

物質科学シミュレーションのアプリ開発と普及

常行真司：東大院理／東大物性研

1年半で計算速度が2倍になるといわれる計算機の進歩と、それを使いこなすための研究者の努力により、この10年に限ってみても、物質科学シミュレーションの世界は大きく様変わりした。簡単に言えば、以前より大規模、長時間、近似精度の高い計算が可能になり、シミュレーションの守備範囲は大きな広がりを見せている。とはいえ高機能で大規模なアプリの開発は、最新のマシンに合わせた高度なプログラミング技術が求められることから、難易度が高い。そのため、必ずしもアプリ開発者人口が増えたわけではなく、アプリの無償公開や商用化が進み、そのユーザーとしての実験研究者、理論研究者がアプリ開発者の想定を超えて新しい物質科学の研究を展開しているというのが、計算物質科学の近年の傾向であろう。一方でシミュレーション手法開発に携わる研究者も、公開されたアプリを利用して新しい機能をもつアプリを容易に開発できるという意味で、アプリ公開の恩恵を受けている。

本講演では、最近終了した京（けい）コンピュータプロジェクトや現在進行中のポスト「京」コンピュータプロジェクト等、全国的な組織やネットワークによるアプリ開発体制と、その中でこれまでに開発・公開された、先端的なアプリの例を紹介する。続いて、これらの国家プロジェクトで開発されたアプリを死蔵させず、上述の現代的な研究スタイルにマッチするよう普及を図るため、物性研・計算物質科学研究センター（CCMS）の研究者を中心に継続的に運用されている、計算物質科学のポータルサイト MateriApps（図）と、関連する普及活動を紹介する。また、スーパーコンピュータ「京」を含む日本のHPCI（ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）の現状と、HPCIを基盤としたアプリ普及の動きについても述べる。

関連 web MateriApps <http://ma.cms-initiative.jp>



図：物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps のトップページ