっとも安定な構造に近づけること
構造多型	タンパク質などの巨大分子が複数の安定な構造を持つ性質
構造ゆらぎ	タンパク質分子が機能を発現させるためにその構造を変化させること
拘束付平均場	ある量が決まった値になるように条件を付けながら計算をする平均場理論。
高立体選択的合成反応	複数の立体異性体（配位子の付き方が立体的に異なる分子）の生成が考えられる化学反応において、触媒の利用などにより特定の立体異性体を選択的に多く作り出す反応のこと。
呼吸鎖	細胞の呼吸（ATP の生成）に関わるタンパク質群
骨格振動	2 重結合や芳香環などの分子構造に起因する特徴的な振動。赤外やラマンで分光測定することにより、対象分子系の分子構造を推定できる。
混雑物	分子混雑環境において溶存するタンパク質、DNA、RNA、糖をはじめとする様々な分子
コンダクタンス	電気伝導度。すなわち抵抗の逆数
さ	
再帰現象	相互作用する多数の粒子の運動において以前と同じ状態が準周期的に現れる現象
細胞環境	細胞内分子にとっての環境。分子が溶液中にあるときの環境と異なり、多くの分子で混み合っている。
材料強度発現機構	材料の破壊を発生・進行させるメカニズム。その破壊挙動は、主に材料内の力学場と材料固有の強度との相関により決定される。
サブボリューム	並列計算において、1 プロセッサが担当する部分領域。なお、シミュレーションセルを空間分割して個々の並列プロセッサに割り当てる手法を領域分割法と呼ぶ。
差分法	微分方程式を数値的に解く際に用いられる離散化手法のひとつ。ある関数が 2 つの変数値に対してとる値の差を差分といい、この差分を変数値の差で割って得られる商を差分商と言ひ、この差分商を用いてもとの微分の近似値とすることで偏微分方程式の離散化を実現する。
残基	タンパク質、核酸、多糖類などの重合体を構成している単量体
参照曲率	計算要素内で形状を表現する時に用いるパラメータの一つ。形状の曲率の事。
三相界面	燃料極と固体電解質、空気極の三相が接する境界面。その長さが燃料電池の反応性を左右する。

(次ページに続く)

用語	解説
散乱・束縛状態	2 粒子以上の系において、各々の粒子の運動が有限の範囲に限定されるものを束縛状態、無限遠方まで許されるものを散乱状態という。
し	
磁気回転不安定	差動回転 (天体の各部分で異なる角速度を持つ回転) する磁気流体に起こる不安定性。通常、天体では内側の物質ほど角速度が大きい。内側の物質は角速度が大きいため、外側の物質に先行する。しかし、磁場を通して内側の物質と外側の物質はお互いを引っ張りあう。すると内側の物質は一旦減速し、外側の物質は一旦加速する。内側の物質は減速すると、天体の重力に引っ張られてさらに内側に落下する。内側ほど角速度は大きいため、内側の物質は結局減速前よりも大きい角速度を持つことになる。外側の物質はこれとは逆に加速前よりも小さい角速度を持つことになる。すなわちこの不安定は、内側と外側の物質の角速度差がどんどん大きくなる不安定である。
自己相関時間	系を時間発展させてサンプリングする際、ある時刻でのサンプルと、それとは独立と考えられる次のサンプルを採取するまでに要する時間。
自己無撞着	セルフコンシステント (self-consistent)。
システムインパッケージ	英語で system in a package のことで、1 つの Package の中に複数の半導体チップを集積することにより、システムレベルの高度な機能を実現して、実装密度の向上とコストダウンを実現する技術。
システム生物学	生命現象をシステムとして理解することを目指す学問分野
次世代シーケンサー	DNA を 100 塩基程度と非常に短く断片化し、それを並列に処理することにより高速に読み取ることのできる装置。読み込んだ DNA は断片であるため部位の特定のため計算機を用いた参照配列との照合に多量の計算が必要である。
質量異常次元	エネルギースケールの変化に対する質量の振る舞いを記述し、相互作用による効果を表す。
シナプス遅延	シナプス前末端でカルシウム濃度が閾値を超えてからシナプス後膜でシナプス後電位が発生するまでの遅延
自発的対称性の破れ	系が本来持つ対称性の一部が自ずと破れて、より対称性の低い状態に系全体として落ち込むこと。この概念は相転移と密接に関連しており、たとえば水 (液体) から氷 (固体) への変化は水分子の併進対称性が失われることとして理解される。
シフト型通信	各プロセスが隣接する他プロセスに対して、一斉に一定方向のデータ送信をする通信形態をいう。
シミュレーションセル	シミュレーションの中で考慮する空間領域

(次ページに続く)

用語	解説
重イオン	陽子、ヘリウムなどの軽い原子核を除く、重い原子核のことを指す。電子をはぎ取った原子なのでイオンと呼ぶ。
重合脱重合化	同種の分子が結合してより大きな構造を取ったり結合を解くこと
重陽子	陽子と中性子の束縛状態。二重水素の原子核。
重力の量子化（量子重力）	素粒子標準理論の中の相互作用を記述する部分は、量子力学の原理に則り量子化され、ミクロな世界での物理を矛盾なく記述できている。一方で、重力理論であるアインシュタインの一般相対性理論を量子力学の原理に則り量子化しようとする、うまくいかない。一般相対性理論や何らかの重力の理論を量子力学と矛盾なく量子化すること。宇宙そのものの誕生時を理解するためには、量子力学が必要なミクロな世界での重力を理解する必要があるため、重力の量子化は理論物理学の長年の夢であるがまだ実現していない。超弦理論がその候補とされている。
主殻	調和振動子ポテンシャルによる一粒子軌道によって空間を展開した際に、縮退した一粒子軌道の集合を指す。
準粒子	相互作用している多体系を、近似的に自由に運動するある種の「粒子」の集まりとして記述することができる、この「粒子」を準粒子とよぶ。
状態空間モデル	時系列観測データのモデル化の方法の一つでデータを状態モデルと観測モデルに分離し記述する
状態方程式	物質の温度、圧力、エネルギー、密度、体積などの間に成り立つ関係式。
ショットガン法	ゲノム DNA を断片化し読み取りそれを計算機を用いてつなぎ合わせるにより染色体の連続した DNA を読み取る方法
真空偏極	真空における粒子・反粒子の対生成・対消滅過程。
神経成長因子	特定の細胞の神経細胞への分化を促進する因子となる分子
震源過程	地震は、発生源で断層が破壊されることによって生じる。この断層の破壊過程を、震源過程という。
信号情報処理のマルコフ過程	一個一個のイオンチャネルの挙動やレセプタトリガンドの結合はリガンド濃度や電圧などに対して確率的に挙動する
す	
水平乱流	流れが乱れた状態（流体の粘性力に対して流れの慣性力が大きい状態）を乱流と呼ぶ。二次元（水平）乱流とは、大気のように成層が強い場で、鉛直方向の運動が制限され、水平方向の運動が卓越する状態を指す。水平乱流場においては、物質は水平方向に拡散される。
数値求積法	非解析的、近似的に積分値を求める手法。ガウス求積などの積分区間を区切る手法や、乱数を用いるモンテカルロ積分などがある。方法によって求積点数と誤差の関係が異なる。

(次ページに続く)

用語	解説
スーパー B ファクトリー	電子と陽電子を高頻度で衝突させることによってボトムクォークを含むハドロンを大量に生成し、その崩壊を詳細に調べることを目的とした加速器。従来の B ファクトリーの数十倍のルミノシティを目指す。
スーパーセル	結晶中にとる事のできる周期セルのうち、基本セルよりも大きい物。基本セルよりも大きな空間スケールの構造揺らぎの表現に用いる。
スカイライン形式	疎行列に対するメモリ格納形式の一つで、バンド形式をより精緻化し、境界の輪郭線を行単位で正確になぞるようにしたもの。
スケール間相互作用	気象や気候現象に存在する複数の様々な時空間スケール (例えば、全球スケールや温帯高低気圧のスケールなど) の現象が相互に影響を及ぼしあっていること。
スタグガード型	格子上で定義されたクォーク作用の一つ。
ステップスケーリング	エネルギースケールを s 倍 (典型的には $s=2$) ずつ不連続に変化させながら、結合定数などのエネルギー依存性を調べる数値計算手法。
ストークス力学	流れの状態を示すレイノルズ数が小さな場合に、流れを近似方程式で示す事が出来、これをストークス方程式と呼ぶ。近似方程式では非線形項である対流項を無視している。
ストレンジクォーク	標準模型に含まれる素粒子には 6 つの質量の異なるクォークがある。粒子質量の軽い順からアップ、ダウン、ストレンジ、チャーム、ボトム、トップと名前が付けられている。標準模型では質量以外の性質は同じである。ストレンジクォークは 3 番目に軽いクォークである。
ストレンジネス	ストレンジクォークが関与する量子数。正確には、ストレンジクォークの数とその反粒子の数の差。
ストロング・スケール	並列化の指標。計算量と cpu 数が両方増えて行く時の計算効率。
スパイク列	複数の活動電位が連続して出る様
スピン液体	量子力学的な揺らぎや幾何学的フラストレーションの効果により、磁気モーメント間の集団的な秩序化が絶対零度まで妨げられた状態。
スピントロニクス	エレクトロニクスが物質中の電子が持つ電荷自由度だけを利用していたのに対し、スピン自由度も工学的に応用する技術。
スペクトル法	物理現象を表す偏微分方程式の時間積分法の一つで、物理変数の時間変化を直接計算するのではなく、周波数空間に置き換えて計算する手法。一般に高精度な解が得られるため基礎的な物理計算によく用いられるが、複雑な問題には対応が難しいとされている。
せ	
正準化変換	Hartree-Fock 方程式を解く際に非直交基底関数の組を変換して規格直交系を作る手法のひとつ。

