

本資料には、著作権の制限に応じて次のようなマークを付しています。
本資料をご利用する際には、その定めるところに従ってください。

*****: 著作権が第三者に帰属する著作物であり、利用にあたっては、この第三者より直接承諾を得る必要があります。

CC: 著作権が第三者に帰属する第三者の著作物であるが、クリエイティブ・コモンズのライセンスのもとで利用できます。

 : パブリックドメインであり、著作権の制限なく利用できます。

なし: 上記のマークが付されていない場合は、著作権が東京大学及び東京大学の教員等に帰属します。無償で、非営利的かつ教育的な目的に限って、次の形で利用することを許諾します。

- I 複製及び複製物の頒布、譲渡、貸与
- II 上映
- III インターネット配信等の公衆送信
- IV 翻訳、編集、その他の変更
- V 本資料をもとに作成された二次的著作物についての I からIV

ご利用にあたっては、次のどちらかのクレジットを明記してください。

東京大学 UTokyo OCW 学術俯瞰講義
Copyright 2015, 福島孝治

The University of Tokyo / UTokyo OCW The Global Focus on Knowledge Lecture Series
Copyright 2015, Koji Hukushima

コンピューターの中の物質

福島孝治

東京大学 大学院総合文化研究
科 広域科学専攻 関連基礎科
学系

2015 年 6 月 23 日

俯瞰講義の俯瞰

序論・物質の科学史

宇宙の成立ちと物質の起源

第1回(家)

第2-3回(村山)

宇宙

宇宙

素粒子

太陽系

第4回(浅井)

第5回(永原)

物質

物質の応用

物質の理解

社会

原子・分子

結晶 物性

ソフトマター

放射線

超伝導

第6回(家)

第7回(田中)

第8回(飯本)

第13回(岡部)

レアメタル

人工光合成

発光ダイオード

半導体人工物質

第12回(堂免)

第11回(川崎)

計算科学

第9回(石坂)

第10回(福島)

* 東京大学 UTokyo OCW 学術俯瞰講義
Copyright 2015, 家泰弘

コンピューターといえば…

コンピューターといえば…

iPhone などのスマホ？



Image by
Pixeden.com,
from Wikimedia
Commons
CC BY 3.0

コンピューターといえば…

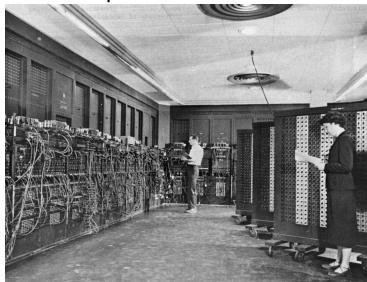
iPhone などのスマホ？



Image by
Pixeden.com,
from Wikimedia
Commons
CC BY 3.0

ENIAC (1946)

Electronic Numerical Integrator
and Computer



* US Army Photo

コンピューターといえば…

iPhone などのスマホ？



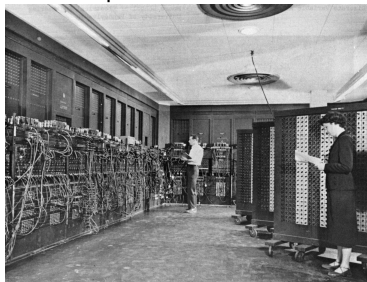
Image by
Pixeden.com,
from Wikimedia
Commons
CC BY 3.0

演算性能

FLOPS = Floating operations
per Second

ENIAC (1946)

Electronic Numerical Integrator
and Computer



* US Army Photo

コンピューターといえば…

iPhone などのスマホ？



Image by
Pixeden.com,
from Wikimedia
Commons
CC BY 3.0

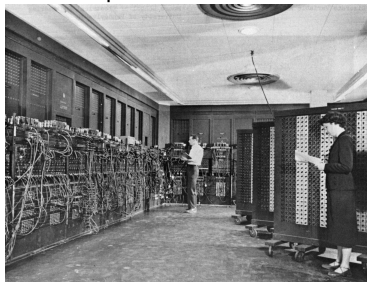
演算性能

FLOPS = Floating operations
per Second

115.2G FLOPS

ENIAC (1946)

Electronic Numerical Integrator
and Computer



* US Army Photo

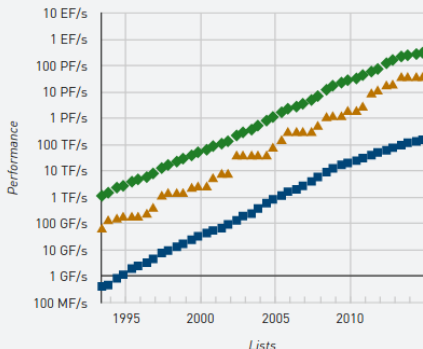
300 FLOPS

Top500

* 出典：The TOP500 list <http://www.top500.org>

世界で一番速い計算機の演算性能の変遷

Performance Development



Top500

* 出典：The TOP500 list <http://www.top500.org>

昨年のトップ5 (2014.11)

RANK	SITE	SYSTEM	CORES	RMAX (TFLOP/S)	RPEAK (TFLOP/S)	POWER (KW)
1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	DOE/SC/Argonne	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945

Top500

* 出典: The TOP500 list <http://www.top500.org>

昨年のトップ5 (2014.11)

RANK	SITE	SYSTEM	CORES	RMAX (TFLOP/S)	RPEAK (TFLOP/S)	POWER (KW)
1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808

注意すべきは…

- 一位は中国の天河 II:

$$33.9\text{PFLOPS} = 33.9 \times 10^{15}\text{FLOPS} \simeq 3 \times 10^5 \text{iphones}$$

- コア数は、 3×10^6 . 超並列計算機.
- 最先端の科学計算では、この超並列計算機を使いこなす必要がある.

