

物理学研究連絡委員会報告

—物性研究専用の大型計算機システムの導入について—

平成3年2月22日

日本学術会議

物理学研究連絡委員会

この報告は、第14期日本学術会議物理学研究連絡委員会の審議結果を
取りまとめて発表するものである。

- 委員長 久保 亮五 (慶応義塾大学理工学部教授)
- 幹事 蟻川 達男 (東京農工大学工学部教授)
- 川村 清 (慶応義塾大学理工学部教授)
- 小沼 通二 (慶応義塾大学経済学部教授)
- 委員 荒木 不二洋 (京都大学数理解析研究所教授)
- 荒船 次郎 (東京大学宇宙線研究所長)
- 有馬 朗人 (日本学術会議第4部会員, 東京大学長)
- 安藤 正海 (高エネルギー物理学研究所教授)
- 飯泉 仁 (日本原子力研究所企画室次長)
- 池上 栄胤 (大阪大学核物理研究センター長)
- 石井 武比古 (東京大学物性研究所教授)
- 市川 芳彦 (名古屋大学核融合科学研究所教授)
- 岩田 正義 (高エネルギー物理学研究所教授)
- 江尻 宏泰 (大阪大学理学部教授)
- 遠藤 祐久 (京都大学理学部教授)
- 太田 周 (宇都宮大学教育学部教授)
- 角谷 典彦 (大阪大学基礎工学部教授)
- 梶川 良一 (名古屋大学理学部教授)
- 糟谷 忠雄 (東北大学理学部教授)
- 勝木 渥 (信州大学理学部教授)
- 金森 順次郎 (大阪大学理学部教授)

- 上坪 宏道 (理化学研究所主任研究員)
上村 洸 (東京大学理学部教授)
菊池 健 (高エネルギー物理学研究所副所長)
木村 嘉孝 (高エネルギー物理学研究所教授)
際本 泰士 (筑波大学プラズマ研究センター助教授)
金原 粲 (東京大学工学部教授)
小林 俊一 (東京大学理学部教授)
小林 農作 (京都大学理学部教授)
斎藤 信彦 (早稲田大学理工学部教授)
佐藤 清雄 (富山大学理学部教授)
清水 忠雄 (東京大学理学部教授)
菅原 寛孝 (高エネルギー物理学研究所長)
鈴木 洋 (上智大学理工学部教授)
鈴木 増雄 (東京大学理学部教授)
高田 誠二 (北海道大学理学部教授)
高松 邦夫 (高エネルギー物理学研究所教授)
高見 穎郎 (神奈川大学工学部教授)
高柳 和夫 (日本学術会議第4部会員, 東京大学名誉教授)
宅間 宏 (電気通信大学新形レーザー研究センター教授)
伊達 宗行 (日本学術会議第4部会員, 大阪大学理学部教授)
田中 茂利 (京都大学理学部教授)
玉垣 良三 (京都大学理学部教授)
恒藤 敏彦 (京都大学理学部教授)
豊沢 豊 (中央大学理工学部教授)

- 中井 浩二 (高エネルギー物理学研究所教授)
- 長岡 洋介 (京都大学基礎物理学研究所長)
- 中嶋 貞雄 (日本学術会議第4部会員, 東海大学理学部教授)
- 長島 順清 (大阪大学理学部教授)
- 中村 輝太郎 (東海大学工学部教授)
- 並木 美喜雄 (早稲田大学理工学部教授)
- 西川 哲治 (日本学術会議第4部会員, 東京理科大学長)
- 西村 純 (宇宙科学研究所長)
- 橋本 英典 (法政大学工学部教授)
- 長谷川 博一 (大阪産業大学理学部教授)
- 早川 幸男 (名古屋大学長)
- 平田 邦男 (山梨大学教育学部教授)
- 藤井 忠男 (東京大学名誉教授)
- 藤田 敏三 (広島大学理学部教授)
- 藤村 淳 (横浜国立大学教育学部教授)
- 藤本 陽一 (早稲田大学理工学研究所教授)
- 前川 純一 (神戸大学工学部教授)
- 益川 敏英 (京都大学理学部教授)
- 丸森 寿夫 (筑波大学物理学系教授)
- 丸山 瑛一 (㈱日立製作所基礎研究所長)
- 三間 圀興 (大阪大学レーザー核融合研究センター教授)
- 三宅 三郎 (神奈川大学工学部教授)
- 守谷 亨 (東京大学物性研究所長)
- 藪崎 努 (京都大学理学部助教授)