(次ページに続く)

用語	解説
静的縮約	連立一次方程式において、自由度の一部を削除することで、係数行列のサイズを縮小する方法。スタティック・コンデンセーション。
世界線表示	量子力学に従う系は空間次元に加えてもう一つ虚時間と呼ばれる軸を導入することで、計算機が扱いやすい複素数での計算が可能となる。その際、系の状態が虚時間方向でどのように発展するかをグラフ的に表現することを世界線表示と呼ぶ。
積分発火モデル	細胞外に抵抗と容量で接続された点として考え、シナプス後電流が複数の別の入力細胞からはいったとき、その時空間的統合としての細胞電位が閾値を超えたときに活動電位が起こり、結果過分極側に一定量電位がシフトすると考えるモデル。英語は Integrated-and-Fire model
零点振動	量子力学的に絶対零度でも不可避の量子の振動
0+ 状態	原子核の基底状態や励起状態は、角運動量 J とパリティ π で識別することができる。0+ 状態とは、 $J = 0$ でパリティが $\pi = +$ の状態。
線型応答理論	熱平衡状態にある系に、磁場や電場などの外場が加わった時、その外場による系の状態の変化（応答）を扱う理論。
そ	
相対論的流体	相対性理論の枠組で扱う必要がある流体。速度が光速近くに達する流体や、中性子星のよう強重力場中の流体などがこれに対応する。
相変態	ここでは、固体電解質材における結晶構造の変化。
阻害活性	化合物が標的タンパク質の機能を阻害する性質
素過程	複雑な自然現象は、様々な物理（電磁気学、熱力学、流体力学等）が絡み合って生じている。しかし、少くない現象においては、関わる物理をいくつかの構成要素に分割し、その要素間の相互作用として記述することが可能である。そのような構成要素のうち、特に基本的な物理で比較的単純に数学的に表現することができるものを素過程という。たとえば、流体力学で支配される移流（力学）過程、放射伝達方程式で支配される放射過程などがそのような素過程である。
粗視化分子動力学法	複数原子からなる集団を一粒子とみなしその群としての運動をシミュレートする手法。計算量の減少を通じて大規模で長時間の分子シミュレーションを可能とする。
粗視化モデル	原子のグループをまとめて、一つの相互作用点として表し、相互作用数を大幅に減らしたモデル。たとえば、タンパク質のアミノ酸を一つの相互作用点を近似する粗視化モデルなどがある。
塑性加工解析	金属部品の成型プロセスにおける材料加工処理のシミュレーション。この際に大変形弾塑性解析を行う必要がある。

(次ページに続く)

用語	解説
袖領域	差分法等のステンスル計算では隣接する要素、格子上のデータを参照する。このため、計算領域を分割して並列処理を行う際に、隣接ノードの境界データを保持する。この境界データを袖領域という。
ソフトウェアパイプラインニング機能	コンパイラの最適化機能の一つ。ループ内で繰り返される一連の CPU の処理命令を 1 サイクルに 1 つずつ実行するのではなく、複数の処理命令を並列実行することで処理速度を向上させる。
ソリッド要素	構造解析において、連続体をそのまま表現するための有限要素。形状としては、四面体あるいは六面体などの形を有する。これとは別に、梁やシェルなどを表現するための構造要素がある。
素粒子標準理論（または素粒子標準模型）	自然界の物質を構成する素粒子の運動と、素粒子間の相互作用を記述する法則をまとめた理論。素粒子としては、クォークと呼ばれる 6 種類のスピン 1/2 のフェルミオンと、レプトンと呼ばれる 6 種類のスピン 1/2 のフェルミオンが含まれる。相互作用は電磁気力、弱い力、強い力の 3 つの相互作用を媒介する 4 種類のスピン 1 を持つボソンが含まれている。電磁気力と弱い力を分化させ、素粒子に質量を与えるヒッグス粒子と呼ばれるスピン 0 のボソンを含む。量子力学と矛盾しないように作られている。実験との比較でしか決まらない 18 ($+\alpha$) 個の独立パラメータが含まれる。重力はここには含まれない。
素粒子標準理論に内在するエネルギースケールの階層性	素粒子標準理論のパラメータには以下のような階層性がある。(1) 弱い力の媒介粒子の質量が重い。(陽子の約 80 倍と約 90 倍) クォークやレプトンの質量はバラバラであるが、(2) トップクォークは特に重い。(陽子の約 170 倍) (3) ニュートリノの質量が直接測定不可能なぐらい軽い。質量はエネルギーと等価であるので、エネルギースケールの階層性という。このような階層性の起源を明らかにすることは現在の素粒子物理学の課題である。
た	
ダークマター	暗黒物質とも呼ばれる電磁気力と強い力が作用しない仮説上の物質。電磁相互作用しないので、地上実験や天文観測では直接検出できない。ダークマターはエネルギーを持ち重力に影響を及ぼすことから、ダークマターによる重力レンズ効果や、銀河の回転運動の検証などで間接的にその存在が推定されている。シミュレーションにより、宇宙の大規模構造の生成にも重要な役割をしていることが分かっている。近年の WMAP (Wilkinson Microwave Anisotropy Probe) 衛星による観測から、ダークマターは宇宙全体のエネルギーの内、約 20 % を占めていると考えられている。素粒子標準理論にはダークマターに該当する粒子はない。

(次ページに続く)

用語	解説
第 0 近似的	実際の現象を細部まで捉えられてはいないが本質は捉えられている様子をいう。
大域構造	原子同士が直接触れ合うような短い距離でみられる構造ではなく、多数の原子の集団同士の関係が作り出す長い距離で特徴づけられる物質の構造のこと。
第一原理計算	電子シュレディンガー方程式を（半）経験的パラメータによる積分の近似を用いないで数値的に解く計算手法。化学では、非経験的計算とも呼ばれる。
第一原理ダウンフォールディング法	第一原理計算を用いて対象とする物質の個性を残しつつ注目するエネルギースケールに応じた有効模型を構築すること。得られた模型をより精緻な計算手法で解析することで非経験的かつ高精度な物性値の計算が可能となる。
大規模連立線形方程式	ここでは変数の数が数千万から数十億程度の連立線形方程式を想定している。
対称正定値	行列が対称かつ、その固有値がすべて正值であること。この性質を有する行列はより効率的に扱うことができる。
大振幅集団運動	多数の核子が一斉にある秩序を持って運動することを集団運動とよぶが、特にその運動の振幅が大きく、物理学で良く使われる調和近似などが適用できない集団運動を大振幅集団運動とよぶ。
対超流動	2つのボーズ粒子のペアからなるボーズ粒子の示す超流動現象。
大統一理論	自然界の4つの基本的な力である電磁力・弱い力・強い力・重力のうち、電磁力と弱い力の統合(電弱統一理論)に加えて強い力をも統合する理論。
ダイナミカル行列	結晶内の原子の相互作用を記述した行列。
タイリング	計算機上で、大規模なデータを配列の添え字ごとに細かく区切り、小さな部分配列(＝タイル)の集合として扱うこと。行列のような2次元のデータ配列をタイリングすると、四角形のタイルを敷き詰めたようなイメージになることから。
タイルドディスプレイ	高解像度の表示領域を確保するため、複数のモニタを並べて配置したデバイス。通常、クラスシステムなどで動作する。
多参照理論	電子の波動関数を表すために、複数の電子配置の重ね合わせを用いる理論。分子の解離状態などでは、単一のSlater行列式では良い波動関数が表現できず、多参照理論が必要となる。
多次元効果	対称性(球対称や軸対称など)を仮定し次元を落としたシミュレーションでは現れない現象。例としては対流などがある。

(次ページに続く)