5	DOE/SC/Argonne	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
---	----------------	---	---------	---------	----------	-------

Outline

- ① 計算科学とは
- ② もっとも単純な例
- ③ 物質科学へ向けて
- ④ 計算科学の新たな方向性ーマテリアルズ・インフォマティクスー

Outline

- ① 計算科学とは
- ② もっとも単純な例
- ③ 物質科学へ向けて
- ④ 計算科学の新たな方向性ーマテリアルズ・インフォマティクスー

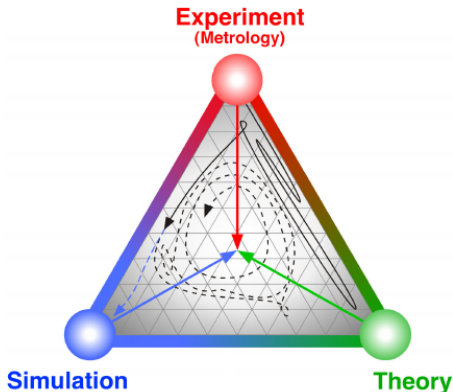
計算科学とは

自然科学の第三の手法：コンピューターを使って行う科学

- ① 解析的には取り扱えない問題へのアプローチ：非常に速いそろばんとしての役割
 - 複雑な問題やモデルの計算が可能
 - 近似による影響を排除
- ② 現実に実行困難な状況へのアプローチ：理想極限としての計算機実験
 - 実験では観測できない量の計算
 - ありえない実験環境を計算機の中で実現
 - 理論的法則の検証
 - 新たな物質探索、製薬へのヒント

-自然科学の3つの方法-

Landau's triangle



Journal of Research of NIST (2002) **107** 261

*

Arno Laesecke (2002)
Through Measurement to
Knowledge: The Inaugural
Lecture of Heike Kamerlingh
Onnes (1882), *Journal of
Research of the National
Institute of Standards and
Technology*, Vol. 107(3):
261-277, p.275 Fig.1 [http://
www.nist.gov/nvl/
jresv107.cfm](http://www.nist.gov/nvl/jresv107.cfm)
Reprinted courtesy of the
National Institute of
Standards and Technology,
U.S. Department of
Commerce. Not
Copyrightable in the United
States.

計測からはじまる…

Heike Kamerlingh Onnes (1853-1926)

- 1908: ヘリウムの液化 (4.2K)
- 1911: 超伝導の発見
- 1913: ノーベル賞

教授就任講演

Door meten tot weten

(英訳: Through measurement to knowledge)

(和訳: 計測から知識へ)



計測

測ること,
見ること



知識

知ること
理解すること

そもそも、どうしてコンピュータで科学できるのか？

あまりに漠然とした問いだが…

そもそも、どうしてコンピュータで科学できるのか？

あまりに漠然とした問いだが…

自然科学の基本法則の多くが数式を用いた数学的表現を持っているから、数値を定量的に計算できる

- Newton の法則、Maxwell 方程式、Schrödinger 方程式…
- 素粒子物理、宇宙物理、物性物理、ソフトマター…様々な分野で使われている。

そもそも、どうしてコンピュータで科学できるのか？

あまりに漠然とした問いだが…

自然科学の基本法則の多くが数式を用いた数学的表現を持っているから、数値を定量的に計算できる

- Newton の法則、Maxwell 方程式、Schrödinger 方程式…
- 素粒子物理、宇宙物理、物性物理、ソフトマター…様々な分野で使われている。

反例：マーフィーの法則

偉大な経験則の集合体

- 失敗する余地があるなら、失敗する
- 落としたトーストがバターを塗った面を下にして着地する確率は、カーペットの値段に比例する
- 洗車しはじめると雨が降る

よく当たるような気がする法則だけど、これらは定量的な検証できない

計算ができれば…

Donald Ervin Knuth (1938-)

数学者、計算科学者

- The Art of Computer Programming
- TeX の開発者

Donald Knuth wrote:

It has often been said that a person does not really understand something until after teaching it to someone else. Actually a person does not really understand something until after teaching it to a computer, i.e., expressing it as an algorithm.



Imaged by Jacob Appelbaum, from Wikimedia Commons [CC BY-SA 2.5](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KnuthAtOpenContentAlliance.jpg)
<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:KnuthAtOpenContentAlliance.jpg>

