

スパコンによって常識を破る —本質的進展による産業利用活性化—

川添 良幸

東北大学 金属材料研究所 教授

2011年10月19日

地球シミュレータ産業戦略利用シンポジウム2011



ESの前に、普通の常識？

- 地デジ対応テレビは家庭に85%導入済み？
- メタボは寿命を縮める？
- 地球温暖化・・・北極の氷が解けるから？
- 砂漠は太陽光発電に向いている？
- 日本には資源がない？
- 月は地球の衛星？

地デジの嘘

- テレビは1家庭に1台？
- 総務省発表は、1家庭に1台でもあれば地デジ対応済みとカウントしている！
- 車載テレビとかは全くカウントしていない。
- アメリカとかでは結局アナログも継続
- 日本は？
- 大震災で延期・・・

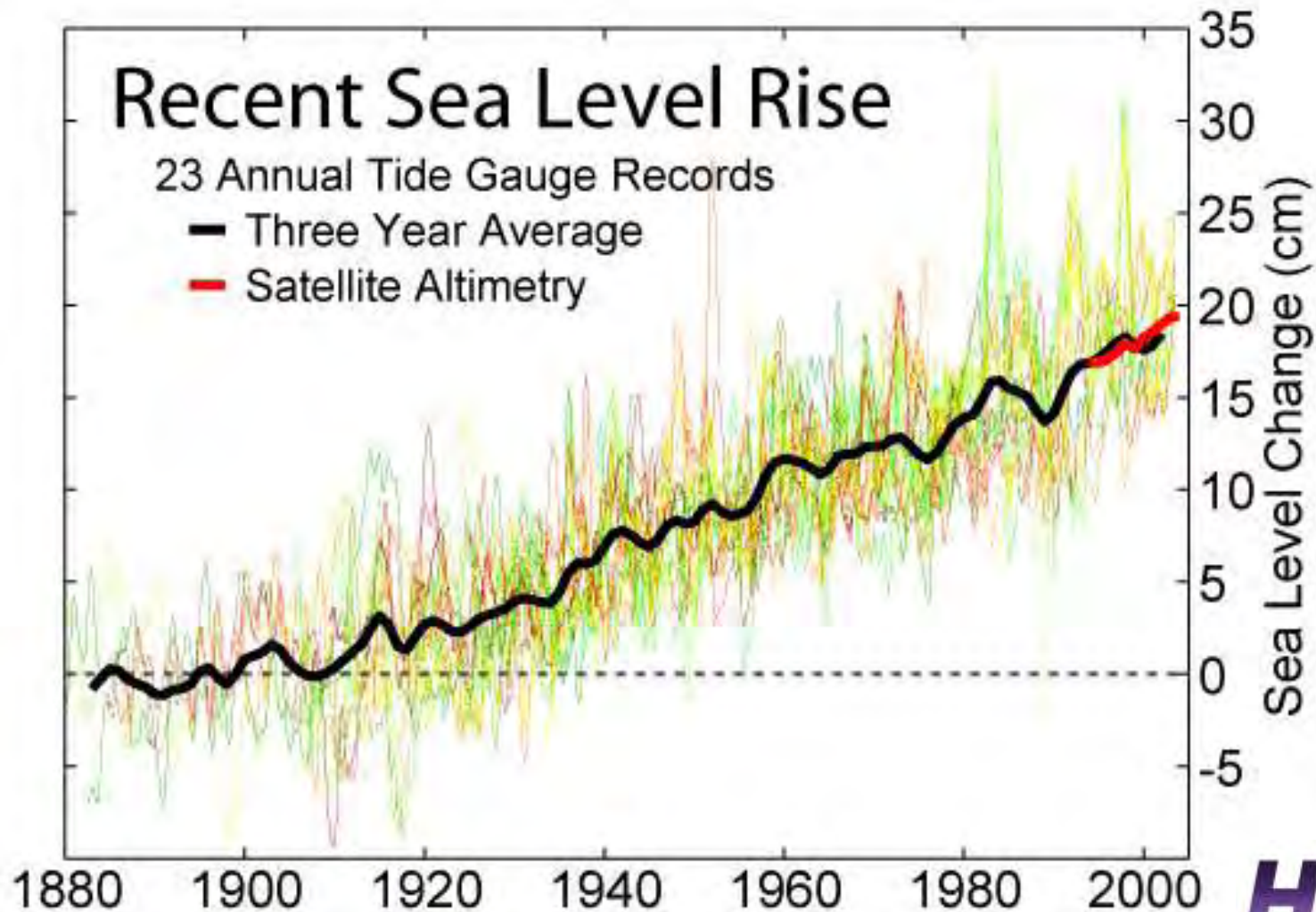
メタボリックシンドローム

太ると病気になる？

No！！

痩せたのは既に死んでいる・・・
生き延びているのは小太り！

海水面上昇



2011年1月30日の朝日新聞

- 農業の人口比率

1985年には65歳以上が144万人(全体で543万人)、2010年には161万人(261万人)

- 米60kgを作る費用が16497円、売る価格は13099円

- 自給率は、親子丼=71%、カレーライス=57%、天ぷらうどん=20%、サンドイッチ=16%

- 本当？

我が国は農業大国！

- 農水省の食糧自給率は正しい？
- 40%とは？＝カロリーベース＝(国産＋輸出) 供給カロリー / (国産＋輸入－輸出) 供給カロリー
- コンビニやファミリーレストランで捨てている分を抜かしただけで56%
- 生産額ベース＝(国内生産額－輸出額) / (国内生産額＋輸入額－輸出額) なら、何と66%自給！
- 1hのうそ：北海道では17h。3万人以上の若者が農業経営で成功

浅川芳裕：文藝春秋、2008年12月号

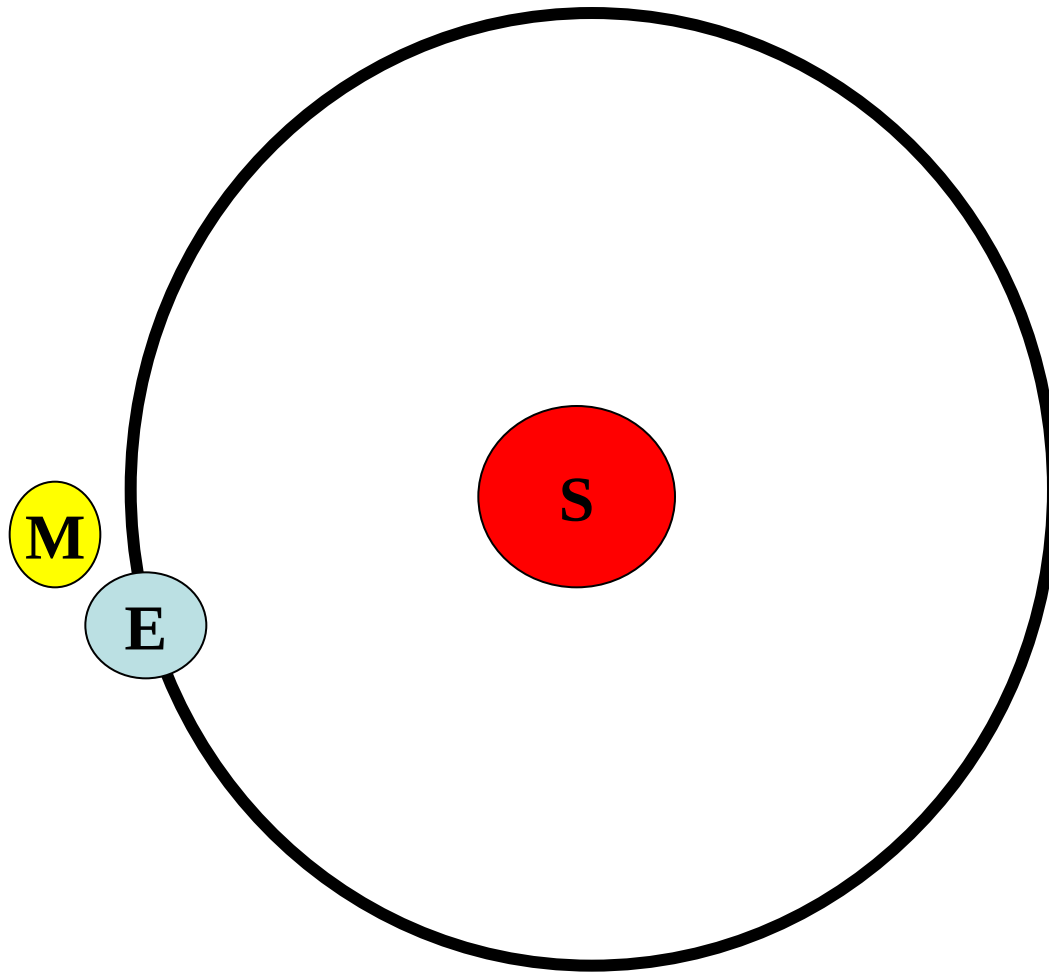
都市鉱山 urban mining

- 都市鉱山として日本の金属保有量は
- 金＝約6,800トンで世界の現有埋蔵量42,000トンの約16%
- 銀＝60,000トンで現有埋蔵量の22%
- インジウム＝世界の61%、錫＝11%、タンタル＝10%、Liは世界の使用量の7.5倍
- 日本のリサイクル資源は各種スクラップとして海外に輸出→回収すべき！
(独立行政法人 物質・材料研究機構)