用語	解説
多重格子法	ポアソン方程式を格子で離散化して反復法で解くような場合には、基本的に格子サイズ程度の短い波長の誤差が効率良く減衰する一方で、長波長の誤差はなかなか減衰せず、これが反復回数増大の原因となる。多重格子法は、格子サイズの異なる複数の格子を用意し、各波長の誤差を一律に減衰させることで反復回数の増大をおさえる数値解法である。
脱閉じ込め臨界現象	相転移でありながら、ランダウが提唱し相転移の標準的な起源として知られる「自発的対称性の破れ」の範疇に入らず、実在すれば教科書を書き換える発見になるとして注目されている、新しいタイプの臨界現象。
弾塑性構成則	主として金属材料の挙動を、応力とひずみの関係から記述する際の関係式を指す。金属材料は変形初期の段階では応力とひずみに線形関係がある、いわゆる線形弾性体であり、ある限界を超えると非線形な塑性挙動を呈するようになる。その限界値と、非線形挙動を応力-ひずみ関係として記述したものである。
タンパク質の折れたたみ	タンパク質がある一定の立体構造をとる過程
ち	
チェックポイントファイル	計算の途中の状態を保存するファイル。万一計算が計算機の故障で中断した場合、このファイルから計算を継続実行できる。
地磁気異常の縞模様	海洋底の地磁気を調べて標準より強く帯磁している所を黒く塗ると海嶺と平行な縞模様が海嶺から両側に全く対称的に現れる。この縞模様は、海洋底が海嶺から湧き出して冷却する時に記憶する地球磁場が、その当時の地球磁場を反映して反転を繰り返しているためと説明される。
チャネルロドプシン	緑藻植物のクラミドモナスなどがもつ色素たんぱく質で、光が当たるとイオンを透過する。
中間子	パイ中間子やオメガ中間子などがある。1つのクォークと1つの反クォークが強い力で結合してできた粒子の総称。中間子にはいろいろな種類があるが、それらは2個のクォークの組合せによる違いや内部の状態の違いで理解されている。
中間子、パイ中間子、K中間子	ハドロンのうち、クォーク2個(クォーク・反クォーク対)からなるものが中間子(meson)。核力を媒介する粒子として湯川によって预言されたものがパイ中間子。sクォークを含む中間子の1つがK中間子。
中性子過剰核	陽子数に比べて過剰に多い中性子を含む原子核。不安定であり、安定な原子核になるまで中性子から陽子への β 崩壊を繰り返す。

(次ページに続く)

用語	解説
超新星爆発	大質量恒星の進化（一生）の最後に起こる爆発的現象。太陽質量の 10 倍より重い質量の恒星は、熱核融合反応により恒星の中心部に鉄の芯が形成される。鉄は熱核融合を起こさないため重力による収縮が起こり、鉄コアの温度が上昇していく。ある温度で鉄原子核はヘリウムや核子に分解する吸熱反応を起こし、恒星外層部の物質が中心に向かって急速に落下（重力崩壊）し中性子の芯が形成される。外層部からさらに物質が中性子の芯へ落下してきて中性子の芯に跳ね返され衝撃波が生じる。この衝撃波が恒星外層部を吹き飛ばし、超新星爆発を引き起こすと考えられていた。しかし、これまでの計算機シミュレーションでは、この機構によって爆発をうまく再現できていない。爆発機構の解明は重要な課題である。
超対称性	ボゾン（整数スピンを持つ粒子）であり、フェルミオン（半整数スピンを持つ粒子）である。それらを入れ替えるような操作を超対称性変換と呼び、その変換に対して理論が不変であるとき、その理論は超対称性を持つという。
超対称性粒子	超対称性理論では、標準理論に登場するすべての素粒子に対してペアとなる超対称性粒子を置く。標準理論のボーズ粒子に対してはフェルミ粒子、逆に標準理論のフェルミ粒子に対してはボーズ粒子が追加される。
超流動核	核子（陽子・中性子）がクーパー対を作ることによってボーズ凝縮し、低温の液体ヘリウムのように超流動性を示す原子核。低温の金属における超伝導と類似した現象。
超流動固体状態	固体秩序と超流動秩序が共存した状態
調和振動子	kx^2 のポテンシャルの中で運動する振り子、または量子。
つ	
通信マスク手法	非同期通信や通信用スレッドの実装によって演算処理の背後で通信処理を同時に実行する手法。
強い力	素粒子標準理論では、すべてのクォーク間に平等に働く力。電磁気力に比べ 100 倍強い。クォークの間でグルーオンと呼ばれるボソンが交換されることで力が作用しあうと考える。強い力では、3 種類のクォークを強固に一つにまとめる場合と、1 種類のクォークと 1 種類の反クォークを強固に一つにまとめる場合がある。陽子や中性子は 3 種類のクォークからなる複合粒子であり、パイ中間子はクォークと反クォークからなる複合粒子である。
て	

(次ページに続く)

用語	解説
低次元構造体	一次元もしくは二次元の周期的な結晶格子構造を持つ原子構造体。一次元の例としてはナノワイヤー、二次元の例としてはグラフェン等のナノシートが挙げられる。
低侵襲治療	手術などに伴う痛み、発熱、出血などをできるだけ少なくする医療
低レイテンシ	通信の際に、データ転送などを要求してから、実際に送られてくるまでの遅延時間のことをレイテンシ（遅延）と呼ぶが、その遅延時間が短いこと
データ転置	多次元データの並列処理において並列化軸を切替える際に発生するデータ転送処理。
テクニカラー理論	標準理論を超えたモデルの一つで、ヒッグス粒子を複合粒子として考える。このモデルが妥当であるためには QCD に似た性質を持ちつつも相互作用の強さの性質が QCD と違った特徴を持つ必要がある。
テクニ中間子	テクニカラー理論において予言される複合粒子の一種。
鉄よりも重い重元素の起源	恒星内部での熱核融合反応では、水素から始まる核融合反応は発熱反応であり、水素よりも安定な重い元素を合成する方向に進む。十分重い恒星では重力収縮と熱核融合反応の連鎖により、鉄原子核でできた恒星芯が形成される。しかし、鉄原子核まで合成が進むと鉄は最も安定な原子核であるので、発熱反応が終わり恒星芯での熱核融合反応は終了する。鉄よりも重い元素は恒星内部での熱核融合反応による元素合成では生成されず、中性子捕獲反応で生成されたと考えられる。超新星爆発は金やプラチナなどの、鉄よりも重い重元素の起源の一つと考えられている。
転位動力学法	結晶中の線状欠陥である転位の運動をシミュレートする手法。塑性を支配する、結晶すべり挙動の解析に用いられる。転位に働く力をモデル化することで、古典分子動力学法に比して大規模かつ長時間のシミュレーションが可能となる。
展開係数	ある関数を基底関数の線形結合で表した際の、それぞれの基底関数のもつ重み。
電荷移動型ポテンシャル	分子動力学法で用いる、電荷の局所的な移動を考慮した原子間ポテンシャル。原子における電荷の偏りを取り入れることで、電気陰性度の異なる異種原子間の結合を高精度に表現できる。
電気生理	細胞の電位を測定することによって生理的な性質を知ろうとする体系
点欠陥	結晶中の不純物または空孔。
電源グラウンドバウンズノイズ	LSI 内部の回路動作に伴う電流の時間変化に起因して発生する LSI 内の電源及びグラウンド配線部分の電圧ノイズ。

(次ページに続く)

用語	解説
電子捕獲	原子核が電子を捕獲することで、陽子中性子に変換させる反応。ニュートリノが放出される。
電磁気力	電気力や磁気力による相互作用の総称。素粒子標準理論では、電荷を持つ粒子の間で光子（フォトン）が交換されることで力が作用しあうと考える。
転写因子	DNA に特異的に結合し、DNA の遺伝情報の RNA への転写を促進、あるいは逆に抑制するタンパク質
テンソル縮約	二つのテンソル量を掛け合わせて、新しいテンソル量を得る操作。行列どうしの掛け算も、テンソル縮約の一つである。
テンソル力、3 体力	核子 (陽子・中性子) 間に働く相互作用 (核力) は、核子間の相対距離だけに依存する中心力とそれ以外の非中心力に分類できる。非中心力の代表がテンソル力 (tensor force)。2 核子のスピンの向きと配置の向きに依存する。これら 2 核子間の相互作用に加えて、原子核の定量的な記述には、3 核子に働く 3 体力が不可欠であることが知られている。
天体降着流・噴出流	天体に向かって落下する物質の流れと、天体から放出される物質の流れ。一般に中心天体に向かって円盤状に降着し、回転軸方向にビーム状に放出される。
転置転送	行列の転置操作に用いられるデータ転送パターン。
と	
同時スイッチングノイズ	LSI の複数の外部出力信号がハイレベルからローレベルまたはその逆方向にほぼ同一のタイミングで変化する時に LSI 内部の出力回路用の電源及びグラウンド配線に発生する電圧ノイズ。
トーラス状	ドーナツ型の幾何形状。磁場閉じ込め核融合炉ではプラズマを磁力線で覆い、かつ、端や磁場のゼロ点をもたないトーラス状の磁場を用いて高温の燃料プラズマを保持する。
トカマク装置	磁場閉じ込め核融合炉において最も有望な方式の一つ。トーラス状の磁場を発生するのに、トーラスに沿って並べたコイルとプラズマ中の電流を用いる。プラズマ中の電流を電磁誘導で駆動する場合にはパルス運転となるが、中性粒子ビーム等が誘起する電流を用いる定常運転も提案されている。トーラス断面形状が一樣となる特徴（軸対称性）があり、核融合反応で発生する高エネルギー α 粒子の閉じ込めに優れる。
トポロジー励起	複数の縮退した量子多体系の基底状態が局所的な情報だけでは互いに区別がつかず、巻きつき数などのトポロジカルな量によってのみ区別できる場合を、トポロジカルな状態という。また、このトポロジカルな量を変えるような非局所的な励起をトポロジー励起と呼ぶ。