Outline

- ① 計算科学とは
- ② もっとも単純な例
- ③ 物質科学へ向けて
- ④ 計算科学の新たな方向性ーマテリアルズ・インフォマティクスー

未来予想図

問い

物理学の視点で、すぐ**未来の予想**をしてみたい。

すぐ先の時間で何が起きるのかを知りたい。

そのときに、何ができて、何が問題で、**コンピューター**はどんな役割を担えるのか？

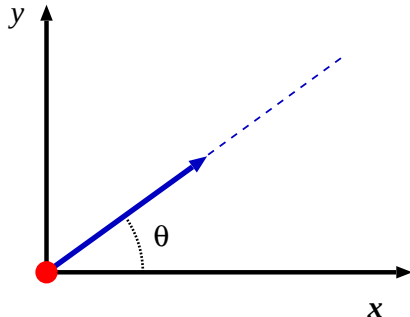
もっとも素朴で簡単な例は。。

蹴ったボールの行方-力学の復習-

- 質量 m のボールを地面との角度 θ の方向に速度 v_0 で蹴り出す。 簡単な投げ上げ問題
- 重力加速度の大きさ:

$$g \simeq 9.8m/s^2$$

- 蹴った後、時間経過を予想する**
- もしもこのボールに働く力が重力だけだったら、放物運動になる。**



まずは、運動学的アプローチ-Newton 力学以前-

- 位置ベクトル： $\boldsymbol{x}(t)$
- 速度ベクトル： $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\boldsymbol{x}(t + \Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t}$

まずは、運動学的アプローチ-Newton 力学以前-

- 位置ベクトル： $\boldsymbol{x}(t)$
- 速度ベクトル： $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\boldsymbol{x}(t + \Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t}$
- 今の時刻 t 秒の位置 $\boldsymbol{x}(t)$ を知っていて、**少しだけ未来 $t + \Delta t$ 秒後の位置は**、[移動距離]=[速さ]×[時間] だから、

$$\boldsymbol{x}(t + \Delta t) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t$$

まずは、運動学的アプローチ-Newton 力学以前-

- 位置ベクトル： $\boldsymbol{x}(t)$
- 速度ベクトル： $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\boldsymbol{x}(t + \Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t}$
- 今の時刻 t 秒の位置 $\boldsymbol{x}(t)$ を知っていて、**少しだけ未来 $t + \Delta t$ 秒後の位置**は、[移動距離]=[速さ]×[時間] だから、

$$\boldsymbol{x}(t + \Delta t) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t$$

- **もう少しだけ未来 $t + 2\Delta t$ 秒後の予測**には、

$$\boldsymbol{x}(t + 2\Delta t) = \boldsymbol{x}(t + \Delta t) + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t$$

少し未来の速度が必要で、そのためには**今の加速度 $\boldsymbol{a}(t)$** が必要.

$$\boldsymbol{v}(t + \Delta t) = \boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{a}(t)\Delta t$$

まずは、運動学的アプローチ-Newton 力学以前-

- 位置ベクトル： $\boldsymbol{x}(t)$
- 速度ベクトル： $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\boldsymbol{x}(t + \Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t}$
- 今の時刻 t 秒の位置 $\boldsymbol{x}(t)$ を知っていて、**少しだけ未来 $t + \Delta t$ 秒後**の位置は、[移動距離]=[速さ]X[時間] だから、

$$\boldsymbol{x}(t + \Delta t) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t$$

- **もう少しだけ未来 $t + 2\Delta t$ 秒後**の予測には、

$$\boldsymbol{x}(t + 2\Delta t) = \boldsymbol{x}(t + \Delta t) + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t$$
少し未来の速度が必要で、そのためには**今の加速度 $\boldsymbol{a}(t)$** が必要.

$$\boldsymbol{v}(t + \Delta t) = \boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{a}(t)\Delta t$$

- さらに、**もう少し未来 $t + 3\Delta t$ 秒後**を知るには、今の**超加速度**、**超超加速度**が必要. つまり、今をものすごく正確に知る必要がある.

まずは、運動学的アプローチ-Newton 力学以前-

- 位置ベクトル： $\boldsymbol{x}(t)$
- 速度ベクトル： $\boldsymbol{v}(t) = \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\boldsymbol{x}(t + \Delta t) - \boldsymbol{x}(t)}{\Delta t}$
- 今の時刻 t 秒の位置 $\boldsymbol{x}(t)$ を知っていて、**少しだけ未来 $t + \Delta t$ 秒後**の位置は、[移動距離]=[速さ]×[時間] だから、

$$\boldsymbol{x}(t + \Delta t) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t$$

- もう少しだけ未来 $t + 2\Delta t$ 秒後**の予測には、

$$\boldsymbol{x}(t + 2\Delta t) = \boldsymbol{x}(t + \Delta t) + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{v}(t)\Delta t + \boldsymbol{v}(t + \Delta t)\Delta t$$
少し未来の速度が必要で、そのためには**今の加速度 $\boldsymbol{a}(t)$** が必要.

$$\boldsymbol{v}(t + \Delta t) = \boldsymbol{v}(t) + \boldsymbol{a}(t)\Delta t$$

- さらに、**もう少し未来 $t + 3\Delta t$ 秒後**を知るには、今の**超加速度**、**超超加速度**が必要. つまり、今をものすごく正確に知る必要がある.