- 山口 嘉夫 (東海大学理学部教授)
- 山崎 敏光 (東京大学原子核研究所長)
- 山田 鏑二 (岐阜大学教養部教授)
- 山田 安定 (東京大学物性研究所教授)
- 禅 素英 (横浜国立大学工学部教授)
- 和達 三樹 (東京大学理学部教授)

－物性研究専用の大型計算機システムの導入について－

物理学研究連絡委員会は、我が国の物性研究における計算機設備の現状についてかねてから深い関心を持ち検討を重ねてきたが、このほど次のような意見の一致を得たので、これを取りまとめ報告する。

物性物理学における計算機を利用した研究の比重は年々増加の一途をたどっている。特に、スーパーコンピュータの出現以来、それを駆使しての研究は実験物理、理論物理と並ぶ計算物理として自律的發展を遂げるようになり、物性物理学における多方面の困難な問題の研究に重要な貢献をしてきた。計算物理の重要性は今後一層増大することが期待され、その飛躍的發展を図ることは、物性物理学はもとより、その関連分野の研究に重要な寄与を果たすものと思われる。一方、我が国においては物性物理学の分野では、他の分野と比較しても研究者の利用できる計算機資源が乏しく、とてもこうした期待に応えるものではない。近年急速に増大する需要に応じて、この分野で我が国が新生面を切り開いてゆく土壌を培うために、物性研究専用のスーパーコンピュータを導入すべきであるとの意見が、全国の多くの物性物理研究者から寄せられている。

物理学研究連絡委員会としては、全国の物性物理研究者の要望に応じて検討を重ねてきたが、全国のこの分野の研究者が共同で利用できるシステムが必要であるという観点から、全国共同利用の研究所である東京大学物性研究所が物性研究専用のスーパーコンピュータの導入場所として最も適しているとの判断に達した。

現在、東京大学物性研究所では、物性研究専用スーパーコンピュータを核

とした大型計算機システム導入計画が進められており、この計画は我が国の物性物理学の分野の計算機事情を抜本的に改善するものと期待され、計算物理の進展、ひいては広く基礎科学の進展に極めて大きな意義を持つと考える。

(説明)

物性物理での計算機を利用したアプローチの比重はここ10年ほどの間に急速に高まってきた。特に、酸化物高温超伝導体などの相互作用の強い量子系、スピングラスなどのランダム系、秩序形成過程等に見られる非平衡現象、生体を頂点とする種々の非線型動力学系などの研究におけるその重要性はますます増大し、概念形成、矛盾する多くの近似計算による論争に対する最終的な決着、興味ある現象の発見などに次々と決定的な役割を果たし、理論物理として欠くことのできない手段となってきた。また、現実の系に対する第一原理電子状態計算からの物性予測におけるめざましい進歩は、計算機を利用した物性研究の進展の、典型的な一例である。最近では、計算機の利用は理論物理における単なる手法というだけでなく、実験物理と理論物理から独立した計算物理という新しいカテゴリーを形成し自律的な発展の歩みも始まっている。そもそも、物性物理学は 10^{23} 個というような莫大な数の粒子の示す性質を粒子間のミクロな相互作用から理解することを目的としている。この学問分野において、種々の理論的手法とならんで、多数の粒子の示すふるまいを計算機を用いて再現し、マクロな現象とミクロな法則や起源との関係を解明しようとする研究領域が急速に発展し、計算機機能の飛躍的な進歩とともにその需要が高まっている現状はきわめて自然な時代の潮流である。問題の困難さのゆえに、従来の計算機能力では挑戦できなかった対象が、計算機の能力の急速な向上と、計算のアルゴリズムの進歩とあいまって、徐々に現実的な研究対象となりつつある。この点から考えて、他の分子科学、流体力学、天文学、高エネルギー物理学等の分野に比して、物性物理の分野での計算機需要がそれらの分野における需要にまさるとも劣らぬ、逼迫した段階に至っていることは当然のなりゆきである。

