

# “計算科学”と“計算機科学”の連携による 統計力学理論の超高並列化への挑戦



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

吉田 紀生

## アブストラクト

次世代スパコンの稼働が近づき、これまでになかった“現実の系”の計算ができる時代が到来しつつある。次世代ナノ統合拠点では、次世代スパコンの性能を最大限に引き出し、これらの“現実の系”に応用できる、計算科学理論・方法論の確立と、それらに基づくソフトウェアの開発を行ってきた。とくに、3つのグランドチャレンジ課題(次世代ナノ情報機能・材料、次世代ナノ生体物質、次世代エネルギー)を達成するべく、6つの中核アプリケーション(実空間第一原理ナノ物質シミュレーター、動的密度行列繰り込み群法、大規模並列量子モンテカルロ法、高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト、RISM/3D-RISM、高速量子化学計算ソフト)を設定し、理論・計算科学と計算機科学の連携のもと、次世代スパコンにおける高並列化、高効率化を行ってきた。本講演では、中核アプリケーションの一つである RISM/3D-RISM の開発を例に、理論・計算科学と計算機科学の連携によるアプリケーションの高度化の現状と、いくつかの応用例を紹介する。

## 講演者プロフィール

### ◆ 略歴

2003年 3月 京都大学大学院理学研究科博士課程修了  
2003年 4月 (株)富士総合研究所 研究員  
2004年 4月 自然科学研究機構 分子科学研究所 博士研究員  
2007年 6月 自然科学研究機構 分子科学研究所 助教

### ◆ 研究分野、研究テーマ

理論化学(量子化学、統計力学理論)  
液体の積分方程式理論を用いた溶液内化学過程の理論的研究

### ◆ その他(所属学会、受賞歴、著書など)

・所属学会: 日本化学会、分子科学会、溶液化学研究会  
・主な著書: 「Modeling Solvent Environments」 Michel Feig(編)