…しかし…

Newton 力学の教え

Newton の第二法則によれば、超加速度はいらない。

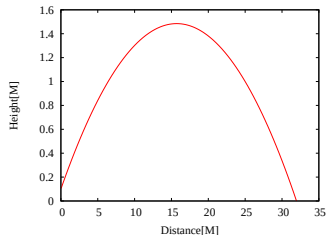
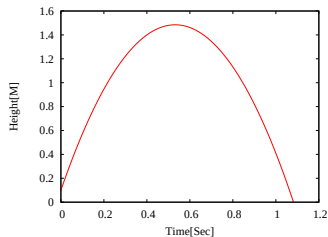
Newton の運動方程式

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} = \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad (2)$$

を解けばよい。ボールに働く力が重力しかないとするとき、

運動方程式を解いた結果



Newton 力学の教え

Newton の第二法則によれば、超加速度はいらない。

Newton の運動方程式

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} = \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad (2)$$

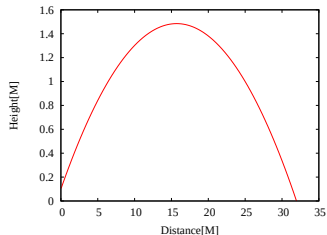
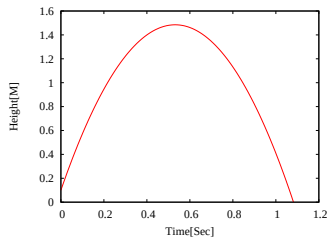
を解けばよい。ボールに働く力が重力しかないとする、

答え

$$\mathbf{x}(t) = (v_0 t \cos \theta, v_0 t \sin \theta - \frac{1}{2}gt^2)$$

- 質量に依存しない
- どんなボールもこの式に従うのだ!

運動方程式を解いた結果



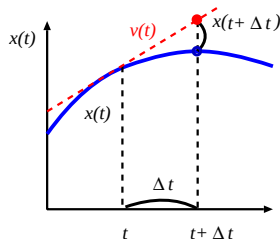
計算機によるシミュレーション

- 一般の運動方程式に対して、積分の形でとける。

$$\boldsymbol{v}(t + \Delta t) = \boldsymbol{v}(t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{\boldsymbol{F}(t')}{m} dt' \quad (3)$$

$$\boldsymbol{x}(t + \Delta t) = \boldsymbol{x}(t) + \int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{v}(t') dt' \quad (4)$$

- 時間の刻み幅 Δt が十分小さいと Δt ステップ進む
すると、



計算機によるシミュレーション

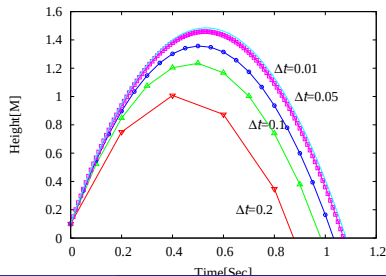
- 一般の運動方程式に対して、積分の形でとける。

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{F(t')}{m} dt' \simeq v(t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t \quad (3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \int_t^{t+\Delta t} v(t') dt' \simeq x(t) + v(t) \Delta t \quad (4)$$

- 時間の刻み幅 Δt が十分小さいとすると、上のように近似できる

Δt での近似解 (Euler 法)



計算機によるシミュレーション

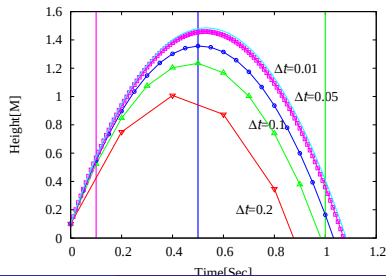
- 一般の運動方程式に対して、積分の形でとける。

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{F(t')}{m} dt' \simeq v(t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t \quad (3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \int_t^{t+\Delta t} v(t') dt' \simeq x(t) + v(t) \Delta t \quad (4)$$

- 時間の刻み幅 Δt が十分小さいとすると、**上のように近似できる**
- Δt が小さい方が精度が高い
- でも、 Δt が小さいと計算時間がかかる
- そろばんでやろうものなら、大変。

Δt での近似解 (Euler 法)



計算機によるシミュレーション

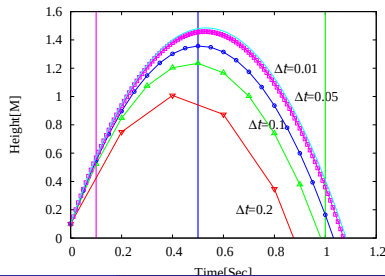
- 一般の運動方程式に対して、積分の形でとける。

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{F(t')}{m} dt' \simeq v(t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t \quad (3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \int_t^{t+\Delta t} v(t') dt' \simeq x(t) + v(t) \Delta t \quad (4)$$

- 時間の刻み幅 Δt が十分小さいとすると、**上のように近似できる**
- Δt が小さい方が精度が高い
- でも、 Δt が小さいと計算時間がかかる
- そろばんでやろうものなら、大変。

Δt での近似解 (Euler 法)



原理的にこれで予言ができる！

コンピューターにできることとできないこと

● Newton 力学の偉いところ:

- ボールの初期条件とボールに働くすべての力を与えてくれたら、その後のボールの未来を知る運動学的原理を与えている.
- その初期条件やすべての力はわからないときには、**モデル化**が必要.

● コンピューターの役割:

- “**モデル**” をコンピューターが与えることはできないが、結果を見たときにモデルの良し悪しはわかるかもしれない.
- ただ、与えられると“**原理的**”には、時間刻み的に未来を知ることができる.
- 精度はその時間刻み Δt に依存する.

● 正確に未来を予想するためには:

- 正しい“モデル” 例えば、コンピュータは正しい力を知らない!
- 細かな時間刻み 計算機パワーでなんとかできる?!
- 正しいモデルを目指して、複雑になればなるほど、また、精度を上げるために時間刻みを細かくすればするほど、大量の計算が必要となる.

