

附属計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science

「富岳」スーパーコンピュータに代表される近年の計算機の発展に伴って、大規模計算や網羅計算による物質科学へのアプローチが盛んである。コンピュータを利用した精密な物性予測によって、磁性体・超伝導における量子臨界現象など物性物理学の基礎的な問題から、半導体デバイス設計や燃料電池における電極反応など近い将来産業応用に結びつくことが期待される応用問題に至るまで、広い範囲において重要な成果が挙げられている。本センターは、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトや「富岳」プロジェクトなどを担う拠点として、「富岳」や物性研究所共同利用スパコンを始めとする計算資源の活用を通じて、これらの課題に組織的に取り組んでいる。さらに、コミュニティソフトウェア開発・普及のためのサイト MateriApps の開発・運用と博士課程人材の育成のために計算物質科学高度人材育成・産学マッチングプログラム (MP-CoMS) を進めている。

As symbolized by the Fugaku computer, massively parallel and exhaustive computation is actively used for solving problems in materials science in recent years. In fact, computer-aided science has been providing answers to many problems ranging from the most fundamental ones, such as critical phenomena in quantum magnets, superconductors, and superfluids, to the ones with direct industrial applications, such as semiconductor devices and electrode chemical reactions in batteries. Due to the recent hardware trends, it is now crucial to develop a method for breaking up our computational task and distribute it to many computing units. In order to solve these problems in an organized way, we, as the major contractor of several national projects such as Fugaku Computer Project and the DxMT project, coordinate the use of the computational resources available to our community, including Fugaku and ISSP supercomputers. In addition, we also operate the web site, MateriApps, which offers easy access to various existing codes in materials science, and in order to develop human resources for the doctoral program, we promote the Advanced Human Resource Development and Industry-Academia Matching Program for Computational Materials Science (MP-CoMS).

センター長 尾崎 泰助
Leader OZAKI, Taisuke
