

## 産応協平成 28 年度第 3 回スパコンセミナー共催イベント

### 第 3 回材料系ワークショップ開催報告

#### ～計算物質科学を拓く第一原理計算とその機能モジュール～

平成 28 年度における第 3 回スパコンセミナーの実施は、一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)が主催する第 3 回材料系ワークショップの共催に賛同して、企画立案に参画して開催をいたしました。

本ワークショップ(WS)は、企業や研究機関などの材料系分野の研究・開発者の方に、計算シミュレーションの使い方や有効性を知って頂くことを目的に、材料系アプリケーションの研究活用事例や、大規模計算を行うためのノウハウ、チューニング手法などの話題を取り上げました。

物質・材料の性質は、原子や分子の状態によって決まるので、第一原理シミュレーションは原子・分子スケールの現象を明らかにできる強力なツールです。今回の WS は、第一原理計算の話題を中心とし、

- ・大規模計算を可能にする FMO、燃料電池等への応用で注目される ESM など第一原理計算の専用機能や、ポストアプリケーション、GUI 支援ツールの紹介
- ・物質材料科学とデータ科学を融合させるマテリアルズインフォマティクスへの取り組みの紹介
- ・産官学連携推進のためのより良い関係構築、枠組作りのために、情報交換、意見交換を行うパネルディスカッション

等からなるプログラム構成で行いました。

また、RIST からは、企業や研究機関において、「京」を中核とした HPCI をご利用いただ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を同時に行いました。

#### 主催・共催・協賛

主催：一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)

共催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)、ポスト「京」重点課題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⑥「革新的クリーンシステムの実用化」、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：TIA かけはし、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・材料開発タイプ(MI<sup>2</sup>I)、日本材料学会

日時 2017 年 2 月 23 日(木) 10:00～17:30 (9:30 受付開始)

場所:秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1 (東京都千代田区) 参加者:109 名 (うち産応協関係 18 名)



<会場風景>



<株式会社村田製作所 榎貝信一氏>  
“産業界における高精度材料  
科学技術への取り組み”