Outline

- ① 計算科学とは
- ② もっとも単純な例
- ③ 物質科学へ向けて
- ④ 計算科学の新たな方向性ーマテリアルズ・インフォマティクスー

物性科学へ向けて

問い: 物理学の視点で、計算機の仮想空間に、原子や分子を入れて、温度を下げると何が起きるか**予想**をしてみたい。

すぐに思いつく疑問

- ① 何個の原子や分子を入れるとよい？
- ② それらの初期条件や境界条件はどうする？
- ③ 原子の間の力は？
- ④ どのくらいの時間、眺めているとよい？

物性科学へ向けて

問い: 物理学の視点で、計算機の仮想空間に、原子や分子を入れて、温度を下げると何が起きるか**予想**をしてみたい。

すぐに思いつく疑問

- ① 何個の原子や分子を入れるとよい？
 - ズバリ、アボガドロ数。。。それは無理。
 - でも、できるだけ多くかな。実は、数が多くないと、液体－固体相転移などは起きないことがわかっている。
- ② それらの初期条件や境界条件はどうする？
- ③ 原子の間の力は？
- ④ どのくらいの時間、眺めているとよい？

物性科学へ向けて

問い: 物理学の視点で、計算機の仮想空間に、原子や分子を入れて、温度を下げると何が起きるか**予想**をしてみたい。

すぐに思いつく疑問

- ① 何個の原子や分子を入れるとよい？
 - ズバリ、アボガドロ数。。。それは無理。
 - でも、できるだけ多くかな。実は、数が多くないと、液体－固体相転移などは起きないことがわかっている。
- ② それらの初期条件や境界条件はどうする？
 - 何か決めないといけない！ラプラスの悪魔問題。
- ③ 原子の間の力は？
- ④ どのくらいの時間、眺めているとよい？

物性科学へ向けて

問い: 物理学の視点で、計算機の仮想空間に、原子や分子を入れて、温度を下げると何が起きるか**予想**をしてみたい。

すぐに思いつく疑問

- ① 何個の原子や分子を入れるとよい？
 - ズバリ、アボガドロ数。。。それは無理。
 - でも、できるだけ多くかな。実は、数が多くないと、液体－固体相転移などは起きないことがわかっている。
- ② それらの初期条件や境界条件はどうする？
 - 何か決めないといけない！ラプラスの悪魔問題。
- ③ 原子の間の力は？
 - これはモデルの問題。慎重かつ大胆に。
- ④ どのくらいの時間、眺めているとよい？

物性科学へ向けて

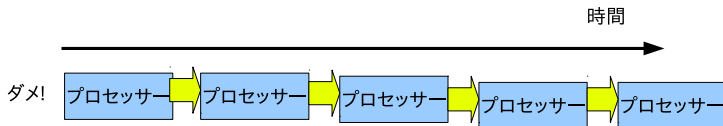
問い: 物理学の視点で、計算機の仮想空間に、原子や分子を入れて、温度を下げると何が起きるか**予想**をしてみたい。

すぐに思いつく疑問

- ① 何個の原子や分子を入れるとよい？
 - ズバリ、アボガドロ数。。。それは無理。
 - でも、できるだけ多くかな。実は、数が多くないと、液体－固体相転移などは起きないことがわかっている。
- ② それらの初期条件や境界条件はどうする？
 - 何か決めないといけない！ラプラスの悪魔問題。
- ③ 原子の間の力は？
 - これはモデルの問題。慎重かつ大胆に。
- ④ どのくらいの時間、眺めているとよい？
 - 時間刻みをミクロな現象の時間スケール $10^{-12} - 10^{-15}$ 秒とすると、1秒はとてもとても長い。

時間はつながれているもの。。。。

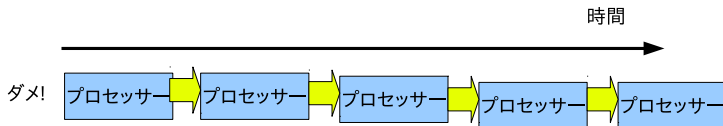
- 過去から未来へ。。。そして、知りたいのは未来。
 - 超並列計算機をどのように使うか？



- 時間分割ではだめ。

時間はつながれているもの。。。。

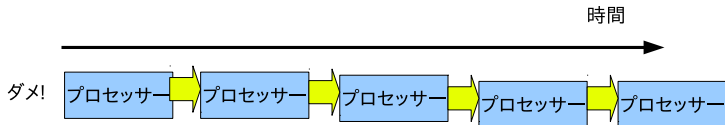
- 過去から未来へ。。。そして、知りたいのは未来。
 - 超並列計算機をどのように使うか？



- 時間分割ではだめ。

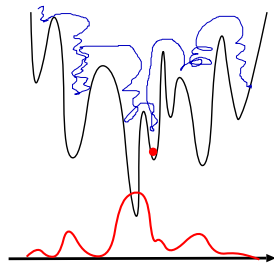
時間はつながれているもの。。。。

- 過去から未来へ。。。そして、知りたいのは未来。
 - 超並列計算機をどのように使うか？



- 時間分割ではだめ。
- そもそも時々刻々追跡する必要があるのか？(現実逃避モード)
- 十分に時間が経った状況を考える
- 安定状態の回りでもゆらぐ
- それらの滞在時間の割合を知るのでもよいか？
 - 未来を知るかわりに。。。。
- 確率の導入 $\implies$ 統計力学の考え方
- 時間軌跡からの開放

