

L5 ANSWER 30 OF 227 JSTPlus JST COPYRIGHT

DN 13A1593783

TI 精密工学における第一原理計算—活用と今後の発展—

AU 稲垣耕司 (大阪大)

SO 精密工学会誌

JST 資料番号 : F0268C, ISSN : 0912-0289

巻号ページ(発行年月日) : Vol.79, No.10, Page.917-920 (2013.10.05) 写図表参 :

写図 5, 表 1, 参 6

DT 逐次刊行物(A) 記事区分 : 解説(b2)

CY 日本(JPN)

LA 日本語(JA)

AB 本報では,計算機と計算機ソフトウェア,計算機資源の利用に関する状況,計算ソフトウェア利用の促進活動について解説した。主な内容項目を次に示した。1)はじめに:現実の複雑な初期条件,境界条件を取入れた"シミュレーション"によりできる定量的な値の評価,シミュレーションのキープポイント,2)計算機とソフトウェアの発展によるシミュレーション適用範囲の拡大:第一原理シミュレーションで必要とされるモデルサイズ(燃料電池などでの水 - Pt 電極界面上での水分子の解離反応過程の解析に第一原理分子動力学シミュレーションを適用した例,解析すべき表面の構造),計算機の能力向上(並列計算の大規模化による計算能力の強化),日本のスーパーコンピュータの現在とこれから(京コンピュータの機能と特性,必要な大規模計算機資源と 5 つの戦略分野(予測する生命科学・医療および創薬基盤,新物質・エネルギー創成,防災・減災に資する地球変動予測,次世代ものづくり,物質と宇宙の起源と構造)など),計算手法・プログラムの開発(計算速度の改善としてオーダーN 法や実空間差分法,チューニングのキープポイント,アムダールの法則と呼ばれるプロセッサ数と加速率の関係など),3)スパコンの活用:スパコンの利用(HPCI(High Performance Computing Infrastructure)機関,大学の共同利用計算機センターなどの利用),人材育成の活動(CMD(コンピューターショナル・マテリアルズ・デザイン)ワークショップ研修参加者,CMDワークショップ実習コースの変遷など)。

CC JE02000J, IA02030D, QF01000M, JD02010R (681.3:519.6, 681.5.03.015, 681, 681.3.02.001)

CT *機械工学, ab initio 法, *スーパーコンピュータ, *応用プログラム, 計算機シミュレーション, 人材育成, 並列演算, 計算機処理速度, 最適化, システム設計

ST システム開発, 京【スーパーコンピュータ】, 計算機資源, 性能チューニング工学, 大規模並列計算, *第一原理計算, 分子動力学シミュレーション

JOI DN/JST.JSTAGE/jjspe/79.917

DOI 10.2493/jjspe.79.917

UD 20131119

※2013/1/17 配信分から

JOI に修正いたします。

(現在 : DOI)