



2011年7月7日(木)～7月8日(金)

# 若手技術交流会

於 理化学研究所計算科学研究機構

## 7月7日「CMSIにおける大規模計算の現状報告」

- 9:30 - 10:00 常行真司 (ISSP)  
「開会の言葉 (CMSIの展望と役割)」
- 10:00 - 10:40 宮崎剛 (物材機構)  
「CONQUESTにおける大規模並列計算」
- 10:40 - 11:00 Coffee break
- 11:00 - 11:40 渡辺宙志 (東大物性研)  
「大規模分子動力学法による混相流体の解析」
- 11:40 - 12:20 松尾春彦 (東大工)  
「並列チューニングの進め方 ～ ALPS/looper を例に～」
- 12:20 - 13:30 昼食
- 13:30 - 14:10 三澤 貴宏 (東大工)  
「強相関電子系に対する第一原理有効モデルの解析」
- 14:10 - 14:50 中村和磨 (東大工)  
「第一原理有効モデル導出のためのRPAコードの大規模並列化」
- 14:50 - 15:10 Coffee Break
- 15:10 - 15:50 岩田潤一 (筑波大計算科学研究センター)  
「実空間第一原理シミュレーション "RSDFT"の開発と研究の現状」
- 15:50 - 16:30 石川 裕 (理研)  
「エクサスケールコンピューティングへの道程」
- 16:30 - 17:10 石村 和也 (神戸大)  
「大規模並列量子化学計算に向けた取り組み」
- 17:10 - 18:30 ポスターセッション (軽食)
- 18:30 - 19:30 懇談会

問い合わせ先: CMSI神戸事務局 [adm-kobe@cms-initiative.jp](mailto:adm-kobe@cms-initiative.jp)

主催: 計算物質科学イニシアティブ (次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野2)



2011年7月7日(木)～7月8日(金)

# 若手技術交流会

於 理化学研究所計算科学研究機構

## 7月8日「重点・拠点研究員の自己紹介と技術交流」

- 9:30 - 9:50 川島直輝 (ISSP)  
「重点・拠点研究員に期待すること」
- 9:50 - 10:30 尾崎泰助 (JAIST)  
「OpenMXの開発と公開」
- 10:30 - 11:10 藤堂眞治 (東大工)  
「オープンソースソフトウェアALPSの開発と公開」
- 11:10 - 11:30 Coffee Break
- 11:30 - 11:50 榮 慶文 (分子研)  
「より効率的かつ高精度なタンパク質系分子シミュレーションへの  
取り組みとその実現のためのアプリケーションの開発」
- 11:50 - 12:10 吉澤 香奈子 (ISSP)  
「平面波基底第一原理計算コードの統合と発展」
- 12:10 - 13:00 昼食
- 13:00 - 13:20 米原 文博 (東大総合文化)  
「輻射場を用いた電子動力学・化学反応動力学制御の  
大規模計算機による理論予測に向けて」
- 13:20 - 13:40 城野 亮太 (東大工)  
「新型太陽電池へ向けた界面錯体の電荷分離過程に関する理論化学的研究」
- 13:40 - 14:00 野田 真史 (分子研)  
「実時間実空間電子ダイナミクス法計算プログラムの大規模並列化に向けて」
- 14:00 - 14:20 桜庭 俊 (分子研)  
「凝縮系の熱力学量の計算」
- 14:20 - 14:40 志田 和人 (東北大金材研)  
「自己回避RWの並列計算及び今後の研究」
- 14:40 - 15:00 Coffee Break
- 15:00 - 15:20 Daniel Sindhikara J. (分子研)  
「3D-RISMプログラムの応用と、解析ツール開発」
- 15:20 - 15:40 河野 貴久 (ISSP)  
「オーダーN実空間DFTのマルチスケールハイブリッド並列化に向けて」
- 15:40 - 16:00 川頭 信之 (ISSP)  
「研究支援のための情報インフラ」
- 16:00 - 16:20 小西 優祐 (産総研)  
「数値計算による構造相転移の研究」
- 16:20 - 16:40 小林 正人 (早大理工)  
「分割統治(DC)法に基づく大規模量子化学計算:現状と展望」
- 16:40 - 17:00 藤堂眞治 (東大工)  
「おわりに」
- 17:00 閉会