

物性研究所短期研究会

物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会(第 4 回 CMSI 研究会)

— 計算物質科学の課題と展望 —

日時：2013 年 12 月 10 日(火)～13 日(金)

場所：物性研究所本館 6 階 大講義室(A632)

主催：東京大学物性研究所、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

物性研スパコン共同利用 世話人：赤井 久純、川島 直輝、杉野 修、藤堂 眞治、野口 博司、
小口 多美夫、押山 淳、川勝 年洋、常行 真司、羽田野 直道、
渡辺 宙志、笠松 秀輔、野口 良史、芝 隼人、森田 悟史

物性研と計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の共催で大規模計算に関する研究会を開催した。例年、物性研スーパーコンピュータ共同利用の利用者報告会を 2 日間で行っているが、今年度は、CMSI の年次成果報告会と合同で 12 月 10-13 日の 4 日間に渡って開催した。研究会では、特別招待講演 5 件、共同利用招待講演 9 件、CMSI 講演 44 件と 49 件のポスター発表が行われた。

連日多くの参加者があり、活発な議論が行われた。(参加者：10 日 57 名、11 日 121 名、12 日 111 名、13 日 92 名、計 192 名)特に並列化の手法やその効率について、激しくやりとりが行われた。また、再来年度物性研スパコンのシステム A、システム B の更新を控えているため、この機会に利用者からの意見を収集した。研究会の最初に、東大情報基盤センターのスパコンのこれまでの取り組みと今後の計画について中島研吾先生に特別講演をしていただき、それに引き続き、昨年度の成果報告会と WEB で行った物性研スパコンの利用者アンケートの結果を紹介し、物性研スパコンに対する要望、意見を集めた。また、3 日目の午後にも国の HPCI の将来計画について紹介があり、計算物質科学にとって好ましいコンピュータアーキテクチャーについて活発な議論が行われた。

また、40 歳以下の若手研究者を対象として、口頭発表、ポスター発表それぞれに若手奨励賞、ポスター賞、全発表を対象にビジュアル賞を設けた。参加者の投票でもっとも多くの票を獲得した以下の 3 名の方々が受賞された。賞状、および賞品が贈られた。

○若手奨励賞

“ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索-大規模並列計算プログラムの効率的な開発-”

石村 和也 (分子研究所)

○ポスター賞

“気泡の可視化～「無い」ものを可視化する～”

渡辺 宙志 (物性研究所)

○ビジュアル賞

“メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算”

矢ヶ崎 琢磨 (岡山大学)

- P-40 坂下 達哉 (東京大学)
「並列固有値ソルバの統一インターフェースを用いた厳密対角化パッケージの開発」
- P-41 榮 慶丈 (名古屋大学)
「アミノ酸の種類ごとに区別したタンパク質系力場の提案」
- P-42 Hui-Hai Zhao (東京大学)
“Tensor Network Method on Finite Lattice with Periodic Boundary Condition”
- P-43 西松 毅 (東北大学)
「3次元FFTのベンチマーク」
- P-44 澁田 靖 (東京大学)
「炭素ナノ材料生成過程の第一原理分子動力学法シミュレーション
—炭素源分子解離機構の解明に向けて—」
- P-45 笠松 秀輔 (東京大学)
「強誘電体薄膜キャパシタの第一原理解析」
- P-46 下司 雅章 (大阪大学)
「CMSIの人材育成 ～計算科学の将来を見据えて～」
- P-47 吉井 範行 (名古屋大学)
「TCCIにおける人材育成・教育活動の報告」
- P-48 寺田 弥生 (東北大学)
「2013年度東北大学計算材料科学研究拠点 (CMRI) 活動報告」
- P-49 五十嵐 亮 (東京大学)
「MateriApps: 物質科学シミュレーションのポータルサイト」