小学校の問題から 間違って教えられて来た 惑星と衛星の常識？

- 小学校：太陽の周りを地球が回り、その周りを月が回っている。
- これで正しい？

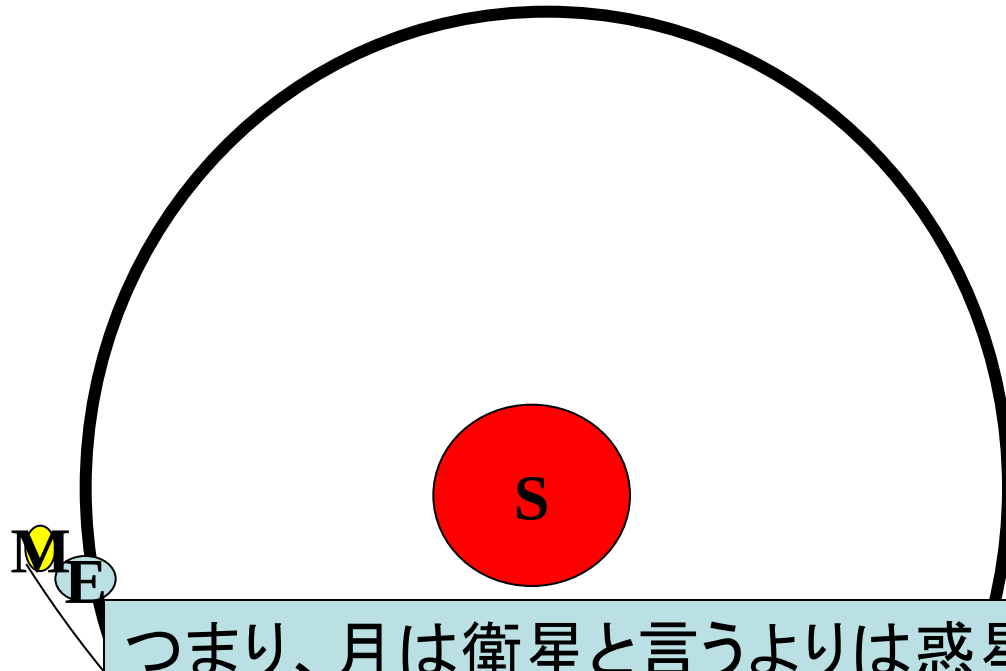
月の軌道は？



未だに天動説！

- 自分中心でしか考えられない！
- 客観的に考える……
- そのために必要なことは？
 - 太陽と地球と月の間の力関係
- F_{S-E} が一番強いのは当然。では、次は？
 - 実は、 F_{E-M} ではなく、 F_{S-M} ！
 - すると・・・月が太陽に関して負の曲率は持てない

正解：月は地球とほぼ同じ軌道で太陽の周りを回っている



つまり、月は衛星と言うよりは惑星！

そもそも、衛星とか惑星とかいう概念は成り立たない！！！！分類学の破綻。

共通軌道(図の円)からのずれ(さえ見えない)

摂動は成り立たない・・・多体問題は難しい！

講演概要

- 標準的な教科書は正しいか？
 - 問題は歴史の教科書だけではない！
- そのために必要な膨大な計算量
→ESによって解決
- 21世紀になっても基礎から確実な理解し直しが必要
- それによって、ESの産業利用の意義が明確化
- 実験の説明から予言・予測可能な信頼性のあるシミュレーションへのパラダイムシフト

現状と要求

- 実験結果の説明→シミュレーション計算のパラダイムシフト：理論の地位の向上：素粒子の世界並へ
- 実験の再現→精密な理論計算：実験と合わなければ実験に問題があるというレベル達成
- 研究→教育： ES→次世代人材
新しいメンタリティの育成：自信を持って予言

例：材料設計におけるシミュレーション

- 理論は実験の説明に過ぎない？
- 実験条件が複雑過ぎてシミュレーション不能？
- 産業利用のコスト算定が不能？



- 抜本的な改善により問題解決
- 理論・シミュレーションの優位性

実験的研究の限界と
シミュレーションによ
る解決！

シミュレーション研究

自然物に対しては？

組合せの数：2元系で3千
3元系では10万
4元系では、150万

れれ...見つかってしまった！

へへ...当たらないよ！

理論→理解とは何か？

- 複雑な対象を
 - 分類学・・・名前を付けて、分かった気になる！
 - 単純化・・・少ないパラメーターで分かった気になる
 - 教育・・・洗脳して分かった気にさせる？
- 
- 現象は説明出来ても、正しく理解したとは限らないため、未知の物質に対する予言能力はない
 - この状況を抜本的に改善！
 - 本質的理解
 - そのための道具としてシミュレーション・可視化の有用性
 - 見えないものを見える様に出来る！ (in silico)

理論と実験の立場

- 素粒子：理論による予言と実験による確認
- 物性物理や化学：実験による新物質発見と理論による説明



- しかし・・・根本から「分かっている」のは分子や結晶で、素粒子ではない！
- 説明から設計（予言）へのパラダイムシフトは可能
- 新たな理論の枠組みの構築と適用
- 産業利用一般への適用

そもそも物質とは？
分類学は何に基づいている？

鉄は錆びる＝常識？

- **そもそも、純鉄はない！**・・・純粹な物質はない。常に不純物を含んでいる。10ナイン＝不純物 10^{-13}
- ステンレス鋼＝クロムとニッケルとの合金は錆びない・・・不純物を含む物質の制御法
- アショーカ・ピラーは1600年も錆びない？
- 99.9999%**鉄(という物)は錆びない！**
- 鉄の原料は酸化鉄。学名の酸化鉄は FeO 。鉄棒の表面等。錆＝三酸化二鉄 Fe_2O_3 ＝赤錆。四酸化三鉄 Fe_3O_4 ＝黒錆＝銹物名としては磁鉄銹＝砂鉄
- **実験はパーフェクトではない！**（純金の定義＝99.99%）

純粹な物質は
計算機の中にしかない！

実験を凌駕した新物質を
設計出来る

ところで...

