

第 3 回材料系ワークショップ

～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～

2017 年 2 月 23 日 (木) 10:00～17:30 秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1

「京」における国家プロジェクト HPCI 戦略プログラムなどでは、「京」の超大規模計算機を活用するため、多様なアプリケーションが開発され、なかでも材料系分野（戦略分野 2、4）で開発されたアプリケーションの一部は、産業界の先端的なユーザにも利用され、成果を上げてきました。また HPCI 戦略プログラムに続くポスト「京」重点課題 5、6、7 などでは、材料系分野のアプリケーションの開発が進められています。しかし、我が国の産業競争力強化やその成果の創成へ向けて、産業界における HPC 活用のより一層の高度化・拡大、優れたアプリケーションの産業界への普及促進が不可欠です。

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す。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まで幅広く、利用者に有益となるような情報提供を行います。

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

などのプログラムになっています。関係者のご参加をお待ちしております。

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を行いますので、ご遠慮なくお申し出ください。

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

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⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」、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・材料開発イニシアティブ (MI²I)、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) ※JR 秋葉原駅電気街口徒歩 2 分

プログラム（敬称略）

座長：小久保 達信（高度情報科学技術研究機構）、杉野 修（東京大学物性研究所）、
小野 倫也（筑波大学）

10:00- 10:05	開会挨拶 塩原 紀行（高度情報科学技術研究機構）
10:05- 10:30	第一原理計算アプリケーションの紹介：利用環境と支援体制および、GUI 支援ツールについて 吉澤 香奈子（高度情報科学技術研究機構）
10:30- 10:55	非調和フォノン物性の第一原理計算：プログラム開発とマテリアルズインフォマティクスへ向けた取り組み 只野 央将（物質・材料研究機構）
10:55- 11:30	ABINIT-MPプログラムの整備状況、先導的な応用事例、解析の自動化の紹介 望月 祐志（立教大学） / 加藤 幸一郎（みずほ情報総研）
11:30- 12:30	<ランチタイム>
12:30- 13:05	産業界における高精度材料計算科学技術への取り組み：第一原理的計算を中心に 榎貝 信一（株式会社村田製作所、先端素材高速開発技術研究組合（Hi-Mat）、CAMM フォーラム）
13:05- 13:40	蓄電池・燃料電池などの電圧が印加された固液界面における第一原理シミュレーション 大谷 実（産業技術総合研究所）
13:40- 14:15	第一原理計算プログラム PHASE/0 による大規模シミュレーション 奈良 純（物質・材料研究機構）
14:15- 14:35	<休憩>
14:35- 15:10	パルス光と物質の相互作用に対する第一原理計算：プログラム開発と応用 矢花 一浩（筑波大学）
15:10- 15:25	「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）
15:25- 15:35	<休憩>
	「計算物質科学のエコシステム構築に向けて」
15:35- 16:45	パネルディスカッション モデレータ：古宇田 光（東京大学物性研究所） パネリスト：常行 真司（東京大学） / 茂本 勇（東レ株式会社、産応協） / 古賀 良太（株式会社クロスアビリティ） / 奥田 基（高度情報科学技術研究機構）
16:45- 17:30	HPCI 利用相談、情報交換（希望者のみ）

※プログラムは予告なく変更する場合があります。

参加：無料/定員：120 名程度

申込み：申込みフォームからお申込みください。※お申込み受付後、受付通知メールを送付させていただきます。/ **申込締切** 2017年2月20日（月） 17:00

お問い合わせ：高度情報科学技術研究機構 ワークショップ担当

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