(次ページに続く)

用語	解説
トラジェクトリスナップショット構造	分子動力学シミュレーションでの履歴（トラジェクトリ）中の 1 構造のこと
ドラッグデリバリーシステム	必要な薬物を必要な時間に必要な部位へと作用させるために、薬物の体内分布を制御し、患部に薬剤を届ける仕組み (Drug Delivery System: DDS)
トレーサ	一般的に大気や海洋の流れの影響を受けて、モデル内を移動する微量気体成分、溶存成分や個体のことを (パッシブ) トレーサーと呼ぶ。海洋生態系モデルにおいては栄養塩、植物・動物プランクトンや魚類がトレーサにあたる。
トンネル効果	量子がそのエネルギーより高いポテンシャルの山を越える、もしくはトンネルを抜けるようにくぐること。
に	
二次高調波	入射電磁波と相互作用する物質中において、非線形光学効果により発生する入射電磁波の 2 倍の周波数を持つ電磁波のこと。
2 次摂動論	HF 計算では考慮されない電子相関（平均場からのずれ）を摂動論に従って取り込む Post-HF 法の中で、2 電子励起だけを考慮する基本的なアプローチ。強相関系には適用できない。
2 電子クーロン反発積分	電子の振る舞いを調べるにはシュレディンガー方程式を解く必要があるが、その中で 2 個以上の電子を扱うためには電子間の反発を表すクーロン項を取り扱う必要がある。数値的計算では、2 つの電子間の反発を積分表現を用いて表す。このときに必要となる積分を 2 電子クーロン反発積分と呼ぶ。量子化学計算では、2 電子クーロン反発積分は数値計算の律速となるために、その取り扱いが重要となっている。
ニュートリノ	素粒子でレプトン族の一種。電子ニュートリノ、ミューニュートリノ、タウニュートリノの 3 種類が確認されている。電磁気力を受けない中性粒子で、弱い力と重力が作用する。このため検出は難しい。太陽中心付近での熱核融合反応で電子ニュートリノが発生し、地球には 1 平方センチ当たり毎秒 660 億個やってきているが、ほぼ地球をすり抜ける。近年、質量がゼロではないことが分かったが、ほぼゼロであり詳しい質量は不明である。超新星爆発では中心部に中性子の芯が形成される際に大量にニュートリノが発生し外部に放出される。1987 年に大マゼラン星雲で超新星爆発 (SN1987A) が起こり、超新星爆発由来のニュートリノが初めて地球上で観測された。日本の「カミオカンデ」ニュートリノ観測施設では詳細な観測が行われ、超新星爆発機構の理解に貢献した。

(次ページに続く)

用語	解説
ニューロインフォマティクス	神経データベースや情報理論のような情報学的手法を神経科学で手用させる学問領域
ぬ	
ヌクレオソーム	真核生物の核における DNA とタンパク質の複合体であるクロマチンの構成単位
ね	
熱揺らぎ	原子・分子程度の微小な粒子の熱運動に由来する運動エネルギー程度のエネルギー
の	
ノルム保存型擬ポテンシャル	結晶内の電子の波動関数を平面波で展開するために真のクーロン型ポテンシャルの代わりに用いられるのが擬ポテンシャル。そのうちカットオフ半径内の電価（ノルム）を変えないのがノルム保存型擬ポテンシャル。
ノンブロッキング通信	並列計算における通信方法の一つ。データの送受信を行う際に、送受信の完了を待たず、他の処理を開始する通信方法。
は	
ハートリー項	2 つ以上の電子が存在するときに、電子と電子との間にはクーロンの反発する力が働くが、それに関係するポテンシャル (位置エネルギー) もしくはエネルギーのことを指す。
ハートリーフォック (HF) 計算	電子間の反発を平均場近似の下で記述し、系の分子軌道を変分的に求める手法。
ハートリーポテンシャル	電子密度の空間分布で決まる静電ポテンシャル
バイアスポテンシャル	自然状態では滅多に起こらないが重要な化学反応を人工的に高い頻度でシミュレーション上発生させるために加える原子間ポテンシャルのこと。Metadynamics 法はバイアスポテンシャルを生成する。
バイオインフォマティクス	生物学的な問題をハイスループットデータなどとアルゴリズムを組み合わせる計算機を用いて解決する研究手法
バイオミネラライゼーション	生物が結晶や無機鉱物を産生すること。骨や歯、貝殻などが身近な例。
バイオミメティック	生物が持つ優れた機能を人工の物質で実現しようとする化学
バイセクションネットワークバンド幅	通信網の性能の指標の一つ。通信網の中の計算ノードを 2 等分し、その分割された部分同士の間で単位時間あたりに通信できるデータ量の事。
バイナップ	立体選択的合成反応において広く利用されている配位子。バイナップ-ルテニウム触媒を用いた不斉水素化反応を開発した野依良治は 2001 年のノーベル化学賞を受賞した。

(次ページに続く)

用語	解説
ハイパー核	ストレンジクォークを含むバリオンをハイペロンと呼ぶ。ハイパー核とはハイペロンを含む原子核の総称。
ハイブリッド汎関数	実験値をより良く再現するために、従来の汎関数に HF 交換相互作用の要素を取り込んだ汎関数
ハイペロン	ストレンジ (s) クォークを含むバリオンはハイペロンと総称され、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子などがある。
バタフライ演算	高速フーリエ変換などにあられる演算および通信パターン。
発火	スパイク様の活動電位が発生する様
ハドロン	強い力で結びついたクォークの複合粒子の総称。ハドロンはクォーク 3 個からなるバリオンとクォーク・反クォーク対からなるメソンに分類される。陽子や中性子はバリオンの一種である。
ハドロン、バリオン、ハイペロン、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子	強い力で結びついたクォークの複合粒子の総称がハドロン。ハドロンの中で、クォーク 3 個からなるものがバリオン。陽子・中性子もバリオンの一種で 2 種類のクォーク (u,d) から構成されている。ストレンジ (s) クォークを含むバリオンはハイペロンと総称され、ラムダ粒子、シグマ粒子、オメガ粒子などがある。
ハドロン共鳴	強い相互作用により様々なハドロンが形成されるが、その多くは短時間で崩壊するため、共鳴状態と呼ばれる。
ハドロン行列要素	相互作用を記述する演算子をハドロン状態で挟んだ行列要素。
ハドロン相	クォークはハドロン中に閉じ込められており、単独では取り出すことができない状態。
ハミルトニアン	系の（量子）力学を表現するもの。直接には系の時間発展を記述する。
ハミルトニアン行列	ハミルトニアン（系のエネルギーを表す量子力学的演算子）を行列表現したもの。
パラメータスキャン	入力パラメータを変更して多数のシミュレーションを実行し、設計パラメータ等に対する性能や機能の依存性を検証すること。
バリオン	クォーク 3 つから成る粒子の総称。陽子や中性子はバリオンである。一方クォーク 1 つと反クォーク 1 つから成る粒子はメソン（中間子）という。バリオンやメソンは強い相互作用をする粒子であり、バリオンとメソンを総称してハドロンという。
パリティ	空間の反転に対して系が対称性をもつときの量子数。
バルクナノメタル	一般の金属よりも小さな結晶粒からなる金属材料。強度、延性、韌性等の機械的性質の向上が見込まれる。
バルクひずみ	複数の材料が混ざった状態での計算要素内のトータルのひずみ量

(次ページに続く)