原子は簡単に解ける？

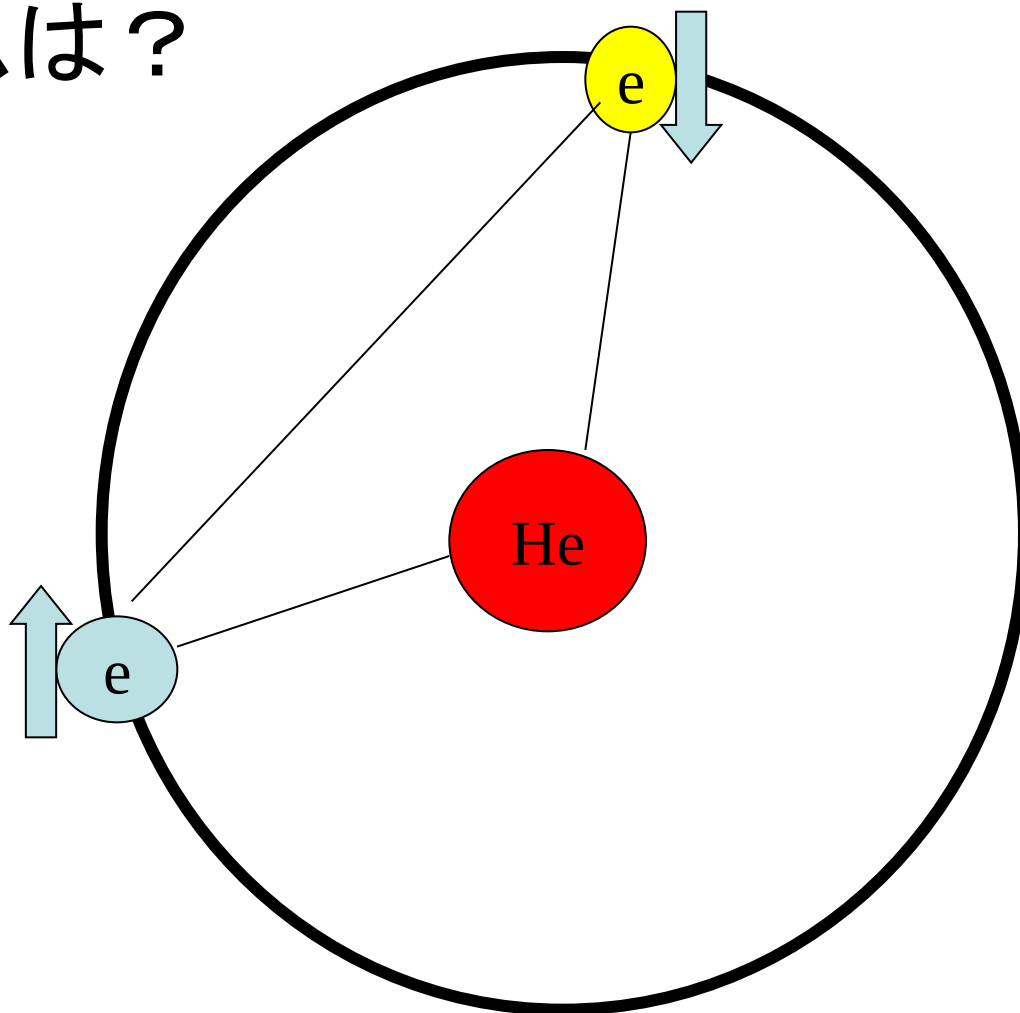


No !

原子一個だって多体問題

水素原子は2体問題＝解ける！

ヘリウムは？

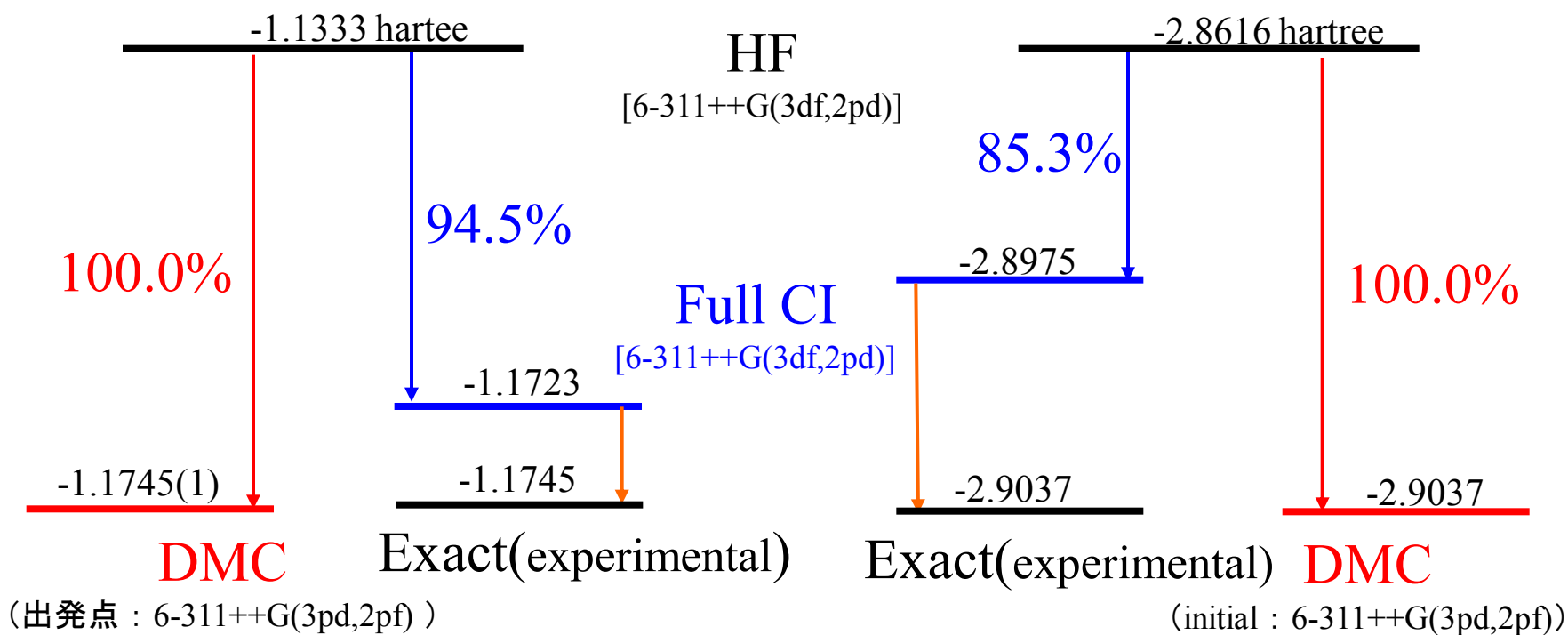


既に複雑な3体問題！単に1s軌道に電子が2個ではない！

2電子系における電子相関エネルギー

・ H₂ 分子

・ He 原子



既にスパコンが必要な計算量に→ 3 体問題は難しい

材料・物性の理論・・・

20世紀で基礎は分かって21世紀は応用の時代？



まったく違った状況・・・



教科書問題は歴史だけではない！
理科や数学にもたくさん問題がある
基礎から確実に進展させ、それを応用に繋ぐ！

第一原理計算の品質保証

- ナノテク用新物質設計の品質保証がESスパコンのパワーで可能に -



本当の第一原理計算の目標は
現象の説明ではなく新物質設計

物質は設計できる！



定量的な方策を実施
信頼できる方策を採用



理論計算の必要条件と充分条件？

必要条件＝ビリアル定理

- ビリアルとはラテン語で「力」の意
- ビリアルは

$$G = \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{p}_i$$

によって定義される値で、1870年にクラウジウスが命名

- 分子運動論で圧力を求めるための式

$$P = \frac{1}{3V} (2 \langle K \rangle + \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{r}_i \rangle)$$

Virial定理 : $2T + V = 0$

Kinetic energy

Potential energy

クーロン相互作用をしている原子核と電子からなる任意の定常状態に対し厳密に成立する関係

(証) 基本的ハミルトニアン $\hat{H}$ を構成する $\hat{T}$ と $\hat{V}$ の空間的スケーリング性

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{i,\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{\alpha}|} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|}$$

$$\hat{T}[\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_{\alpha}\}] = \lambda^2 \hat{T}[\{\lambda \mathbf{r}_i\}, \{\lambda \mathbf{R}_{\alpha}\}]$$

$$\hat{V}[\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_{\alpha}\}] = \lambda \hat{V}[\{\lambda \mathbf{r}_i\}, \{\lambda \mathbf{R}_{\alpha}\}]$$

運動エネルギー 演算子: 空間座標の逆2乗形式

クーロンポテンシャル
エネルギー演算子 空間座標の逆1乗形式

$$\hat{H}\Phi = E\Phi \quad E = T + V < 0 \quad (T > 0, V < 0)$$

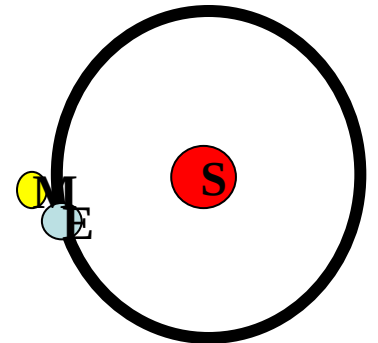
$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Rightarrow \Phi(\lambda \mathbf{r}, \lambda \mathbf{R}) \quad \lambda : \text{スケーリング因子}$$

$$E(\lambda) = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \lambda^2 T + \lambda V \quad \text{変分から} \quad \left. \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=1} = 2T + V = 0$$

Virial比 : $-V/T = 2$ Virial定理成立は正確な波動関数である為の必要条件

何故、ポテンシャルは $1/r$

- 力の源泉からの影響が一様に広がる。
- すると、距離 r の所の球面の面積 $=4\pi r^2$
- すなわち、力は $1/r^2$
- それで、ポテンシャルは $1/r$
- 重力と電磁気力は幾何学で決まる力
- 我々の世界 $=3$ 次元
- 弱い相互作用・強い相互作用は不明



新物質のシミュレーションによる設計

- 実験以前に、理論のみで設計可能！
- そのために必要なことは？



- 求めたい「量」を確実に導出できる理論のレベルを使うこと：**摂動論は数値的に確認しないと危険。多体問題は難しい！**
- 実験に依存しない**真の第一原理シミュレーション計算**



- **説明からデザインへのパラダイムシフト**

現在の標準第一原理計算のレベル

- 基本的仮定＝断熱近似
 - －（電子は陽子の約1800分の1の質量。原子核は点電荷。）
 - － 問題点：反応は断熱近似では記述できない。
 - － 解決法：時間依存シュレディンガー方程式
- DFT+LDA+平面波展開
 - － 縮退のない基底状態。電子ガス模型
- HF+CI+原子軌道関数
 - － 連続状態を記述出来ない。

