

平成28年度第1回

第35回スパコンセミナー開催案内

テーマ：分子・材料設計の新たな手法開拓に向けて

(インフォマティクスのアプローチを中心に)

産応協は、我が国におけるスーパーコンピューティング技術(パソコンからスパコンまでを対象にした数値シミュレーション/HPC技術)の産業界での基盤技術としての普及促進を目的に、利用者の視点から技術セミナーを企画し、昨年度まで34回開催してきました。スーパーコンピューティングの応用は、科学研究から工学、社会科学など、対象が広がると同時に、その社会的意義・期待も高まりつつあります。本セミナーでは、引き続いて関係分野の有識者をお招きし、最新動向、事例、今後の展望等を紹介していきます。本分野にご関心のある方は是非ご参加下さい。

- ・日時：2016年9月21日(水)13:00～17:00
- ・場所：機械振興会館地下3階研修1号室
- ・定員：60名…先着順に受付、定員に達し次第、締め切りとさせていただきます。
なお、正会員企業(団体)は、無料参加できますので事務局への確認をお願いします。
- ・参加費：50,000円(税込、平成28年度開催の3回分、今後の開催予定は柿をご参照下さい。)一括申込みの場合は、各回何名様でも参加可。また、各回ごとの個別申込み参加費は20,000円/人となりますので、一括申込みの方が割引となります。是非、一括支払いにてお申し込み下さい。
- ・申込み：参加者は、氏名、会社名、所属、住所、電話、メール等必要事項を、事務局までご連絡下さい。お申し込みの確認ができ次第請求書をお送り致しますので、下記口座に参加費をお振込み下さい。
- ・主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- ・プログラム

13:00～13:05	開会ご挨拶
13:05～13:50	「データ集約型化学研究へのパラダイムシフト ～分野融合がもたらす可能性～」 東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 教授 船津公人
13:50～14:35	「データベースとインフォマティクスを活用した蓄電池材料の探索」 名古屋工業大学 大学院 工学研究科 生命・応用化学専攻 教授 中山将伸
14:35～14:50	休 憩
14:50～15:35	「先進計算スクリーニングによる新規半導体の開拓」 東京工業大学 科学技術創成研究院フロンティア材料研究所 教授 大場史康
15:35～16:15	「物質・材料科学における機械学習の先端応用：現状と展望」 大学共同利用開発法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所 モデリング研究系・データ同化研究開発センター 准教授 吉田 亮
16:15～16:55	「材料設計の新たな潮流～マテリアルズインフォマティクス(仮題)」 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授 岡田真人
16:55～17:00	閉会の挨拶

<情報共有>

ポスト「京」の開発状況 (開発スケジュールの変更について)

文部科学省は、平成 28 年 8 月 12 日付で公開

【現況】

○最先端の半導体の設計・製造については、微細化の進展に伴う加工技術開発の困難さや、製造コストの上昇により、これまでの、いわゆる「ムーアの法則」※に沿った進歩が鈍化し、近年、世界的な遅延が生じている状況にある。

○そのような状況を踏まえ、文部科学省は、外部有識者により、メモリ及びCPU（中央演算処理装置）に係る半導体技術に関して、ポスト「京」の開発目標、開発スケジュール及びコスト（予算）への影響を含めたシステム開発に係る技術的な検証を行った。

【検証結果】

○メモリ及びCPUに係る半導体技術について、新たな技術を採用する。

○ポスト「京」のコスト（予算）及びその開発目標に変更はない。
(開発目標を達成する見込み。)

○12 か月から 24 か月間、システム開発スケジュールに遅延が生じる。

なお、開発のショア再スケジュールについては、文部科学省から発表されているサイトをご参照ください。

ポスト「京」の開発状況（開発スケジュールの変更について）

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/shiryo/_icsFiles/afiefieldfile/2016/08/12/1375559_08.pdf

HPC 産業利用スクール

オータムスクール 16 開講案内

テーマ:粒子法を体験しよう!!