用語	解説
バレンス粒子、バレンス空間	原子核の中の核子のうち、その構造の決定に特に重要な影響を与えるものをバレンス核子 (粒子) と呼ぶ。近似的に、これらのバレンス粒子だけを取り扱った計算ができ、量子力学の計算ではバレンス粒子の運動を記述するヒルベルト空間を扱うため、これをバレンス空間と呼ぶ。
バンドギャップ	電子が占有出来ない禁止帯のこと。最高占有軌道準位と最低非占有軌道準位とのエネルギー差に対応する。
ひ	
光格子	対向するレーザー光を用いてその中を運動する粒子に対して周期的なポテンシャルを作り出す。その結果、粒子は結晶格子点に閉じ込められた粒子のように振舞い、そのような系のことを光格子と呼ぶ。
光生理学	化学的あるいは遺伝子光学的な光センサ-分子や光による刺激素子の発展を背景に蛍光顕微鏡のような光学的な方法で生体の活動をしる学問体系
非線形光学応答核磁気共鳴	核スピン間の非線形相互作用に伴い生じる高調波を利用する核磁気共鳴法
非線形振動子系	複数の非線形振動子が結合されたシステム。非線形振動子とは、運動が初期値に比例しない振動子 (ばねのように振動する要素) のこと。カオスや同期など、様々な興味深い現象を示すことが知られている。
光分解	原子核が光 (ガンマ線) を吸収して分解する反応。
非局所擬ポテンシャル	内殻電子などの及ぼす影響をポテンシャルに置き換えたもののうち、位置以外の要素 (角運動量など) に依存するもの。
歪速度テンソル	速度場の空間的な変化を表す速度勾配テンソルから、回転を表す反対称成分を除いた対称成分で、変形の色度を表す。
非静水圧	大気や海洋の支配方程式を考える際、水平方向に十分大きな現象 (気象では数十キロ以上) に着目する場合は、重力と鉛直方向の気圧傾度力が釣り合っていると近似 (静水圧近似または静水圧近似と呼ぶ) することができる。全球を対象とした多くの大気・海洋モデルでは、静水圧近似した方程式が用いられている。一方、より細かな現象に着目する場合などは、静水圧近似が成り立たず、鉛直方向の運動方程式を陽に考慮する必要がある。このような方程式を、非静水圧の方程式と呼ぶ。
非摂動ダイナミクス	摂動的手法では解析が難しく、その本質を理解するためには非摂動的手法を必要とする力学現象。
ヒッグス場	素粒子が質量を持つ仕組みを説明する理論であるヒッグス機構において導入されるスカラー場。
ヒッグス粒子	標準理論において電弱相互作用から弱い相互作用と電磁相互作用を分化させ、クォークやレプトンなどに質量を与える重要な役割を担っている。

(次ページに続く)

用語	解説
ビッグバン	現在広く受け入れられている学説によれば、宇宙は約 137 億年前に大きな爆発（ビッグバン）のように膨張して現在に至ったとされる。
ビッグバン原子核合成	ビッグバン宇宙誕生直後に起こった原子核の合成を指す。宇宙誕生直後、宇宙全体は超高温高密度であった。宇宙誕生後ごく初期には物質はクォークの状態であったが、宇宙が膨張し冷えるとともにクォーク同士が結合し陽子や中性子を構成するようになる（宇宙開闢後約 10^{-6} 秒）。その後、温度が下がると、いくつかの陽子と中性子は結びつき、一部がヘリウム原子核などを形成する元素合成が始まる（宇宙開闢後約 3 分から約 20 分の間）。さらに温度が冷えると元素合成は終了し、軽原子核は安定な原子核に崩壊し元素比率が固定される。この過程では無視できる量のリチウム 7 までの元素と水素 1 とヘリウム 4 が生成される。宇宙開闢後約 3 分から 20 分の間で生成された原子核を理論的に計算することができ、現在の宇宙の元素質量の割合が（水素 1 が約 75 %、ヘリウム 4 が約 25 %）であることを説明する。一方でビッグバン原子核合成ではわれわれになじみ深い炭素、鉄、金、銀などのリチウムより重い元素は全く生成できない。
非熱的分布	粒子の速度分布が熱的でない分布。熱的である分布とは、粒子同士が（衝突などの）相互作用を繰り返すことで達成される正規分布（マクスウェル分布）のことである。非熱的分布は相互作用がない（または少ない）状況で存在しうる。非熱的分布の下では、熱的分布では存在しえない高速な粒子が存在することがある。
微物理過程	大気中で雲を構成する水滴・氷晶（雲粒）が、発生してから、雨・雪などの降水現象として地表面に落下する、もしくは蒸発により消滅するまでの一連の成長・消滅過程をさす。雲粒同士が大気中で衝突して併合する過程、雲粒が凍結・融解する過程などがある。
標準脳座標系	個体差を補償するように作られた脳内の標準座標系
ヒルベルト空間、模型空間	量子力学では、系の状態は抽象的なヒルベルト空間の中のベクトルに対応している。この空間は無次元であるが、実際の数値計算ではこれを有限の大きさの次元、しかもなるべく小さい次元の空間にする必要がある。このようにして計算に適した形に抜き出された空間を模型空間と呼ぶ。
ふ	

(次ページに続く)

用語	解説
ファインマン振幅	量子力学に基づいて素粒子反応の確率を計算する場合、絶対値の2乗が反応確率となる不変散乱振幅というものを計算する。通常普遍散乱振幅を解析的に厳密に計算することは困難であるため、摂動理論を用いて近似的に計算していく。摂動論では次数ごとにファインマン図形に基づく計算を行なう。この様な摂動計算による不変散乱振幅をファインマン振幅という。これにより素粒子反応の散乱断面積（反応確率）を求めることができる。
フィラメントワインディング	主に炭素繊維強化複合材料製の高压容器を作製する際に用いられる製法。炭素繊維を数万本束ねた炭素繊維束を、ライナーと呼ばれる内容器に巻き付けて成型する方法。炭素繊維強化複合材料製高压容器は、燃料電池自動車用高压水素容器として使用され、高信頼性と軽量化の両立が求められている。
フーリエモード展開	時間微分を含む偏微分方程式を、正弦波の重ね合わせであるフーリエ級数に変換すること。複雑な波動を単純な波の重ね合わせとして表現することができる。
フェムトスケール	ハドロンや原子核の大きさ程度のミクロな世界。fm（フェムトメートル）は 10^{-15}m 。
フェムト秒	1,000 兆分の 1 秒が 1 フェムト秒。1 フェムト秒は、光の速さ（秒速約 30 万キロメートル）でも 0.3 ミクロンしか進むことができないほどの極短時間。
フェルミオン	フェルミ粒子。スピン角運動量が半整数倍である。フェルミオンには、クォーク、電子、ニュートリノ、陽子、中性子などがある。
フォノン分散関係	結晶の格子振動を量子化したのがフォノン。そのエネルギーと波数との関係が分散関係。
フォルトトレランス機構	1 ノードが故障したとしても補完により計算が止まらない仕組み
フォンビルブランド因子	血中にある凝固因子のひとつ
ブシネスク近似	流体を非圧縮性とし、圧力の変化に伴う密度変化は無視するが、温度変化に伴う密度変化は考慮する近似手法。
不純物偏析	結晶中の不純物が表面や欠陥など何らかの構造の周辺に集まること。
不定性	この文脈では、実験データの不足により、相互作用（力）の方程式（またはその元となるポテンシャル）を、実験データから良く決めることができないこと。

(次ページに続く)

用語	解説
部分空間対角化	占有電子軌道など注目している一体電子軌道を基底とした空間でハミルトニアンを表現しそれを対角化すること
フラグメント	フラグメント分子軌道法計算を行うために分子全体を部分系に分割した際の構成単位のこと。
フラグメント探索	化合物設計プロセスにおいて化合物の部品（フラグメント）を探し出すこと
プラットフォームシミュレータ	その中で独自のスクリプト言語を持つことにより多数の異なった現象が扱われるようになったシミュレータ
フレーバー	クォークとレプトンの種類を表す。たとえば、クォークにはアップ、ダウンなどの種類があり、レプトンには電子、ミュー粒子などがある。
ブロッキング	配列のデータ処理をする際にデータ転送速度が高速なキャッシュやメモリに保持可能なデータサイズを考慮して配列を区分することで、処理性能の向上を図る性能チューニング手法。
分割統治法	分割統治法は大規模な問題を効率的に解くアルゴリズムの一つで、そのままでは解決することが難しい大きな問題をいくつかの小さな問題に分割して個別に解決していくことで最終的に大きな問題を解決する方式。量子化学計算のための分割統治法は Waitao Yang 教授（現デューク大学）より考案された。
分子混雑環境	細胞内のように、タンパク質をはじめとする様々な分子が高密度で存在する込み合った環境。分子は溶媒中における孤立した環境下とは異なった性質を示す。
分子動力学シミュレーション	原子間力に基づき、運動方程式を数値的に解き、分子の運動をシミュレーションする計算方法
分子モーター	生体内で ATP などのエネルギーを機械的な動きに変換する分子
分子モデリング	分子の立体構造を、計算機中で構築すること
分数量子ホール効果	半導体のヘテロ接合面等において実現される 2 次元電子系に強い磁場をかけると、低温でホール抵抗の値が量子化される現象が起こる。この値は e を電子の素電荷、 h をプランク定数とすると $(p/q) \cdot (e^2/h)$ と表される。ここで、 p と q は整数であり、 q が 3 以上の奇数で p/q が整数とならない場合を分数量子ホール効果と呼ぶ。これは物質中において分数電荷を持つ新たな素励起が生じるために起こる現象であり、発見者の Tsui, Stormer, Laughlin は 1998 年にノーベル物理学賞を受賞した。
へ	

(次ページに続く)

