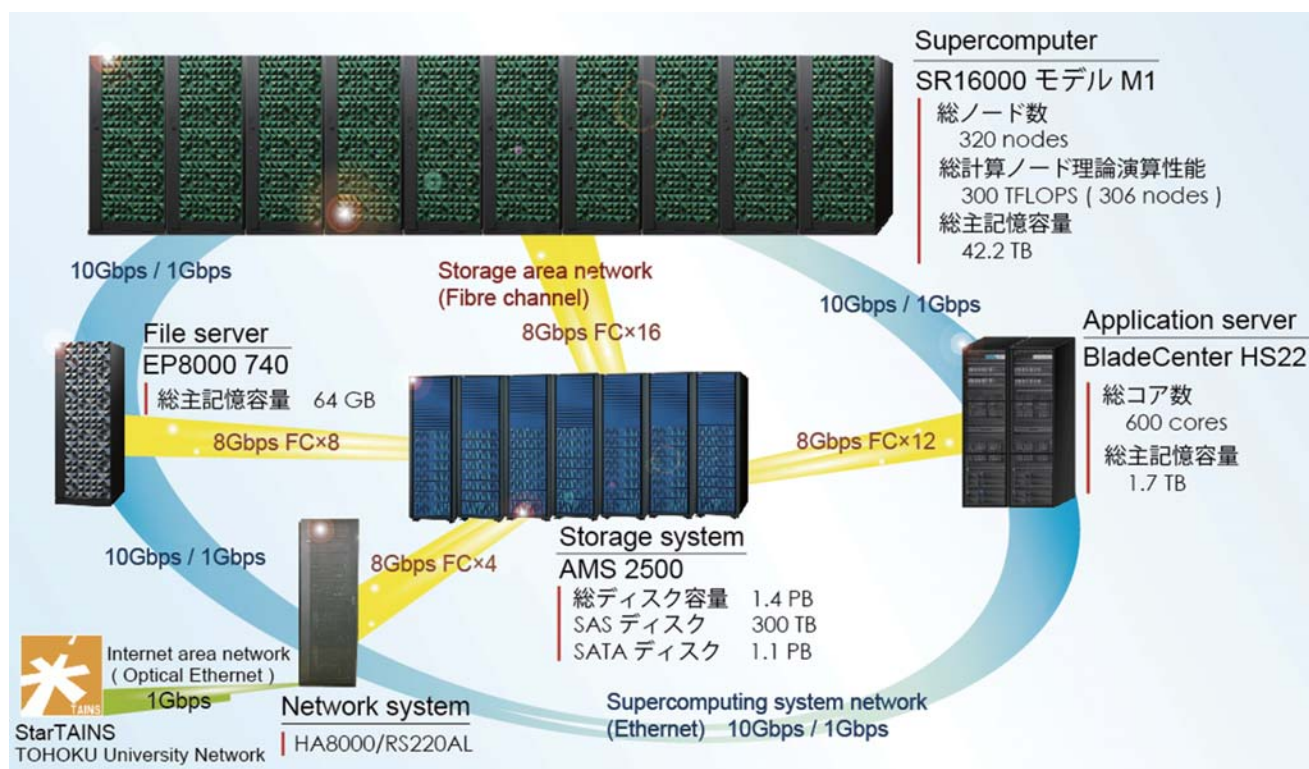


計算材料学センター

計算材料学センターで何ができるか

物質が持つ無限の可能性を引き出すためには、電子や原子の振る舞いを明らかにし、さらに種々の欠陥が織りなす内部組織、微細組織の構造と発展過程を明らかにする必要があります。これらは、基礎方程式群をいろいろな条件のもとで解くことで可能となりますが、高い精度で解を求めるためには、高速で大きな記憶容量を有するスーパーコンピュータシステムの使用が必須です。本センターでは、下図に要約するスーパーコンピュータとアプリケーションサーバー、ストレージシステムを利用することで、超並列計算や大規模計算を行うことができます。又、材料科学に特徴的な多くの汎用プログラム群にもアクセスすることが可能です。さらに、専門の技術職員が、センターへのアクセスの仕方からプログラムのチューニングまで懇切で丁寧なサポートを行っています。



スーパーコンピューティングシステム概要図

これまでの実績

平成 21 年度より本研究所スーパーコンピューティングシステムを利用するためには、①本センターの共同利用研究または②研究部共同研究に応募し、スーパーコンピューターの課題として採択されることが必須となりました。又、平成 24 年度より、CMSI(Computational Materials Science Initiative) のメンバーにも CPU 資源の 20% までを③「CMSI 利用枠」として供出しています。平成 27 (26) 年度には、①の採択課題が 23 件 (27 件)、②が 3 件 (6 件)、③が 5 件 (但し、本稿執筆段階での申請件数) (9 件) でした。ユーザー総数は約 150 名で、本センターの一つの特徴は外国人ユーザーの数が多いことです。又、スーパーコンピューティングシステムを利用した研究成果は、「スーパーコンピューティングシステム利用研究成果報告書」として毎年発行しています。