軌跡から確率分布



統計力学的確率集団の導入

Reprinted figure with permission from B.J. Alder and T.E. Wainwright, *Physical Review* 127:359-361, 1962.
Copyright 1962 by the American Physical Society.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.127.359>

- (マルコフ連鎖) モンテカルロ法
- 分子動力学法

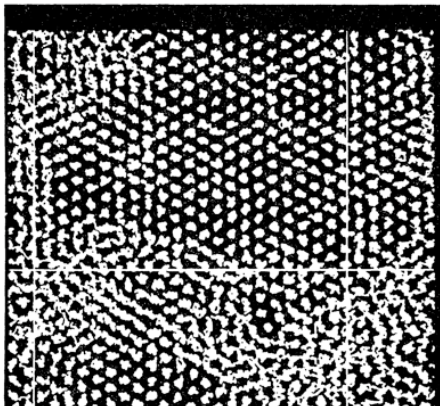
アルダー転移

- 液体に圧力を加えたり、低温にしたときに固体に相転移する。
- 固化に本質的に重要なのは、引力か斥力か？
- 分子動力学法 (1957-)
- 斥力しかない剛体球で、液体－固体相転移の発見！

B.J.Alder and T.E.Wainwright, *Phys. Rev.* 127, 359 (1962).

剛体球の分子動力学法

*

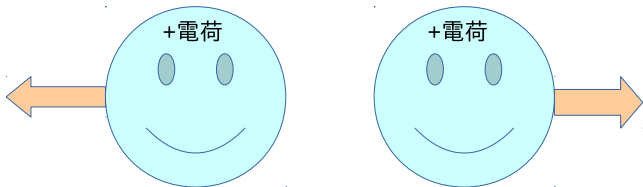


力は難しい !!

原子間に働く（古典的）力

- 静電相互作用 (長距離相互作用)
- van der Waals 相互作用
- 水素結合
- 疎水相互作用

例：静電相互作用 (クーロン力)

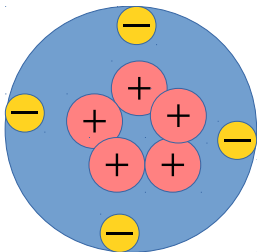


力は難しい !!

原子間に働く (古典的) 力

- 静電相互作用 (長距離相互作用)
- van der Waals 相互作用
- 水素結合
- 疎水相互作用

例：静電相互作用 (クーロン力)

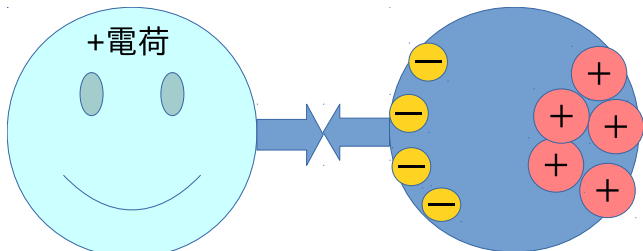


力は難しい !!

原子間に働く（古典的）力

- 静電相互作用 (長距離相互作用)
- van der Waals 相互作用
- 水素結合
- 疎水相互作用

例：静電相互作用 (クーロン力)



古典力学から量子力学へ

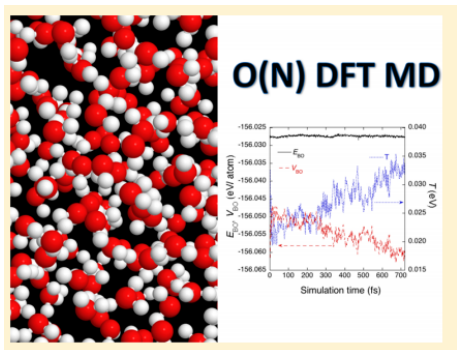
原子核間に及ぼしあう力は、核間距離だけでなく「電子状態」に依存するさらに、二体間だけで決まらないこともある。三体問題。

第一原理分子動力学計算 (1985-) K computer で 3 万原子の計算

- ① バンド計算を行い、電子状態
- ② その電子状態から、核間に働く力を計算
- ③ その力を元に、(古典的) 分子動力学計算

この方法を使えば、原理的に「力」の計算は正しい。ただし、その計算はとても大変。

Miyazaki et al,
J. Chem. Theory Comput., 2014, 10 (12),



* Reprinted with permission from Arita et al. (2014), *Journal of Chemical Theory and Computation* 10(12):5419-5425.
Copyright 2014 American Chemical Society.

Outline

- ① 計算科学とは
- ② もっとも単純な例
- ③ 物質科学へ向けて
- ④ 計算科学の新たな方向性ーマテリアルズ・インフォマティクスー

ビッグデータ時代到来！

『最強のスキル「統計学」
必須のツール「ビッグデータ」』
別冊宝島2056、
宝島社、2013年08月27日

<http://tkj.jp/book/?cd=20205601>

データサイエンティスト養成読本
編集部
『データサイエンティスト養成読本』
技術評論社、2013年8月8日

[http://gihyo.jp/
book/2013/978-4-7741-5896-9](http://gihyo.jp/book/2013/978-4-7741-5896-9)

ビッグデータ時代到来！

Science,
vol.331(6018, 11 February 2011)

[http://www.sciencemag.org/
content/331/6018.toc](http://www.sciencemag.org/content/331/6018.toc)

Science, Feb. 2011

ビッグデータ時代におけるアカデミアの挑戦～アカデミッククラウドに関する検討会 提言～ 文部科学省 (2012 年 7 月)