第一原理計算 (*ab initio*)

電子と原子核から構成される多体系の基礎物性を、量子力学の基本原則に基づき可能な限り、非経験的に、正確に扱う手法。

多電子シュレーディンガー方程式

物理量

$$\hat{H} \Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \implies \langle \hat{O} \rangle = \frac{\int d\mathbf{R} \Psi^*(\mathbf{R}) \hat{O} \Psi(\mathbf{R})}{\int d\mathbf{R} \Psi^*(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{R})} \equiv \frac{\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Pauli原理の条件下で解く $\Psi_n(\dots \mathbf{r}_i, \dots \mathbf{r}_j, \dots) = -\Psi_n(\dots \mathbf{r}_j, \dots \mathbf{r}_i, \dots)$

「複雑すぎて解くことができない / Dirac (1929)」



変分原理 「より低いエネルギーを与える扱いの方が、より厳密である」

① 波動関数理論

$$\frac{\delta E[\Psi]}{\delta \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} = 0$$

Ψ : 多電子波動関数

② 密度汎関数理論

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = 0$$

n : 一電子密度

③ 標準的多体論

$$\frac{\delta E[G, G^0]}{\delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon)} = 0$$

G : 一電子Green関数

fundamentals in *ab initio* calculation

quant. mech. $\hat{H}\Psi(R) = E\Psi(R)$
 $R = (r_1, \dots, r_N)$ $\Rightarrow$ $\delta E[\Lambda]/\delta\Lambda = 0$ Origin of *ab initio* calculation
variational principle

exact solution

Hohenberg-Kohn theory

many body wavef(3N dim.)

$$\delta E[\Psi]/\delta\Psi(R) = 0$$

quantum chemistry

$$\Psi_{HF}(R) \approx |\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)|$$

HF, CI

ab initio Monte Carlo method

Variational Monte Carlo (VMC) method

Diffusion Monte Carlo (DMC) method

Charge density(3 dim.)

$$\delta E[n]/\delta n(r) = 0$$

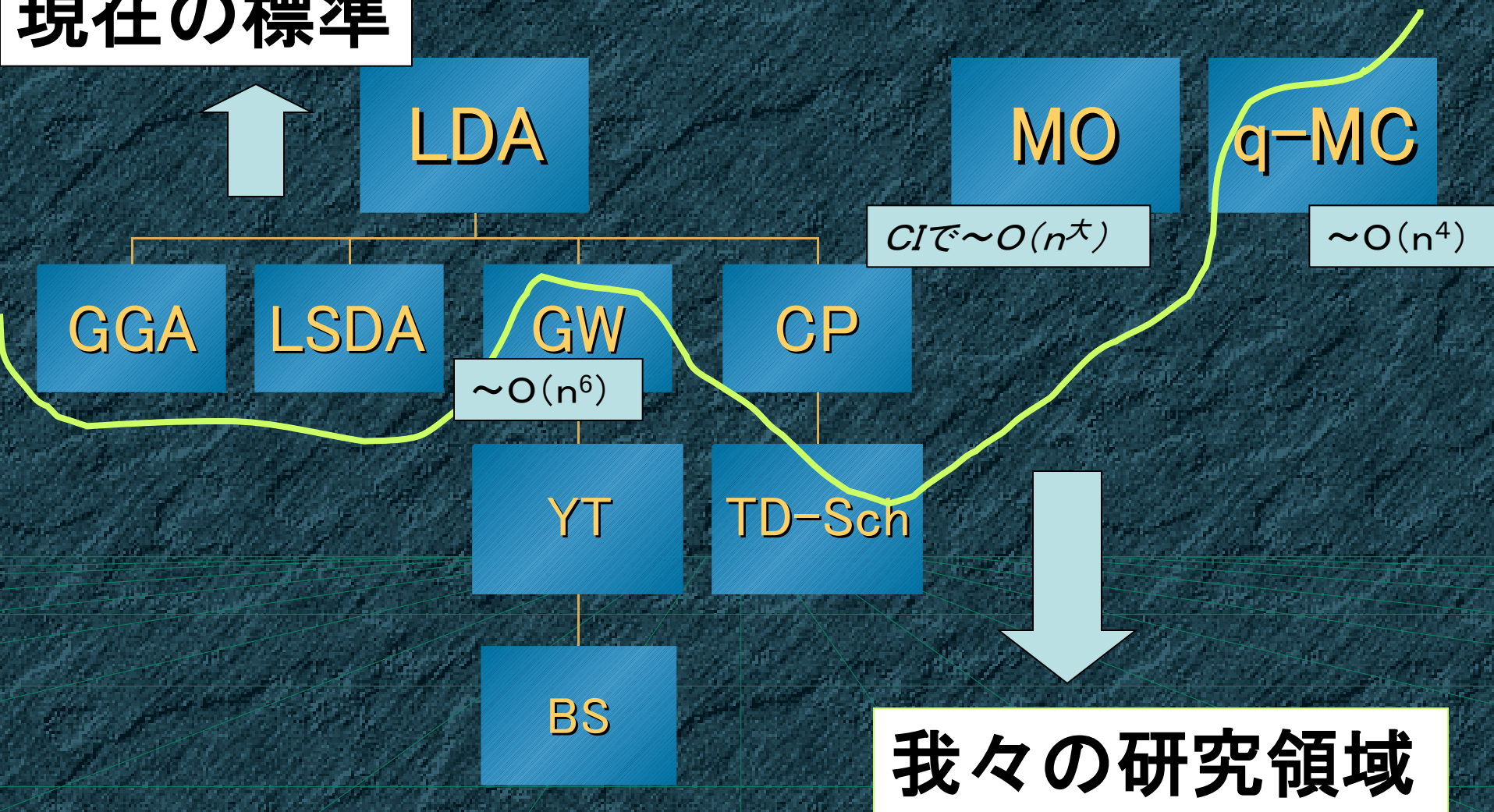
density functional theory

Exchange-correlation pot. Not known

LDA, GGA

Classification of ab initio methods

現在の標準



局所密度近似を超えた理論

超伝導体

相関が強い???

どのレベルまで近似を
上げるかで解決！

強相関系

p-h相互作用

GW近似

光反応断面積

band gap値

系の全エネルギー極小化だけで 良いか？

系の全エネルギー極小だけでは不足
必要条件＝ビリアル定理



ビリアル定理から、 T と V は自由ではない！

$$2T + V = 3P\Omega$$



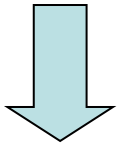
充分条件＝精密に解く・・・

第一原理計算法

- 全エネルギー計算＋ビリアル定理
原子構造最適化、電子状態
- 相関算定
自由エネルギー、クラスター変分法
- フォノン分散算定
振動モード、直接法、熱振動
- 電子伝導計算
二体グリーン関数
- ハイブリッド計算
格子力学、分子動力学

分子は原子の集合？

- 物質は原子が集合して出来ている=Ok
- では・・・
- 分子の電子状態＝原子の電子状態の和？



- No ! ! !
- 1920年代の量子力学発見当時は、厳密な数値計算は不可。電子の交換相互作用で理解しようとした。→ 間違い！

第一原理計算とは言うけれど！

- 化学：ハートリー・フォック法＋配置間相互作用法CI
 - 精度を上げるには計算量が膨大 $O(n^{12})$
- 物理：密度汎関数法DFT＋局所密度近似LDA
 - 粒子数増大でも $O(n^3)$ 程度



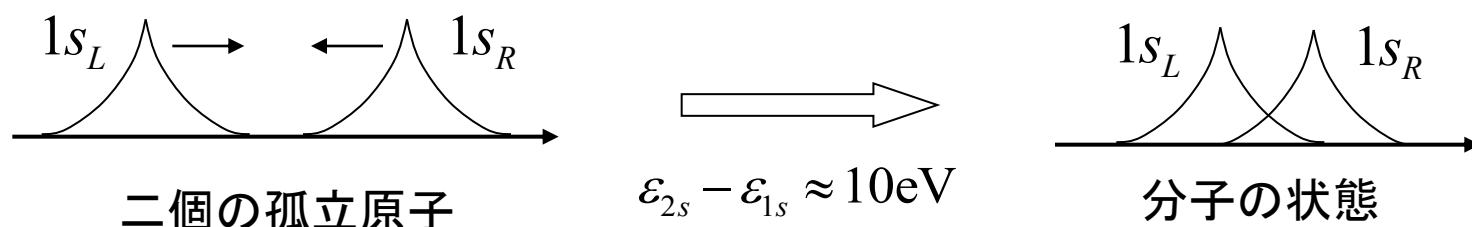
- DFT利用の一般化



- 問題点は？
 - 実験のパラメーターは使わないが近似は沢山！
 - そもそも電子の交換相関相互作用が分からない！
 - 近似レベルによる限界あり：縮退なしの基底状態のみが対象

