

プロフィール

信定 克幸(のぶさだ かつゆき)

【現職】

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

【略歴】

1991年 東北大学理学部 卒業

1995年 東京大学大学院理学系研究科博士課程 中退

1995年 分子科学研究所 理論研究系 助手

1999年 北海道大学理学部 助手

2004年 分子科学研究所 准教授

専門： 理論分子物理学、理論化学

分野内の個別分野間連携の現状と課題

分野2: 計算物質科学イニシアティブ

(CMSI: Computational Materials Science Initiative)

<http://www.cms-initiative.jp/ja>

現状

★ CMSI研究会

物性、分子、材料のCMSI課題が一堂に会した、分野内個別分野連携の会議
(特徴) 異なる分野に属する物性、分子、材料メンバが評価委員を選出し、相互評価し、課題をより良くする取り組み
2011年度は東北大学金属材料研究所にて開催

★ CMSI若手技術交流会

分野横断型の若手交流会(CMSI拠点研究員は参加必須)
(趣旨) 計算機を使いこなして超並列計算を利用した研究を促進するという共通目標の下で、分野間連携を行う
2011年度は5回開催
拠点研究員制度の詳細: CMSI広報誌TORRENTの3号の記事を参照
<http://www.cms-initiative.jp/ja/torrent/k61foj/lzu1g9>

★ CMSIアプリケーション作業部会、「京」利用情報交換会など

今後の課題

- 1) 第1部会(基礎的科学)と他の課題との連携
- 2) 元素戦略のような国家重要課題に対して、分野を超えた連携で課題検討していく体制を整える

戦略分野間連携の現状と課題

現状

★ 分野2×分野5 異分野交流研究会

共通する基礎概念や計算アルゴリズムを題材に研究相互交流

・2011年度 「量子系の固有値問題と大規模計算」(筑波大学)

・2012年度も開催決定 今回のテーマは「量子モンテカルロ計算」

詳細は、http://cms-initiative.jp/ja/news/20120530_hpci2x5_news

★ 生体科学関連で分野1との情報交換

★ 広報情報連絡会

5分野連携の情報交換

今後の課題

- 1) 異分野交流研究会を分野5以外にも広げることができるのか？
- 2) 研究者個人レベルでの分野間協力研究等を支援するための環境整備

計算機科学分野との連携の現状と課題

現状

★ アプリケーション作業部会

アーキテクチャ作業部会との共同で白書を作成し、FSを立ち上げ
ペタからエクサへのシームレスな流れ

★ ゴードン・ベル賞で最高性能賞

「シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算」 アプリ名: RSDFT
ハイ・パフォーマンス・コンピューティング(高性能計算技術)に関する
国際会議SC11

★ 科研費新学術領域研究

コンピューティクスによる物質デザイン -複合相関と非平衡ダイナミクス-
領域代表: 押山 淳 教授 (東京大)

今後の課題

1) アーキテクチャ作業部会との共同FSは非常に有用
今後の継続が重要

2) 研究者個人レベルでの計算機科学分野との連携を組織として支援する体制、
またその窓口の役割