今回のテーマである「粒子法」は、いろいろな分野に適用可能で、機械系企業だけでなく材料系企業の方々にとっても大変有益であることから、特に関心を持っておられる担当の方の参加を頂き、現場での共通課題について率直な討論ができる、またとない機会を企画させていただきました。

このため、長年にわたり「粒子法」の開発に取り組んでこられた酒井氏を迎え、基礎理論から産業界での実施例、今後利用が期待される分野について講演して頂きます。さらに、粒子法として今注目されている「SPHinx」を用いて、実務適用に関する講義、および参加者による実習を行います。

各種解析に取り組み始めた若手から中堅技術者まで、意欲ある方のご参加をお待ちしております。詳細については、産応協ホームページ並びに事務局へお問い合わせ下さい。

事務局:03-6435-5425, E-mail:contact@icscp.jp

HP:http://www.icscp.jp/

- ・日時:2016年10月14日(金)13:00~10月15日(土)~14:00(一泊二日)
- ・場所:クリアビューホテル
- ・参加者:30名
- ・主催:スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

- ・ 協力: (株)SPH 研究所
 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター
 公益財団法人計算科学振興財団
 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

- ・ プログラム

1日目 10月14日 (金)	13:00-	オリエンテーション	諸注意、自己紹介など	
	13:20-	基調講演	SPH粒子法の基礎理論と 固体、流体、粉体解析への 展開	株式会社SPH研究所 代表取締役会長 酒井 譲 様 (現横浜国立大学名誉教授、同特任教授)
	15:00-	講義&実習	SPHinxを使ってみよう!	横浜国立大学 大学院環境情報学府 客員研究員 呂 学龍 様
	18:30-	夕食	懇親会	
2日目 10月15日 (土)	9:00-	オリエンテーション	二日目の進め方	
	9:10-	グループ討議	グループ毎のテーマでディスカッション	
	12:00-	まとめ	総括、アンケート記入	
	12:30-	昼食	(ホテル 13:00出発、柏の葉キャンパス駅へ)	

連携イベントのご案内

第2回材料系ワークショップ開催のお知らせ

コンピュータの計算パワーが増大したことにより高分子材料の粗視化計算など大規模な計算が行えるようになり、計算機を利用した新機能あるいは高機能な材料に関する先端的な研究や実証計算がなされています。その重要な手法の一つとなっているのが分子動力学法による数値シミュレーションです。

本ワークショップ(WS)は、古典分子動力学アプリケーションの中でも特に利用者の多いLAMMPSを始めとして、OCTAやMODYLASなどの研究活用事例や、これらを使った大規模計算を行うためのノウハウ、分子動力学アプリケーションにおけるチューニング手法などの話題を取り上げ、これから使用してみたいという方から、大規模な計算を検討されている方、大規模計算を行う上でさらなる高度化を検討されている方までのすべての方に有益となる話題を取り上げております。

さらに、各アプリケーションのHPCI(全国の研究機関に設置されているスーパーコンピュータ)での動作状況や、性能情報、支援体制などをご紹介します。各アプリケーションには、分子動力学計算の入出力ファイルを効率的に管理できるGUI支援ソフトも含まれています。

同時に、企業や研究機関において、「京」を中核としたHPCIをご利用頂くための申請手続きや支援サービスなどについての利用相談は、個別にいつでも(13:00~18:30)対応していますので、遠慮なくお申し出ください。

主催：一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

共催：ポスト「京」重点課題⑤「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」、同⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

協賛：産応協、ポスト「京」重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」、
計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)、情報統合型物質・材料研究拠点
(MI2I)、日本材料学会

日時：2016年10月4日(火) 13:00~18:30 (12:30 受付開始)

場所：秋葉原 UDX 4階 NEXT-1 (東京都千代田区) ※JR 秋葉原駅電気街口徒歩2分

プログラム：座長：奥田 基 (高度情報科学技術研究機構)、茂本 勇 (東レ株式会社)

13:00-13:05 開会挨拶

塩原 紀行 (高度情報科学技術研究機構)

13:05-13:30 材料系アプリケーションの紹介：利用環境と支援体制

吉澤 香奈子 (高度情報科学技術研究機構)

13:30-14:05 計算科学による高分子材料設計の展望

茂本 勇 (東レ株式会社)

14:05-14:40 日本材料学会分子動力学部門委員会における原子・電子シミュレーションの
社会人教育及び産学連携事例紹介

泉 聡志 (東京大学大学院)

14:40-15:15 末端変性スチレンブタジエンゴム配合物の大規模粗視化分子動力学シミュ
レーション

富永 哲雄 (JSR 株式会社)

15:15-15:30 <休憩>

15:30-16:05 OCTA を用いた高分子材料の粗視化 MD シミュレーション

森田 裕史 (産業技術総合研究所)