水素分子の化学結合

水素分子結合に対する従来の2つの説明
ハイトラー・ロンドン法と最小基底分子軌道法



ハイトラー・ロンドン(HL)法

$$\Psi_{HL}(1,2) \propto 1s_L(1)1s_R(2) + 1s_L(2)1s_R(1)$$

電子の棲み分け

最小基底分子軌道(MO)法

$$\Psi_{MO}(1,2) \propto (1s_L(1) + 1s_R(1))(1s_L(2) + 1s_R(2))$$

1s軌道の結合状態

結合エネルギー	実験値	HL	MO
$-\Delta E / \text{eV}$	4.747	2.48	2.88

何れも水素原子の1s軌道のみ用いる近似
→実は分子結合の本質を記述していない！

ビリアル定理による分子形成条件の検証

精度の問題ではなく、正負が逆

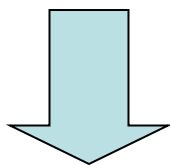
(eV)	条件	HL	MO	HF	DMC	実験値
ΔE	負	-2.48	-2.88	-3.63	-4.75	-4.75
ΔT	正	-5.01	-4.22	3.63	4.8(1)	絶対値で一致
ΔV	負	2.53	1.33	-7.27	-9.6(1)	
$-\Delta V / \Delta T$	2	0.5	0.3	2.0	2.0(1)	

水素原子の1s軌道のみ用いた従来の分子結合の説明は
ビリアル定理に反している：空間次元の問題なので本質的な誤り

分子結合を運動エネルギーの低下で誤って解釈している

磁性の正しい解釈

- 電子間交換相互作用？
- これは、電子が同一粒子であることに驚いた当時の解釈・・・
- 磁性の本質＝ハイゼンベルグ模型？交換項は小さいので、間違い！



- 電子と原子核の作る量子クーロン多体系に対する精密数値計算！
- 原子核に電子が近づける最適スピン状態＝磁性
- 評価基準：ビリアル定理→数値計算の品質保証

原子の定常状態

Russell-Saunders結合の場合

LS項

$2S+1$

L

縮重度 : $(2S+1) \times (2L+1)$

例) p^2 配置にフント則を適用した場合



$$E(^3P) < E(^1D) < E(^1S)$$

第1則

第2則

Hundが量子力学の誕生以前に

分光実験により見出した経験則

Prof. F. Hund

Z. Physik. 33, 345 (1925)

● フント第一経験則: 同一電子配置から生じるLS項において
全スピン角運動量 S のより大きな項が、より安定である。

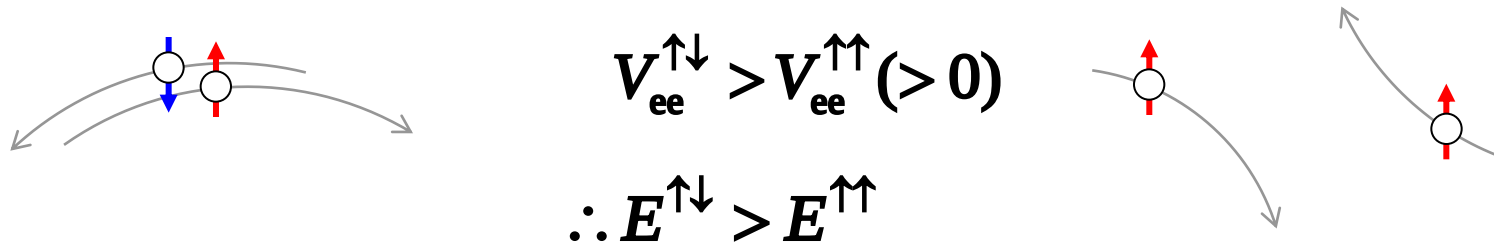
→ 多くの教科書で交換エネルギー利得による伝統的解釈を踏襲している

● フント第二経験則: 同じ S の項が2つ以上ある場合には
全軌道角運動量 L のより大きな項が、より安定である。

→ 多くの教科書で、第一則と比べると、あまり説明されていない

原子・イオン(第一、第二則)や分子(第一則)の基底および
低励起状態の 相対的安定性(第三経験則)についても幅広く成立する。

教科書におけるフント第一則の伝統的な説明


$$V_{ee}^{\uparrow\downarrow} > V_{ee}^{\uparrow\uparrow} (> 0)$$
$$\therefore E^{\uparrow\downarrow} > E^{\uparrow\uparrow}$$

平行スピン電子間には、**Pauliの排他原理**が働くため電子間距離は隔てられ電子間のクーロン斥力を、より少なく感受するためにエネルギーが低下する



J. C. Slater, Phys. Rev. **34**, 1293 (1929).

“THE THEORY OF COMPLEX SPECTRA”,

「電子間相互作用を一次摂動として扱うことでフント則の成立要因は、交換エネルギーによって説明できる。」

Prof. J. C. Slater

スレーターの摂動論による解釈

交換エネルギー利得によるフント則の摂動論解釈

J.C.Slater (1929)**

異なるスピン状態に
同一の電子軌道を仮定

スピンを揃えることにより、
交換エネルギー $2K_{12}$ の分だけ、
電子間斥力エネルギーが低下する

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ -\frac{1}{2} \Delta_i \right\} - \sum_i \frac{Z}{r_i} + \frac{1}{r_{12}} \quad E^{\uparrow\downarrow} = -2K_{12} < 0$$

(exchange energy)

$$E^{\uparrow\downarrow} = \langle \Phi^{\uparrow\downarrow} | \hat{H} | \Phi^{\uparrow\downarrow} \rangle = h_{11} + h_{22} + J_{12} + K_{12}$$

$$E^{\uparrow\uparrow} = \langle \Phi^{\uparrow\uparrow} | \hat{H} | \Phi^{\uparrow\uparrow} \rangle = h_{11} + h_{22} + J_{12} - K_{12}$$

** J. C. Slater, Phys. Rev. **34**, 1293 (1929)

同一の運動エネルギー T

同一の原子核電子間引力エネルギー V_{en}

この仮定は定量的に間違っていた！

炭素原子のフント則:伝統的解釈とVirial定理に基づく解釈の比較

全エネルギー E の値はほとんど変わらないが、フント則の成立要因が全く異なる。



近似試行波動関数としては少々精度が悪くても、それなりの E の値を与える

→ 伝統的解釈は、 ΔE が ΔV_{ee} に押付けられた結果、誤った解釈を与えた

伝統的解釈 : $-\Delta V/\Delta T = \infty$ $\longleftrightarrow$ Virial定理に基づく解釈 : $-\Delta V/\Delta T = 2.000000$

伝統的なフント則解釈 : 3P 項について最適化した軌道関数を 1D , 1S 項へ適用

State	E	V_{en}	V_{ee}	T	$-V/T$
C (3P)	-37.6886	-88.1369	12.7596	37.6886	2.0000
C (1D)	-37.6302		12.8180		1.9985
C (1S)	-37.5426		12.9056		1.9961

Virial定理に基づくフント則解釈 : 3P , 1D , 1S 項の各々について軌道関数を最適化

State	E	V_{en}	V_{ee}	T	$-V/T$
C (3P)	-37.6886	-88.1369	12.7596	37.6886	2.000000004
C (1D)	-37.6313	-87.9910	12.7283	37.6313	2.000000004
C (1S)	-37.5496	-87.7662	12.6670	37.5496	2.000000004

物性値の絶対値算定例

TOMBO=TOhoku Mixed-Basis Orbitals *Ab Initio* Program Package (大野, Sluiter...)