I. はじめに

高度情報化社会の進展に伴い、デジタルデータが爆発的に増大するビッグデータ¹ (情報爆発) 時代が到来した。世界のデジタルデータの量は、民間調査機関の推計によれば、2020 年には、約 35 ゼタバイト (2010 年度時の約 35 倍) へ拡大する見込みである。その質的・量的に膨大なデータ (ビッグデータ) の中には新たな知識や洞察が埋もれているが、現況においては、その多くの情報が整理・構造化されておらず、有効に活用できていない状況である。

このため、ビッグデータを効果的・効率的に収集・集約し、革新的な科学的手法により知識発見や新たな価値を創造することの重要性が、国際的に認識されてきている。第一の科学的手法である経験科学 (実験)、第二の科学的手法である理論科学、第三の科学的手法である計算科学 (シミュレーション) と並び、データ科学² (data centric science =e-サイエンス) は第四の科学的手法と言われ、ビッグデータ時代における科学の新たな地平を拓く方法論として注目されている。

出典：http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/027/gaiyou/1323376.htm

マテリアルズ・インフォマティクス?!

物質科学+計算科学+情報科学
= Materials Informatics

MIの目的

- 実験データをうまくまとめて、物性予測をしたい!
- 様々な物質のデータから、新たな新物質予測をしたい!
 - 高い転移温度の超伝導物質
 - 熱伝導率の低い物質
 - 保磁力の大きな磁石

既存アプローチの困難さ

- 実験的探索の困難さ
- 理論的予言能力の低さ

日本物理学会第70回年次大会(2015年)プログラム

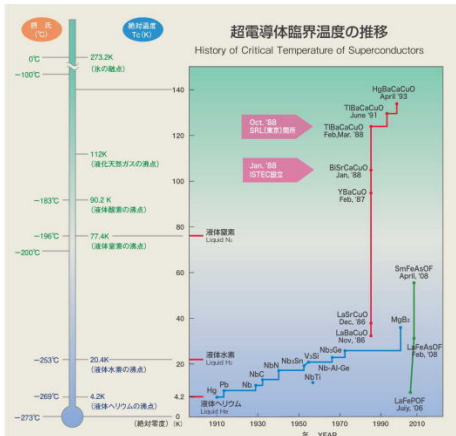
23日 AJ会場 23pAJ 13:30~17:00

領域11, 領域3, 領域6, 領域9, 領域10 合同シンポジウム

「マテリアルズインフォマティクスの現状と将来」

1. 趣旨説明
寺倉清之(物材機構)
2. データ駆動型材料研究(マテリアルズインフォマティクス)の推進
立松慎也(文科省)
3. 物質科学データの機械学習
津田宏治(東大新領域)
4. 第一原理計算に基づいたマテリアルズインフォマティクス
田中功(京大工)
休憩 (15:00~15:15)
5. スパースモデリングと物性物理
岡田真人(東大新領域)
6. 物性物理へのデータ駆動型アプローチ
福島孝治(東大総合科学)
7. 材料選択と材料設計を支えるデータベースの展望
徐一斌(物材機構)
8. マテリアルズインフォマティクスへの期待
細野秀雄(東工大)

高温超伝導物質探索



- せめて、候補の絞り込みだけでもインフォマティクスの知見でできないか？

* 提供：（公財）国際超電導産業技術研究センター（I S T E C）
<http://www.istec.or.jp/description/description.html>

マテリアルズ・インフォマティクス?!

理論的な困難さ

“ One of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition. ”

– John Maddox, Nature 335, 201 (1988)

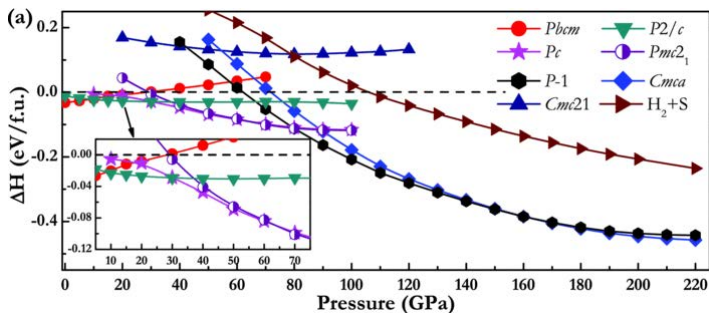
困難の原因は??

- ① バンド計算をするためには、結晶構造を与える必要があるが、どの結晶構造が安定なのかがわからない。
- ② 原子間に働く量子力学的な力の計算が難しい
- ③ 力がわからないと安定な構造はわからないのは当然!