用語	解説
閉殻・開殻配位	希ガスの原子が特別に安定化するように、陽子・中性子数がある決まった数(魔法数)になると原子核も安定化する。このような原子核の核子は閉殻配位に対応すると称される。逆に陽子・中性子の数が魔法数からずれたものを開殻配位と呼ぶ。
ベイジアンネットワーク	統計的因果モデルの一つで因子間の因果関係を点と有向枝からなるネットワークで表現したもの、バイオインフォマティクスでは遺伝子発現制御ネットワークの推定・モデル化で用いられる
ベイジアンフィルタ	ベイズ統計に基づくデータの学習・分類法
平面波基底	分子軌道を表現するための関数群。平面波を表す関数の線形結合で分子軌道を表現。
ヘテロな構成の CPU	機能の異なるコアを組み合わせた CPU
ヘム	鉄イオンを含む化合物。しばしば、タンパク質に含まれ機能の発現に重要な寄与をする。
変形核	形状が球形からずれて変形した原子核。
ほ	
ポイントベースレンダリング	点群を基本とした画像生成手法。並列処理に向いた方法で、画像の品質を点の数により調整できる。
ボーズ・アインシュタイン凝縮	多数のボース粒子が一つの量子状態を占めることで現れる物質の状態。
ボーズ系モット転移	ボーズ粒子が互いの間に働く斥力相互作用によって絶縁体化すること。
ホールセルプランプ	細胞にパッチ電極を接続して全体を電位固定できる状態にして測定する方法
ボクセルデータ	形に沿った線や面で形状を表現するのではなく、空間を直方体で分割しその直方体内部の分布情報で形状を表現する方法。二次元の映像を示すピクセル (Pixel) に対して三次元 (Volume) を表すボクセル (Voxel)
ポストスケーリング時代	大規模集積回路は、スケーリング (比例縮小) にもとづきトランジスタの微細化により高性能化と高集積化を同時に実現してきたが、今後は発熱や消費電力により困難となると予想されている。スケーリングの限界以降 (ポストスケーリング) では、全く新しい指導原理が必要とされる。
ボソン	ボース粒子。スピン角運動量が整数倍である。ボソンには、素粒子間の相互作用を媒介する粒子である、光子やグルーオンなどがある。
ボゾン系	構成粒子がボース粒子である量子系
ボリュームレンダリング	ボリュームデータに対する画像生成手法の一つ。データの内部構造や全体の様子を透過的なイメージで表現することができる。

(次ページに続く)

用語	解説
ポロイダル・トロイダル展開	任意のソレノイダル場は、トロイダルポテンシャルとポロイダルポテンシャルの二つのスカラー場で表現された二つの項の和として一意に分解できる。
ま	
マイクロカプセル	極小のカプセル内に薬剤等を内包した物
マイコプラズマ	真正細菌の一種でゲノムサイズが小さく、細胞サイズも小さい
マイナー・アクチナイド核	ウラン・トリウムに代表される重元素をアクチナイドと呼ぶが、自然界に存在する安定な(寿命が非常に長い)ものの他に、原子炉などでは寿命の短いアイソトープが作られており、これらをマイナー・アクチナイドと呼ぶ。
膜輸送体	生体膜を貫通し、膜を通して物質の輸送をするタンパク質の総称
魔法数	原子核は陽子と中性子から構成されているが、ある特定の数の陽子または中性子を含むとき原子核は特に安定となる。この数のことを魔法数と呼ぶ。古くからよく知られている魔法数として2(ヘリウム: 4He)、8(酸素: 16O)、20(カルシウム: 40Ca)などがある。
マルコフ連鎖	離散的な時系列を生成するための確率過程の一種で、ある時刻での状態は直前の時刻での状態のみに依存して決まり、それ以前の履歴と無関係である性質(マルコフ性)を持つ。
マルチグリッド型前処理	連立一次方程式の解法を使用する際、行列の収束性を向上するために導入される前処理法の一種。疎・密の計算格子に対して順に解を求め、反復計算において早く収束解が得られるようにした手法。構造型の格子を直接用いる方法、代数的に疎格子を表現する方法など、種々存在する。
マルチコンパートメント	神経線維を多数のシリンダ様のコンパートメントの連なりと考えるモデル
マルチスケール・マルチレゾリューション法	幅広い時空間にまたがる対象に対し、それぞれの階層・解像度での計算を連成させるシミュレーション法
マルチフェロイクス	強磁性と強誘電性など二つ以上の秩序状態が物質中に共存し、互いに関係を持つ状態。これにより磁場(電場)をかけることで誘電性(磁性)を制御すること等が可能となる。
み	
ミセル	疎水基と親水基を併せ持つ界面活性剤分子が、溶媒中において球状や棒状に自発的に会合した分子集合体
密度行列くりこみ群	強相関係の数値的計算手法のひとつ。特に1次元、または2次元的な電子構造を持つ低次元強相関係の研究に用いられる。

(次ページに続く)

用語	解説
密度汎関数 (DFT) 法	系の電子エネルギーが電子密度の汎関数で与えられるコーンシャム方程式に基づき固体系や凝集系の電子状態を計算する手法。汎関数のバリエーションは多数あるが、物理分野では BLYP がよく用いられる。
ミューオン異常磁気能率	ミューオンはレプトン族のうち 2 番目に重い粒子。質量以外の性質は電子と同じ。質量は電子の約 200 倍である。ミューオンはスピン 1/2 で自転しているため小さな磁石となっている。磁石の強さを磁気能率（磁気モーメント）という。磁気能率は量子力学に基づく計算と量子力学を使わない計算で違いが生じるため、その差を異常磁気能率と呼ぶ。ミューオンの磁気能率は高精度（相対誤差約 0.5×10^{-6} ）で計測されている。素粒子標準理論を用いた理論計算が可能である。2012 年現在、理論計算と実験値は相対的に約 21×10^{-6} ずれている。ずれの原因は、理論計算に含まれる精度不足である可能性と新しい物理の兆候である可能性がある。
ミュー粒子	レプトンの一種。電子と同じ性質を持つが質量が異なる。
め	
メソ降水系	水平スケールが 100km 程度（メソスケール）の積乱雲の集合体である。単純な集合体ではなく、上昇・下降流域といった構造を持つ「系」であるため、単一の積乱雲に比べて寿命が長い（6 時間以上）。大気の状態や地域特性によって形態を変え、停滞すると同じ場所に多量の降水をもたらす。
メタゲノム	特定の環境中の微生物群など単一種毎のゲノム解析が難しい場合に、その生物群内全体のゲノムの集合をひとつのゲノムとしてとらえる考え方
メタマテリアル	自然界では見られない性質を示す人工的に作られた物質一般を指す言葉であるが、特に負の屈折率を持つ物質を指すことが多い。光の波長よりも小さな物質で特殊な高次構造を作ることによって実現できる。その極めて特殊な光学的性質を利用した応用科学的研究も盛んに行われている。
メッシュ/トーラス	計算ノード間の通信ネットワークの形態の一つ。多次元の格子状のもの。格子の端を周期的に結合した物はトーラスと言う。
メモリバランス型	エクサスケールシステム構成例の一つ。 演算性能 100PFLOPS/ メモリ帯域 100PB/s メモリ量 100PB がめどの構成
も	

(次ページに続く)

用語	解説
モデル脊椎動物	線虫（神経数 300）・ショウジョウバエ・カイコ等の昆虫（神経数 10 万）は遺伝子が同定され、ある程度生理実験も可能な無脊椎系のモデル生物であるが、同様な意味で、脊椎動物においては・ゼブラフィッシュ（神経数 100 万）・マウス（神経数 1 億）などが世代が短く遺伝子が同定されており、かつ生理実験も可能な比較的単純なシステムを持つモデル脊椎生物といえる。
ゆ	
ユークリッド時空	ユークリッド幾何学が成り立つ 4 次元時空。時間方向と空間方向の区別はない。
有限温度	非ゼロの温度を持つ物理系。
有限格子間隔効果	格子間隔が有限であることから生じる系統誤差
有限フェルミ多体系	核子（陽子と中性子）はフェルミ粒子であり、地球上に存在する原子核は最大でも数百個の核子から成っている。無限に近い粒子数の多体系と区別するため、有限多体系とよび、数値的にも多くの特有の困難がある。
有限密度	非ゼロの密度を持つ物理系。
有効媒質法	溶液分子の周りの溶媒の分布確率を表す分布関数を求める理論。様々な種類の分布関数理論があるが、特に 3D-RISM 法はタンパク質やナノチューブといった大きな分子の溶媒和を扱うことができる。
有効模型的アプローチ	特異性が強い核力を直接扱わずに、数値的に扱いやすい核力（有効相互作用）に変換する方法。上記の「カイラル有効場理論」と似た概念で、特定のエネルギー領域、制限されたヒルベルト空間における原子核多体問題で用いられる。
溶媒和エネルギー	孤立状態の溶質分子が溶媒中へと移行することに伴って変化する自由エネルギー量
よ	
弱い力	不安定原子核が β 崩壊する際に働く力。素粒子標準理論では、すべてのフェルミオンの中で W ボソンや Z ボソンという粒子を交換されることで力が作用しあうと考える。
4 中心 2 電子分子軌道積分	2 電子クーロン反発積分のうち 4 つの分子軌道中心を持つ 2 電子クーロン反発積分のこと。
ら	
ラジカル	電子が対になっていないことで不安定になっている化学物質
ランチョス法	エルミート行列を三重対角化する手法。数値計算において再帰計算による効率的な演算が可能であることから、固有方程式の解法等でよく用いられる。