• 全電子混合基底法

- 混合基底波動関数(原子軌道+平面波)
 - 少ない基底数で、精密な状態表現可能
 - 散乱状態が記述できる; 原子軌道だけでは不可。
- 完全構造緩和可能
 - 局所構造緩和を超えた分子動力学法: FLAPWでは不可。
- 系の全エネルギーの絶対値算定可能
- より高度な定式化のプログラム化

• +GW近似

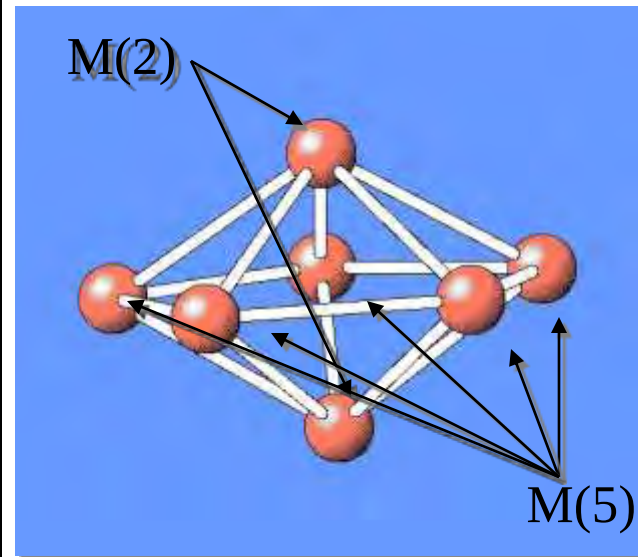
• +ベレーテ・サルペータ方程式

• +熱伝導、電子伝導

Hyperfine results for clusters

cluster	Method	M(2)	M(5)
Li ₇	AEMB	100.0	5.1
	Exp.	101.8	6.13
Na ₇	AEMB	325.5	16.7
	Exp.	330.0	18.6
K ₇	AEMB	85.9	3.1
	Exp.	85.5	5.0
Cu ₇	AEMB	1735.0	51.7
	Exp.	1747	54
Ag ₇	AEMB	623.9	21.7
	Exp.	685.0	25.0

Values are in MHz



Structure of clusters.
Pentagonal bipyramid
 D_{5h}

M. S. Bahramy et. al., Phys. Rev. B. 73, 045111 (2006).

Experimental data from:

D. A. Garland et al., J. Chem. Phys. 80, 4761 (1984); G. A. Thompson et al., J. Chem. Phys. 78, 5946 (1983);

R. Arratia-Perez et al., Chem. Phys. Lett. 397, 408 (2004); S. B. H. Bach et al., J. Chem. Phys. 87,896 (1987).

GW近似

Election self-energy in the first order perturbation

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' e^{i\omega' \eta} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \omega + \omega') W(\mathbf{r}, \mathbf{r}' ; \omega)$$

Here G and W are Green's function and dynamically screened Coulomb interaction, respectively. ω' denotes frequency and η a positive infinitesimal. W is represented by dielectric response function ε and bare Coulomb interaction v .

All-electron *ab initio* GW calculation to estimate for C₆₀

Ionization potential, electron affinity in absolute values and obtained the HOMO-LUMO gap of C₆₀ exactly

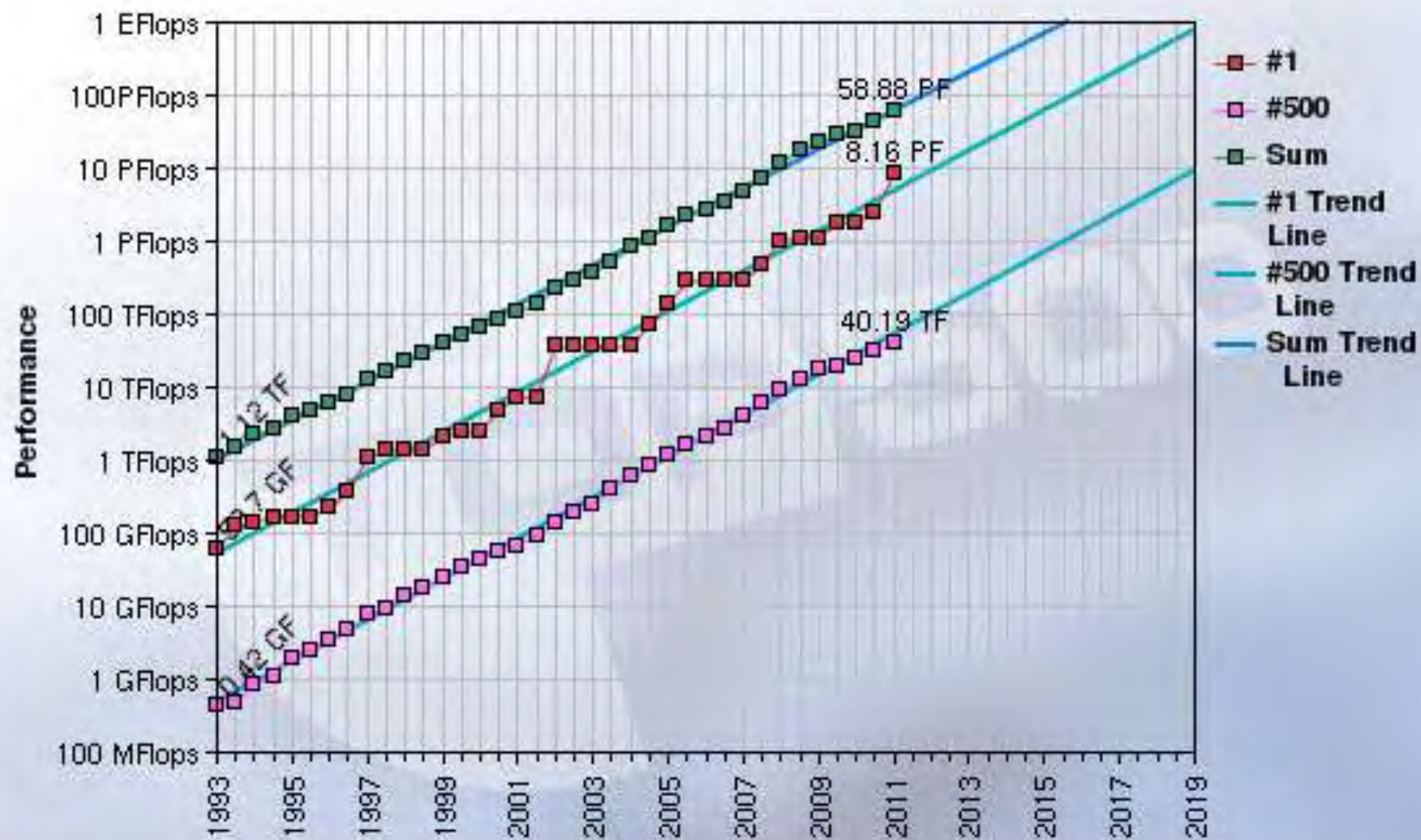
(eV)	$\langle \mu_{xc} \rangle$	$\langle H^{LDA} \rangle$	$\langle \Sigma_x \rangle$	$\langle \Sigma_c \rangle$	E^{calc}	E^{exp}
HOMO	- 14.06	- 6.61	- 14.90	0.0 ± 1.0	- 7.5 $\pm$ 1.0	- 7.6 ^a
LUMO	- 11.18	- 5.26	- 7.80	$- 0.7 \pm 1.0$	- 2.6 $\pm$ 1.0	- 2.6 ^b

Ishii, Ohno, Adachi, and
Kawazoe

ビリアル定理を満たすか否かで評価した理論

Theory	Virial theorem
Hatree-Fock	◎
Density Functional Theory	○
Heitler-London Model	×
Slater's Perturbation Theory	×
Hubbard Model	×
Qunatum Monte Carlo	○
Hatree-Fock with Conf. Int.	○
Bardeen-Cooper-Shreefer	○
LDA+U	△

Projected Performance Development



現在のトップ10

- K-computer 神戸理研次世代スパコン Sparc64
- 天河一号A 中国天津国立スパコンセンター GPU
- Jaguar 米国オークリッジ国立研究所 Cray Opteron
- 星雲 中国深圳国立スパコンセンター GPU
- TSUBAME 東京工業大学 HP GPU
- Cielo ロスアラモスDOE Cray
- Pleades NASA エイムズ研究センター SGI Altix
- Hopper 米国DOE Cray
- Tera-100 フランス国原子力庁 Bull
- Roadrunner 米国ロスアラモス国立研究所 IBM

1993年から1位を獲得したシステム

- 富士通 K-computer 神戸理研次世代スパコン ([日本](#), 2011.6 -)
- [NUDT 天河一号A](#) ([中国](#), 2010.11 -)
- [Cray Jaguar](#) ([アメリカ合衆国](#), 2009.11 - 2010.11)
- [IBM Roadrunner](#) ([アメリカ合衆国](#), 2008.06 - 2009.11)
- IBM [Blue Gene/L](#) ([アメリカ合衆国](#), 2004.11 - 2008.06)
- [NEC 地球シミュレータ](#) ([日本](#), 2002.06 - 2004.11)
- IBM ASCI White ([アメリカ合衆国](#), 2000.11 - 2002.06)
- [Intel ASCI Red](#) ([アメリカ合衆国](#), 1997.06 - 2000.11)
- [日立 CP-PACS](#) ([日本](#), 1996.11 - 1997.06)
- 日立 SR2201 ([日本](#), 1996.06 - 1996.11)
- [富士通 数値風洞](#) ([日本](#), 1994.11 - 1996.06)
- Intel Paragon XP/S 140 ([アメリカ合衆国](#), 1994.06 - 1994.11)
- 富士通 [数値風洞](#) ([日本](#), 1993.11 - 1994.06)
- TMC [CM-5](#) ([アメリカ合衆国](#), 1993.06 - 1993.11)