以上のような背景がありながら、我が国の物性研究における計算機事情は、米国のそれに比べて不満足なものである。米国では数年前から計画的にスーパーコンピュータ・センターの建設を推進すると同時に、ローレンスリバモア、ロスアラモス、アルゴンヌなどの国立研究所での物性研究者は専用のスーパーコンピュータを潤沢に利用できるなど重層的に利用の便宜が図られている。それに比べて我が国の物性研究者にとっては、スーパーコンピュータの利用は実質的に科学研究費補助金を用いて大学共同利用大型計算機センターにアクセスする場合に限られており、総体的に見て貧弱な体制である。また、我が国の他の分野と比べても計算機の整備が遅れている。例えば、分子科学については分子科学研究所、プラズマ物理（一般物理）については核融合科学研究所、高エネルギー物理については高エネルギー物理学研究所にそれぞれスーパーコンピュータを擁する専用大型計算機センターがあり、それぞれの分野の全国の研究者が利用している。物性物理の分野にはそれに対応するものがないことがこの分野の計算機事情を特に悪くしている。比較的小型の計算を実行するには共同利用の大型計算機センターを利用することで事足りるが、大型計算の場合は種々の問題がある。共同利用の大型計算機センターを利用する場合には記憶領域の制約、計算時間の制約、大型計算に対する優先度の低さなどのために当該研究に要求されるレベル迄計算を進めることが不可能なことが多い。大規模計算を研究手段とする物性物理研究者からの、こうした事情の改善を求める強い要望により、「物性研究専用の大型計算機システム」の設置が計画されることとなり、1987年に全国の研究者から成る「物性研究のための大型計算機センター設置ワークショップ」が設けられ、具体的な方針が検討された。その結果、設置場所としては物性研究のための共同利用研究所である東京大学物性研究所が最適である、

という結論が得られた。また、平成元年度科学研究費補助金総合研究（B）（研究課題名「物性研究における計算物理」）の会合においても具体的な討議が行われた。平成3年度からは科学研究費補助金重点領域研究（研究課題名「計算物理学－物性研究における新展開－」）が3年計画でスタートすることとなった。これは計算物理学の分野の系統的かつ包括的発展を図る、我が国での初めての計画であるという点で重要な意味を持っている。これを契機として新生面を切り開くような独創的な研究を鼓舞し、計算物理学を通して物性研究に本質的なブレークスルーをもたらすには、更に抜本的な計算機事情の改善、即ち、十分な計算機資源を長期的に安定して確保できる体制の整備が強く望まれる。

以上のような事情から、物性研究における大型計算を支援することを第一目標に、全国共同利用の大型計算機システムとして、スーパーコンピュータを含む設備の設置が望まれる。特別の大型計算を優先的に処理することを目的とし、独創性、必要性、緊急性の高いプロジェクトに重点的に計算時間を配分してゆける体制が必要である。このことは物性物理学のみならず強く境界領域を刺激し、材料科学、生物科学のような隣接他分野にも強いインパクトを与えるにちがいない。

物理学研究連絡委員会は、以上の状況にかんがみ、物性研究専用の大型計算機システムを導入することにより、全国の物性研究者による「計算物理」研究が一層推進され、物性科学への多大の貢献がなされることを期待するものである。