The metallization and superconductivity of dense hydrogen sulfide

Yinwei Li, Jian Hao, Hanyu Liu, Yanling Li and Yanming Ma

Journal of Chemical Physics 140, 174712 (2014)

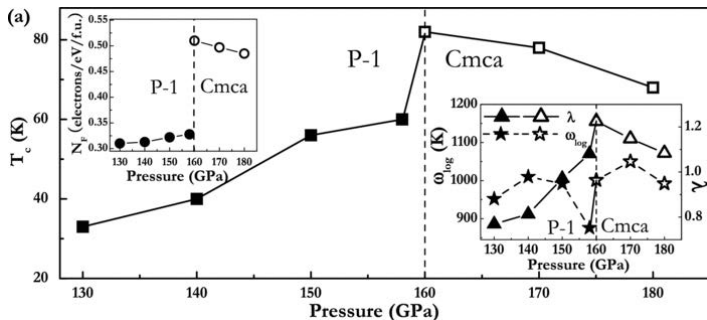


* Reproduced with permission from Li et al. (2014) The metallization and superconductivity of dense hydrogen sulfide, *Journal of Chemical Physics* 140:174712. Copyright 2014, AIP Publishing LLC. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4874158>

The metallization and superconductivity of dense hydrogen sulfide

Yinwei Li, Jian Hao, Hanyu Liu, Yanling Li and Yanming Ma

Journal of Chemical Physics 140, 174712 (2014)

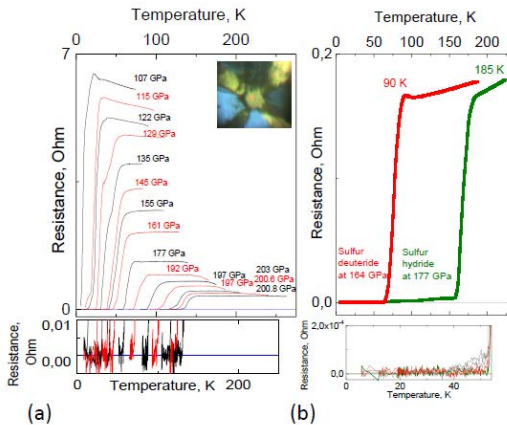


* Reproduced with permission from Li et al. (2014) The metallization and superconductivity of dense hydrogen sulfide, *Journal of Chemical Physics* 140:174712. Copyright 2014, AIP Publishing LLC.
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4874158>

Conventional superconductivity at 190 K at high pressures

A.P. Drozdov, M. I. Erements, and I. A. Troyan

arXiv:1412.0460 (Submitted on 1 Dec. 2014)

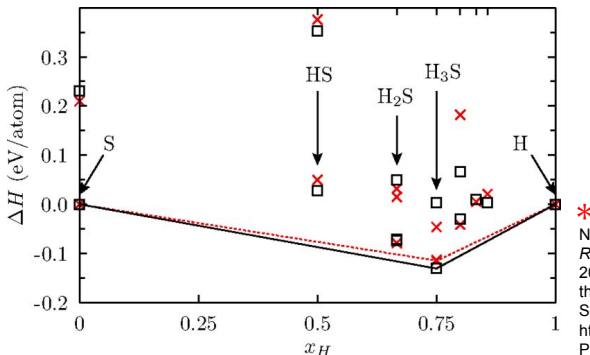


* Courtesy Mikhail Erements

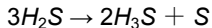
What superconducts in sulfur hydrides under pressure and why

N. Bernstein, C. Stephen Hellberg, M. D. Johannes, I. I. Mazin, and M. J. Mehl

Physical Review B 91:06511 (27 Feb. 2015)



N. Bernstein et al., *Physical Review B*, vol.91, 06511, 2015. Copyright 2015 by the American Physical Society.
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.91.060511>



現状では、なかなかうまくいっているようには見えない

- 既存の方法で手詰まり感があるところに、何か打出の小槌(インフォマティクス)をもってくるといいことがあるかも?! という発想
- 物質科学の専門家+情報科学の専門家では、この問題は打開できないと思う

MI を成功させるために必要な人材は

ではないだろうか?

現状では、なかなかうまくいっているようには見えない

- 既存の方法で手詰まり感があるところに、何か打出の小槌(インフォマティクス)をもってくるといいことがあるかも?! という発想
- 物質科学の専門家+情報科学の専門家では、この問題は打開できないと思う

MI を成功させるために必要な人材は

- 情報科学のわかる物質科学の研究者
- 物質科学のわかる情報科学の研究者

ではないだろうか?

現状では、なかなかうまくいっているようには見えない

- 既存の方法で手詰まり感があるところに、何か打出の小槌(インフォマティクス)をもってくるといいことがあるかも?! という発想
- 物質科学の専門家+情報科学の専門家では、この問題は打開できないと思う

MI を成功させるために必要な人材は

- 情報科学のわかる物質科学の研究者
- 物質科学のわかる情報科学の研究者

ではないだろうか?

この問題に限らないことだが、

- ○○科学のわかる△△科学の研究者
- 研究者だけでなく、社会人にも望まれる能力

現状では、なかなかうまくいっているようには見えない

- 既存の方法で手詰まり感があるところに、何か打出の小槌(インフォマティクス)をもってくるといいことがあるかも?! という発想
- 物質科学の専門家+情報科学の専門家では、この問題は打開できないと思う

MI を成功させるために必要な人材は

- 情報科学のわかる物質科学の研究者
- 物質科学のわかる情報科学の研究者

ではないだろうか?

この問題に限らないことだが、

- ○○科学のわかる△△科学の研究者
深く専門を追求することは大事だけど、俯瞰する能力はもっと大事。
- 研究者だけでなく、社会人にも望まれる能力

まとめ

- 物性科学の分野で計算科学的なアプローチがどんな感じできそうなのかを概観
- 計算科学は、実験ではない！だから、どんなこともできそうだけど、どんなこともできるわけではない。
- 計算機があれば、何でもできる？
- 計算機では、結局、こんなことしかできない？
- 新しいことをするためには、新しい方法を考えないといけないことは、他の自然科学と全く変わらない。