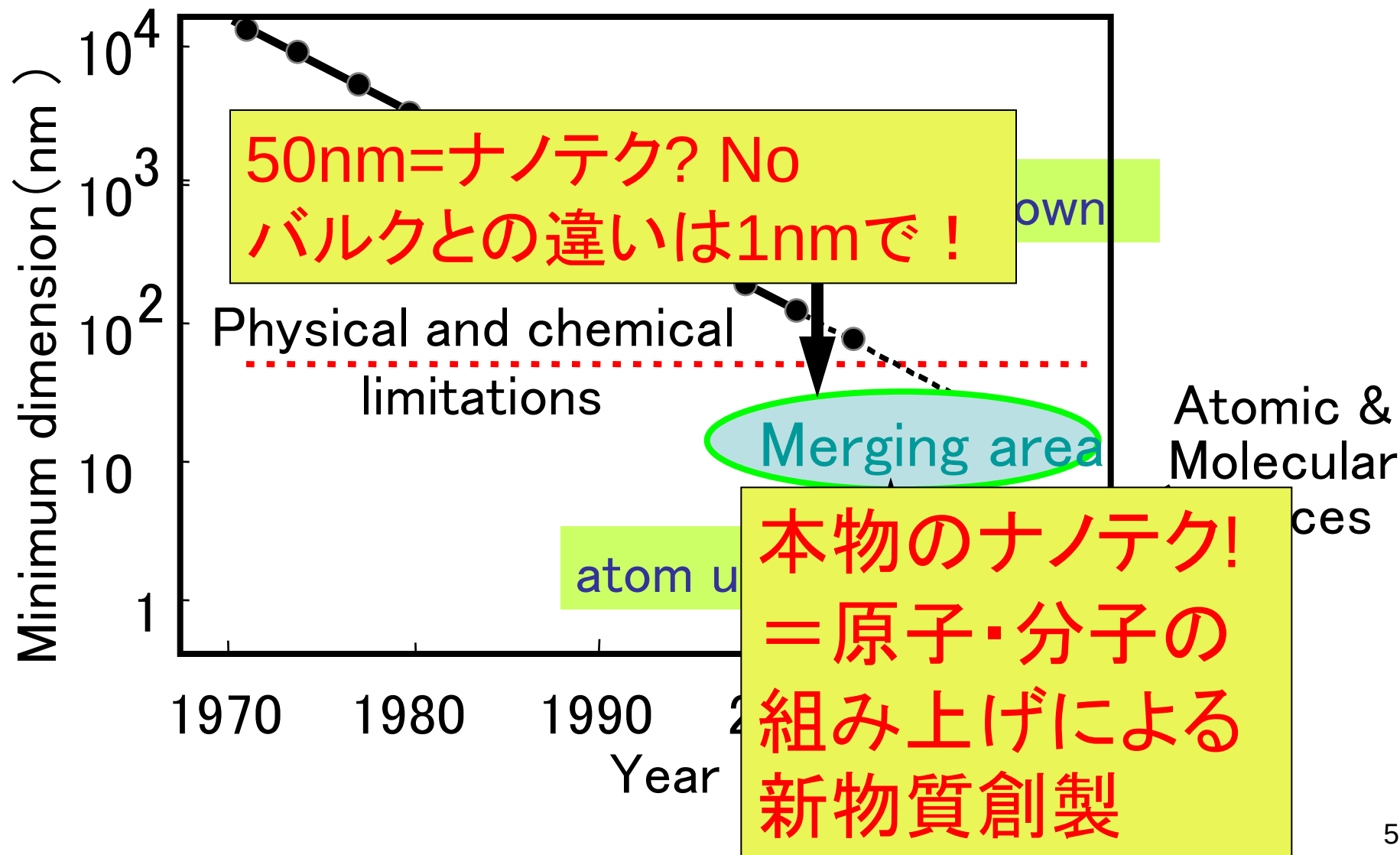
ES産業利用への進言

- 松：新理論構築・新手法計算による予言・予測に基づく、抜本的新産業創製
- 竹：既存の理論計算手法に基づく、新規装置、材料創製
- 梅：実験結果の解釈のためのシミュレーション計算