(次ページに続く)

用語	解説
乱流境界層	乱流で構成された境界層（粘性を有する流体中において粘性の影響を強く受ける領域で、一般には物体表面に見られる） 乱流境界層では流体の渦運動により運動量やエネルギーの交換が強く行われる。このため、壁面近傍の流体へ運動量が供給されるので層流境界層よりも剥離しにくい、壁面付近で急激に減少する速度分布を持つため摩擦抗力が大きい。
乱流スケール	乱流における渦の大きさ
り	
リオードリング	計算順序の並べ替えのこと。計算処理を速くしたり、並列処理ができるように依存関係をなくすために行われる。
リガンド結合	受容体に特異的に結合する物質（リガンド）が結合すること
リボゾーム	細胞内の構造体で、遺伝情報からタンパク質へと変換する機構である翻訳が行われる場である。
量子色力学	クォークとグルーオンの力学（強い力の力学）を量子力学的に記述する理論。素粒子標準理論の一部をなす。（QCD: Quantum Chromodynamics）
量子数射影法	量子多体計算において、変分計算によって得られた波動関数はハミルトニアンがもともと持っている対称性を自発的に破っていることが多い。この波動関数に射影演算子を作用させることによって、本来保つべき対称性を回復させる方法。
リラクサー	特殊な強誘電体。誘電率の周波数依存性に特徴がある。
臨界終点	相図において一次相転移が終結し、熱力学変数が連続的に変化ようになる（クロスオーバー）へと移行する点
隣接通信	並列計算で領域分割法を用いる時に、隣り合う分割された領域間でデータの授受を行う通信の事。
る	
ループ	ファインマン図形において現れるループ構造。量子補正が高次になるにつれループの数が増える。
ルシフェラーゼ	蛍の蛍光タンパク質
ルミノシティ	ビーム衝突型加速器実験において、ルミノシティ＝単位時間あたりに起こる反応の回数÷断面積で定義される。
れ	
レアイベント探索アルゴリズム	通常のシミュレーションでは滅多に発生しないが、科学的に重要な事象を探索するためのアルゴリズム。例えば分子動力学シミュレーションでは高い活性化障壁をもった化学反応はなかなか発生しない。

(次ページに続く)

用語	解説
レイトレーシング	光線追跡法。コンピュータグラフィックスの画像生成手法の一つで、光が反射屈折する物理現象を模倣し、画像を作成する。
レオロジー	物質の流動と変形を取り扱う学問。
レジスタブロッキング	CPU 内のレジスタ上になるべくデータを集められるようにするためのコーディングテクニック。これにより命令実行効率が向上する。
レプリカ法	同じ原子から構成されるシステムを複数用意し、それぞれシミュレーションの条件を変えながら、シミュレーションを行う方法。条件パラメータをある一定の法則に従って交換しながら実行するレプリカ交換法などがある。
ろ	
ローカルインジェクション	外部からガラス細管などで分子を脳の中の特定の領域に注入することさらに電圧を同時に付加することで特定領域の細胞内に分子を注入するローカルエレクトロポレーションなども存在する。
ローカルファイルシステム	並列計算機の各計算ノードから独立して参照されるファイルシステム。各計算ノードで個別に使われるファイルを一時的に保存する場所として使われ、他の計算ノードからは参照できないためグローバルファイルシステムと比較して利便性に欠ける。一方でグローバルファイルシステムと比較して特に大規模なシステムにおいて高性能を達成しやすい構成である。

付録 B

執筆者一覧

氏名	所属	役職
序論		
執筆者		
富田 浩文	理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム	チームリーダー
杉田 有治	理化学研究所 計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム	チームリーダー
生命科学分野		
執筆者		
伊井 仁志	大阪大学 大学院基礎工学研究科	助教
五十嵐 潤	理化学研究所 次世代計算科学研究開発プログラム	特別研究員
池口 満徳	横浜市立大学 大学院生命医科学研究科	准教授
太田 元規	名古屋大学 大学院情報科学研究科	教授
沖田 浩平	日本大学 生産工学部	准教授
加沢 知毅	東京大学 先端科学技術研究センター	特任研究員
北浦 和夫	神戸大学 システム情報学研究科計算科学専攻	特命教授
城地 保昌	高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室	チームリーダー
杉田 有治	理化学研究所 計算科学研究機構 粒子系生物物理研究チーム	チームリーダー
杉山 和靖	理化学研究所 情報基盤センター	ユニットリーダー
須永 泰弘	理化学研究所 情報基盤センター	センター研究員
高田 彰二	京都大学 大学院理学研究科	教授
高橋 恒一	理化学研究所 生命システム研究センター	チームリーダー
玉田 嘉紀	東京大学 大学院情報理工学系研究科	助教
中迫 雅由	慶應義塾大学理工学部物理学科	教授
野田 茂穂	理化学研究所 情報基盤センター	ユニットリーダー
濱田 智之	日立製作所 中央研究所	主管研究員

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
林 重彦	京都大学 大学院理学研究科 化学専攻	教授
三澤 計治	理化学研究所 情報基盤センター	センター研究員
望月 祐志	立教大学 理学部化学科	教授
山崎 隆浩	物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット	特別研究員
山下 雄史	東京大学 先端科学技術研究センター	特任准教授
吉井 範行	名古屋大学 工学研究科附属計算科学連携教育研究センター	特任准教授
李 秀栄	理化学研究所 基幹研究所	協力研究員
執筆協力者		
秋山 泰	東京工業大学 大学院情報理工学研究科	教授
大野 洋介	理化学研究所 計算科学研究機構	上級研究員
泰地 真弘人	理化学研究所 計算科学研究機構	チームリーダー
長崎 正朗	東京大学 東北メディカル・メガバンク ゲノム解析部門	教授
長谷川亜樹	理化学研究所計算科学研究機構	リサーチアソシエイト
藤本明洋	理化学研究所統合生命医科学研究センター	上級研究員
物質科学分野		
執筆者		
藤堂 眞治	東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター	特任教授
西松 毅	東北大学 金属材料研究所 計算材料学研究部門	助教
信定 克幸	自然科学研究機構 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域	准教授
吉本 芳英	鳥取大学 大学院工学研究科 機械宇宙工学専攻	准教授
執筆協力者		
石村 和也	自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点	特任研究員
今田 正俊	東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻	教授
岩田 潤一	東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻	特任講師
江原 正博	自然科学研究機構 分子科学研究所 計算科学研究センター	教授
北浦 和夫	神戸大学 大学院システム情報学研究科計算科学専攻	特命教授
北尾 彰朗	東京大学 分子細胞生物學研究所 計算分子機能研究分野	准教授
甲賀 研一郎	岡山大学 理学部化学科理論物理化学	教授
榊 茂好	京都大学 福井謙一記念研究センター 福井謙一記念研究部第二	リサーチリーダー
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科分子工学専攻 分子理論化学講座	教授
志賀 基之	日本原子力研究開発機構シミュレーション技術開発室	研究副主幹
重田 育照	大阪大学 大学院基礎工学研究科物質創成専攻	准教授

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
茂本 勇	東レ株式会社 先端材料研究所 ポリマー基礎研究ユニット	主任研究員
世古 敦人	京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻	助教
武次 徹也	北海道大学 大学院理学研究院化学部門	教授
田中 秀樹	岡山大学 理学部化学科	教授
常行 真司	東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻	教授
東後 篤史	京都大学 学際融合教育研究推進センター 構造材料元素戦略研究ユニット	特定准教授
長岡 正隆	名古屋大学 大学院情報科学研究科物質情報論講座	教授
中嶋 隆人	理化学研究所 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム	チームリーダー
中野 博生	兵庫県立大学 大学院物質理学研究科 物質科学専攻	助教
中野 雅由	大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻化学工学領域	教授
林 重彦	京都大学 大学院理学研究科 化学専攻	教授
松林 伸幸	京都大学 化学研究所 分子環境解析化学研究領域	准教授
宮崎 剛	物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット	主幹研究員
宮本 良之	産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 電気科学界面シミュレーショングループ	研究グループ長
望月 祐志	立教大学 理学部 化学科	教授
森田 悟史	東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻	特任研究員
泰岡 顕治	慶應義塾大学 理工学部 機械工学科開放環境科学専攻	教授
山崎 隆浩	物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット	特別研究員
山下 晃一	東京大学 大学院工学系研究科化学システム工学専攻	教授
山下 雄史	東京大学 先端科学技術研究センター システム生物医学ラボラトリー	准教授
吉井 範行	名古屋大学 大学院工学研究科 計算科学連携教育センター	特任准教授
渡辺 宙志	東京大学 物性研究所 物質設計評価施設	助教授
地球科学分野（気象・気候科学）		
執筆者		
河宮 未知生	海洋研究開発機構 地球環境変動領域	チームリーダー
富田 浩文	理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム	チームリーダー
日下 博幸	筑波大学 計算科学研究センター	准教授
荒川 隆	高度情報科学技術研究機構	主任研究員
斉藤 和雄	気象庁気象研究所 予報研究部	部長
執筆協力者		