16:05-16:40 汎用 MD 計算ソフト MODYLAS による大規模シミュレーション

安藤 嘉倫 (名古屋大学大学院)

16:40-17:15 金属材料組織生成過程の大規模分子動力学法シミュレーション

濫田 靖 (東京大学大学院)

17:15-17:30 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題の募集案内

新宮 哲 (高度情報科学技術研究機構)

17:30-17:35 閉会挨拶

17:35-18:30 情報交換会 (希望者のみ:参加費 1,000 円)

※HPCI 利用のための利用相談は、個別にいつでも (13:00~18:30) 対応していますの
で、ご希望の方は当日お申し出ください。

※プログラムは予告なく変更する場合があります。

参加費/定員：無料/120名

お問い合わせ先：高度情報科学技術研究機構 ワークショップ担当

[hpci-seminar\[-at-\]hpci-office.jp](mailto:hpci-seminar[-at-]hpci-office.jp) ([-at-]は@にしてください。)

申し込み締め切り：2016年9月26日(月) 17:00 ※定員になり次第締め切ります。

第9回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム

開催に伴う準備委員会の設置

産応協は、昨年度設立10周年を迎えて、記念行事として第8回シンポジウムを2015年12月17日(水)コクヨホール(品川)で開催しました。本年度は、平成28年7月8日に開催した第20回企画委員会で第9回シンポジウム開催について検討した結果、昨年度に引き続き、12月21日(水)イノカンファレンスホールで開催することが決定され、平成28年8月15日に第一回準備委員会を開催し、プログラム実施構成、講師選定、講師選定への分担等を検討しました。また、シンポジウム開催に当たり、今まで通り、企画委員会/実行委員会の各委員の全面的な支援、協力を得ることとしました。

平成 29 年度スーパーコンピュータ「京」・HPCI システム利用研究課題の募集(年二回募集の第一回目)について

一般財団法人高度情報科学技術研究機構 1(RIST)は、平成 28 年 8 月 8 日付で以下の発表がありました。

平成28年9月7日より、スーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCIシステム(*2) 共用計算資源を用いた平成29年度利用研究課題の募集を開始します。

平成29年度からは、「京」に係る課題を年二回に分けて実施することにより、研究者の研究の進展に合わせた、より柔軟な「京」の利用が可能になります。

募集の概要、スケジュール、募集説明会の日程は以下の通りです。

<第一回目の課題募集(A期実施課題)の概要>

募集対象資源	募集対象課題	課題実施期間
「京」	一般課題 産業利用課題(実証利用) 若手人材育成課題	・平成 29 年 4 月～平成 30 年 3 月(1年) ・平成 29 年 4 月～平成 29 年 9 月(半年)
「京」以外の HPCI システム	一般課題 産業利用課題(実証利用)	・平成 29 年 4 月～平成 30 年 3 月(1年)

<第一回目の課題募集(A期実施課題)のスケジュール>

課題募集開始及び申請書配布開始：平成 28 年 9 月 7 日(水)

課題申請書受付開始：平成 28 年 10 月 6 日(木)

課題申請書受付締切：平成 28 年 11 月 7 日(月)

課題選定結果発表：平成 29 年 2 月初旬

課題開始期日：平成 29 年 4 月 1 日(土)

<課題募集説明会の日程>

(神戸) 9月9日(金) 14:00～16:00 理化学研究所 計算科学研究機構

(東京) 9月14日(水) 14:00～16:00 コンベンションルーム AP 品川

(大阪) 9月16日(金) 14:00～16:00 グランフロント大阪 ナレッジキャピタル

(東京) 9月30日(金) 14:00～16:00 東京工業大学大岡山キャンパス学術国際情報センター(情)

◆問い合わせ先

一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター 共用促進部 河合、峯尾

〒650-0047 神戸市中央区港島南町 1-5-2 TEL: 078-599-9511 FAX: 078-599-9513

E-mail: koho@hpci-office.jp

ヘルプデスク:

TEL: 078-940-5795 FAX: 078-304-4959 E-mail: helpdesk@hpci-office.jp

今後の予定

9/8 第 21 回実行委員会開催

9/28 第 21 回企画委員会開催

[産応協事務局]

事務局は「虎ノ門」に設けておりますので、お問い合わせをお待ちしております。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

事務局 滝口、清

電話 03-6435-5425 Email:icscp@nifty.com