- 基盤：ベクトル化、並列化によるES利用率向上

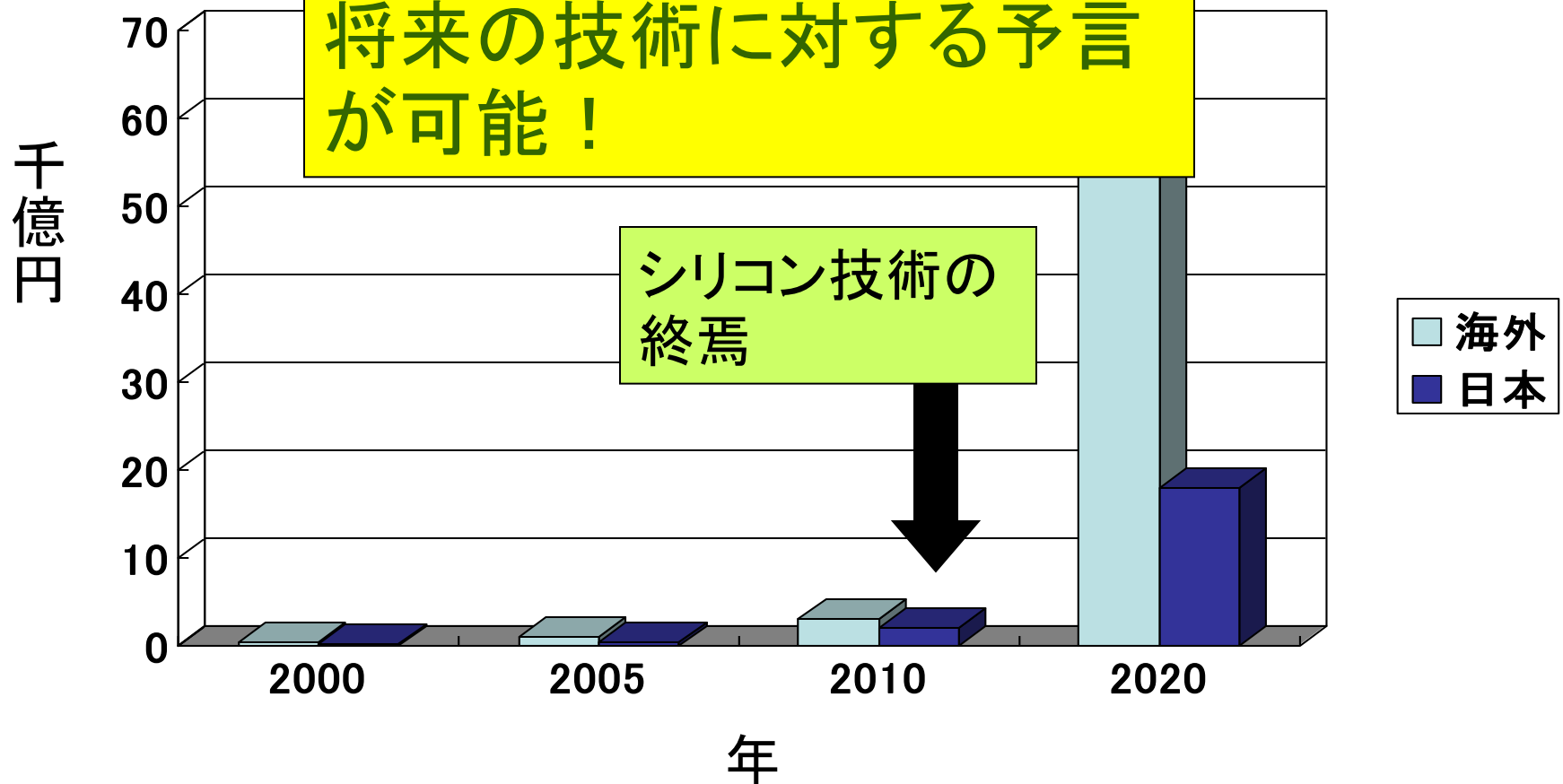
例題：半導体デバイスの進展



量子デバイスの市場予測

日本経済新聞

シミュレーション計算では
将来の技術に対する予言
が可能！



現状のスパコンとソフトで良い？

20世紀で基礎は完成で21世紀は応用の時代？
→全く違った状況！

スパコンの速さ: TFLOPS、メモリー=TBで良い？→精密計算では100電子、近似第一原理計算で1000原子
新物質設計には: 全くパワー不足！

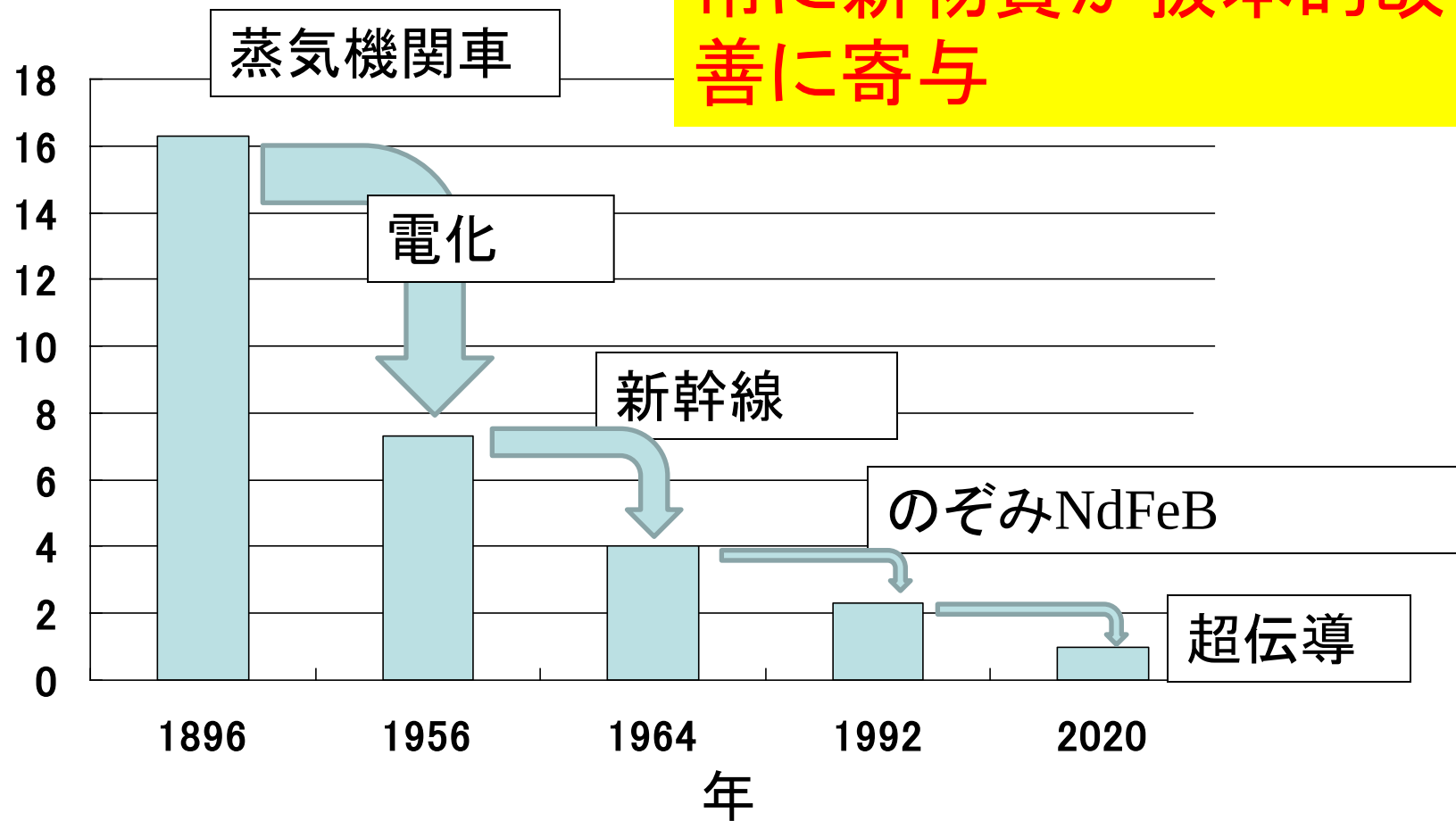
DyフリーNdFeB磁石の理論設計を可能とする！

ソフトウェア: 標準第一原理計算では基底状態のみ。発光波長等算定や多結晶の実用材料設計を可能とする！

ESへの期待: 現状の正しい理解が必須

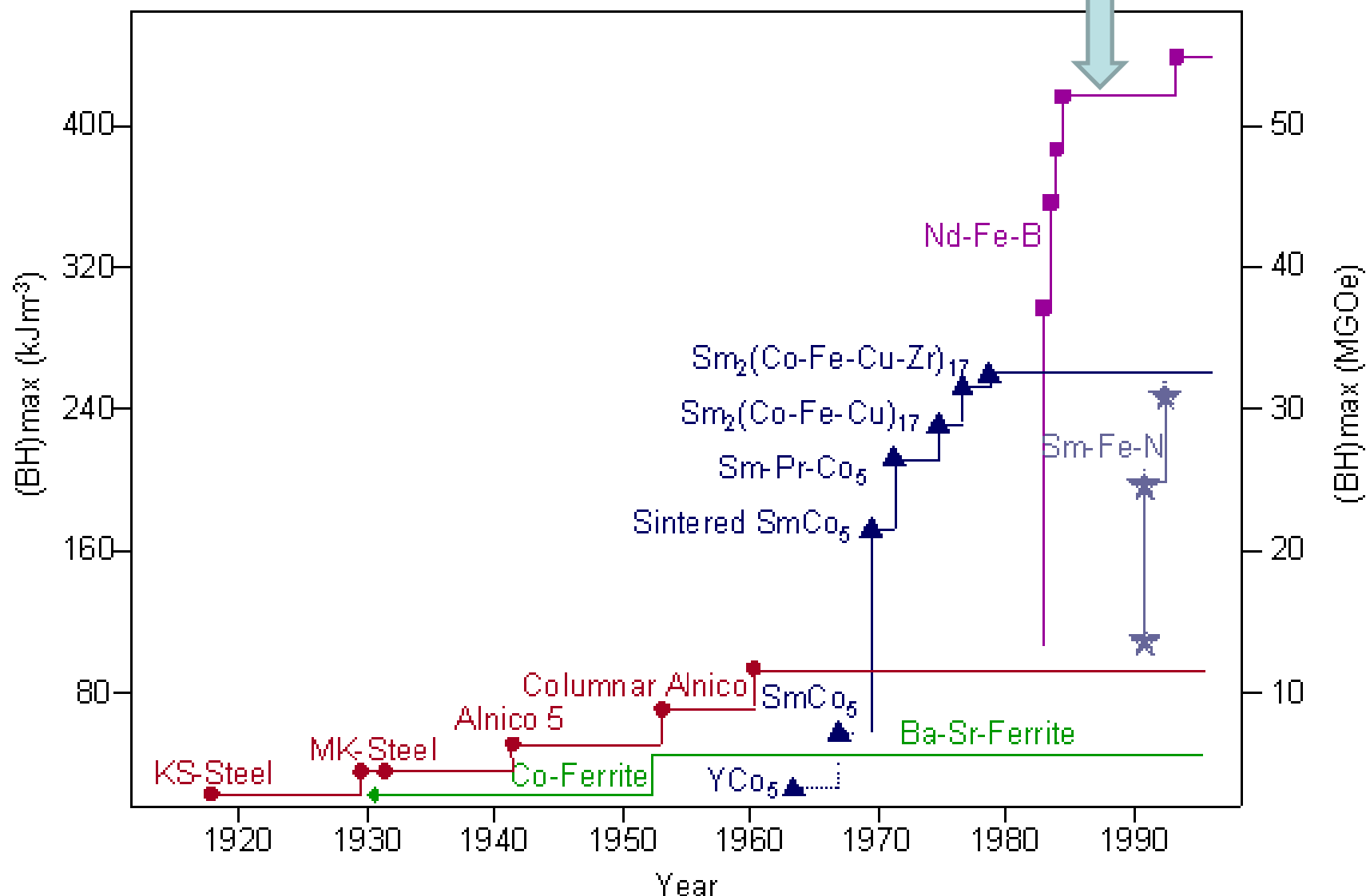
東京・大阪間の所要時間

時間



永久磁石の強度

25年間、抜本的な進展がない・・・ESの出番！



まとめ

- 基礎の基礎からの再認識
- 常識に問題があることの理解と、理論計算の品質保証の必要性（実験と合わなければ実験に問題があると言えるレベルの計算をする！）



- 説明する→予言可能理論へパラダイムシフト
そのためには、必要条件と十分条件を検証



ES産業利用の成功は・・・

他では出来ない、独自の手法と対象物で勝負！