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
原 政之	海洋研究開発機構 地球環境変動領域	技術研究主事
八代 尚	理化学研究所 計算科学研究機構 複合系気候科学研究チーム	研究員
木本 昌秀	東京大学大気海洋研究所	教授
井上 孝洋	高度情報科学技術研究機構	主任研究員
大越智 幸司	海洋研究開発機構地球環境変動領域	特任技術主任
本田 有機	気象庁国際室	外事官
荒波 恒平	気象庁数値予報課	技術専門官
藤田 匡	気象庁数値予報課	調査官
地球科学分野（固体地球科学）		
執筆者		
堀 高峰	海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト	サブリーダー
堀 宗朗	東京大学 地震研究所 巨大地震津波災害予測研究センター	教授
越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所 災害リスク部門	准教授
亀山 真典	愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター	准教授
宮腰 剛広	海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域	研究員
執筆協力者		
深畑 幸俊	京都大学 防災研究所 地震予知研究センター	准教授
浜野 洋三	海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域	チームリーダー
古市 幹人	海洋研究開発機構 地球内部ダイナミクス領域	主任研究員
古村 孝志	東京大学大学院 情報学環	教授
前田 拓人	東京大学 地震研究所 観測開発基盤センター	助教
撫佐 昭裕	日本電気株式会社 文教・科学ソリューション事業部	事業部長代理
地球科学分野（衛星・観測データの有効利用）		
執筆者		
石川 洋一	海洋研究開発機構 地球情報研究センター	グループリーダー
三好 建正	理化学研究所 計算科学研究機構 データ同化研究チーム	チームリーダー
執筆協力者		
佐々木 祐二	海洋研究開発機構 地球情報研究センター	特任技術副主任
地球惑星科学分野		
執筆者		
林 祥介	神戸大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻／惑星科学研究センター（CPS）	教授
中本 泰史	東京工業大学 大学院理工学研究科 地球惑星科学専攻	准教授
執筆協力者		

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
玄田 英典	東京工業大学 地球生命研究所	研究員
小久保 英一郎	国立天文台 理論研究部	教授
高橋芳幸	神戸大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻	准教授
ものづくり分野		
執筆者		
加藤 千幸	東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター	教授、センター長
檜山 和男	中央大学理工学部	教授
高木 亮治	宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所	准教授
河合 浩志	諏訪東京理科大 システム工学部	准教授
吉川 暢宏	東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター	教授
梅野 宜崇	東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター	准教授
椎原 良典	東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター	助教
井戸村 泰宏	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター	研究主幹
佐藤 敏郎	富士通アドバンステクノロジー(株) 複合回路技術統括部	部長
小野 謙二	理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チーム	チームリーダー
執筆協力者		
坪倉 誠	理化学研究所 計算科学研究機構 複雑現象統一の解法研究チーム	チームリーダー
渡邊 智彦	核融合科学研究所 ヘリカル研究部	教授
前山 伸也	日本原子力研究開発機構 核融合研究開発部門	博士研究員
基礎物理における連携		
執筆者/執筆協力者		
青木 慎也	京都大学 基礎物理学研究所	教授
阿部 喬	東京大学 理学系研究科	助教
入江 敦子	高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所	広報支援員
大塚 孝治	東京大学 理学系研究科	教授
住吉 光介	沼津工業高等専門学校 教養科	教授
滝脇 知也	国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト	特任助教
土井 琢身	理化学研究所 仁科加速器研究センター	研究員
吉戸 智明	筑波大学 計算科学研究センター	主任研究員
宇宙物理研究分野		
執筆者		
梅村 雅之	筑波大学計算科学研究センター	センター長

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
執筆協力者		
石山 智明	筑波大学 計算科学研究センター	研究員
岡本 崇	筑波大学 数理物質系	准教授
草野 完也	名古屋大学 太陽地球環境研究所	教授
柴田 大	京都大学 基礎物理学研究所	教授
庄司 光男	筑波大学 数理物質系	助教
関口 雄一郎	京都大学 基礎物理学研究所	特定研究員
滝脇 知也	国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト	特任助教
富阪 幸治	国立天文台 理論研究部	教授
中本 泰史	東京工業大学 理工学研究科	准教授
星野 真弘	東京大学 理学系研究科	教授
長谷川 賢二	筑波大学 計算科学研究センター	研究員
牧野 淳一郎	東京工業大学 理工学研究科	教授
松元 亮治	千葉大学 理学研究科	教授
松本 洋介	千葉大学 理学研究科	特任助教
三上 隼人	千葉大学	
横山 央明	東京大学 理学系研究科	准教授
吉川 耕司	筑波大学 数理物質系	講師
吉田 直紀	東京大学 理学系研究科	教授
素粒子物理研究分野		
執筆者/執筆協力者		
青木 慎也	京都大学・基礎物理学研究所	教授
石井 理修	筑波大学・数理物質系	准教授
石川 健一	広島大学・大学院理学研究科	准教授
石塚 成人	筑波大学・数理物質系	准教授
金谷 和至	筑波大学・数理物質系	准教授
金児 隆志	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	助教
藏増 嘉伸	筑波大学・数理物質系	教授
滑川 裕介	筑波大学・計算科学研究センター	研究員
中村 宜文	理化学研究所・計算科学研究機構	研究員
仁尾 真紀子	理化学研究所・仁科加速器研究センター	研究員
西村 淳	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	准教授
橋本 省二	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	教授

(次ページに続く)

氏名	所属	役職
早川 雅司	名古屋大学・大学院理学研究科	准教授
松古 栄夫	高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター	助教
山崎 剛	名古屋大学・基礎理論研究センター	助教
山田 憲和	高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所	助教
吉江 友照	筑波大学・数理物質系	准教授
原子核物理研究分野		
執筆者		
中務 孝	理化学研究所 仁科加速器研究センター	准主任研究員
清水 則孝	東京大学 原子核科学研究センター	特任准教授
執筆協力者		
青山 茂義	新潟大学 情報基盤センター	准教授
小野 章	東北大学 理学研究科	助教
野中 千穂	名古屋大学 理学研究科	准教授
初田 哲男	理化学研究所 仁科加速器研究センター	主任研究員
肥山 詠美子	理化学研究所 仁科加速器研究センター	准主任研究員
保坂 淳	大阪大学 核物理研究センター	教授
松尾 正之	新潟大学 自然科学系	教授
矢花 一浩	筑波大学 数理物質系	教授
社会科学分野		
執筆者		
伊藤 伸泰	理化学研究所 計算科学研究機構 離散事象シミュレーション研究チーム	チームリーダー
執筆協力者		
和泉 潔	東京大学 工学系研究科 システム創成学専攻	准教授
野田 五木樹	産業技術総合研究所 サービス工学研究センター	研究チーム長

目次と執筆者リストとの対応

1	序論	
2	今後の HPC が貢献しうる社会的課題	
2.1	創薬・医療	生命科学分野
2.2	総合防災	
2.2.1	地震・津波防災	地球科学分野（固体地球科学）
2.2.2	気象災害	地球科学分野（気象・気候科学）
2.3	エネルギー・環境問題	物質科学分野、地球科学分野、ものづくり分野
2.4	社会経済予測	社会科学分野
3	分野連携による新しい科学の創出	
3.1	基礎科学の連携と統一理解	
3.1.1	基礎物理における連携	基礎物理における連携
3.1.2	宇宙科学、地球科学の連携による惑星科学	地球惑星科学分野
3.1.3	生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野の連携	生命科学分野、物質科学分野、ものづくり分野
3.2	ビッグデータの有効利用	
3.2.1	計算科学基盤技術の創出と高度化	ものづくり分野
3.2.2	ビッグデータの有効利用例①：衛星・観測データの有効利用	地球科学分野（衛星・観測データの有効利用）
3.2.3	ビッグデータの有効利用例②：ゲノム解析・バイオインフォマティクス	生命科学分野
3.3	大規模実験施設との連携	
3.3.1	X 線自由電子レーザー施設 SACLA 等の大型研究施設との連携	生命科学分野
4	各計算科学分野の社会的・科学的課題	
4.1	生命科学	生命科学分野
4.2	物質科学	物質科学分野
4.3	地球科学	
4.3.1	気象・気候科学	地球科学分野（気象・気候科学）
4.3.2	固体地球科学	地球科学分野（固体地球科学）
4.4	ものづくり	
4.4.1	熱流体	ものづくり分野
4.4.2	構造解析	ものづくり分野

(次ページに続く)

4.4.3	機械材料	ものづくり分野
4.4.4	プラズマ・核融合	ものづくり分野
4.4.5	電磁界解析	ものづくり分野
4.4.6	可視化・データ処理	ものづくり分野
4.5	基礎物理	
4.5.1	宇宙研究	宇宙物理研究分野
4.5.2	素粒子	素粒子物理研究分野
4.5.3	原子核物理	原子核物理研究分野
4.6	社会科学	社会科学分野