

文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
第2回次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会

主催： 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
共催： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
協賛： 計算物質科学イニシアティブ (CMS I)、他 予定

後援： 計算科学振興財団
日時： 2012年1月26日 (木) 10:00 - 18:30 及び 懇親会
場所： 学士会館 2階 210号室
東京都千代田区神田錦町3-28 電話：03-3292-5936
<http://www.gakushikaikan.co.jp/info/access.html>

参加費： 無料 [但し、懇親会は5,000円 (当日、受付にて頂戴いたします。)]

懇親会： 学士会館 2階 201号室

参加登録： 以下よりお申し込みをお願い致します。

<http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/nanosoft2012/index.html>

参加登録締切：2012年1月20日 (金)

ポスター発表予稿締切：2011年12月5日 (月)

お問い合わせ先：

〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中38番地 計算科学研究センター内
自然科学研究機構 分子科学研究所
次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 事務局
TEL: 0564-55-7075 FAX: 0564-55-7025
E-mail: nanogc1@nanogc.ims.ac.jp

講演プログラム

1. ご挨拶

座長：常行 真司 (東大院理/物性研)

10:00 - 10:05 (分子研)	平田 文男	開会の辞
10:05 - 10:10 (文科省)	文科省	ご挨拶
10:10 - 10:15 (産応協)	産応協	ご挨拶
10:15 - 10:20		事務連絡

10:20 - 10:30 休憩

2. 次世代ナノ統合ソフトウェア

座長：岡崎 進 (名大院工/分子研)

10:30 - 10:50 (分子研)	平田 文男	拠点報告
10:50 - 11:10 (分子研)	江原 正博	ナノ統合ソフトの概要
11:10 - 11:20 (分子研)	岩橋 建輔	IGNITIONの紹介
11:20 - 11:30 (分子研)	水谷 文保	密結合環境による複数アプリ間連成処理の実現

11:30 - 13:00 休憩・昼食(各自)

3. 中核アプリの紹介

座長：江原 正博 (分子研)

13:00 - 13:20 (東大院工)	岩田 潤一	実空間密度汎関数法
13:20 - 13:40 (京大基研)	遠山 貴巳	動的密度行列繰り込み群法
13:40 - 14:00 (東大物性研)	藤堂 眞治	大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper
14:00 - 14:20 (名大院工/分子研)	岡崎 進	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト -Modylas-
14:20 - 14:40 (分子研)	吉田 紀生	RISM/3D-RISMの概要と分子認識解析への応用
14:40 - 15:00 (産総研/京大院薬)	北浦 和夫	フラグメント分子軌道法と大規模分子系への応用

15:00 - 15:15 休憩

4. 付加機能ソフトの紹介

座長：平田 文男 (分子研)

15:15 - 15:30 (筑波大院数物)	小林 伸彦	量子伝導計算
15:30 - 15:45 (日立中央研究所)	市村 雅彦	有限要素法によるスピン蓄積の解析
15:45 - 16:00 (東大院理)	宮下 精二	散逸環境下での量子ダイナミクス
16:00 - 16:15 (名大院理)	岡本 祐幸	付加機能ソフト:REM(レプリカ交換法)

16:15	—	16:30	(京大化研)	松林 伸幸	ermodを用いた凝縮系の自由エネルギー計算
16:30	—	16:45	(東北大院理)	森田 明弘	界面非線形分光の解析計算ソフトCalnosの開発
16:45	—	17:00	(分子研)	江原 正博	付加機能ソフト一覧紹介

5. ポスターセッション@201号室ロビー

(プログラム紹介を中心として)

17:00 — 18:30

- 中核アプリ
- 付加機能ソフト
- 連携ツール

18:30 — 20:00 懇親会 @201号室

注. 講演プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願い致します