

12-1 高分子計算機科学研究会

「大規模計算機シミュレーションが拓く高分子研究の新展開」

<趣旨>近年の計算機性能の発展に伴い、分子シミュレーションの領域においても大規模な並列計算が適用される例が増えてきました。高分子はそれ自体広がりを持った絡み合い構造を有しており、長時間の緩和挙動を示すなど、空間と時間両方の面において、大規模計算が求められる領域であると言えます。

PC クラスタによる小～中規模の並列計算から、公的機関のスーパーコンピュータを用いた大規模並列計算まで、目的に応じて用いる計算機および並列計算技術は異なってきます。最近のトピックであるスーパーコンピュータ「京」の一般利用が開始されたことや、大学の計算機センターの利用環境の整備が進んでいることを考えると、今後ますます大規模計算が身近になっていくことが予想されます。一方で、既存プログラムの改良や可視化に関する技術など、実際に並列計算を行うにあたって必要な情報は現状ではまだ不足しています。

本研究会では、既に大規模シミュレーション研究に取り組んでいる方やこれから大規模シミュレーション研究に携わろうとしている方を対象に、先端研究から企業での産業利用例までを含めて、当該分野の研究者をお招きして様々な大規模シミュレーション技術について分かりやすく説明していただきます。

主 催 高分子学会 高分子計算機科学研究会
日 時 3月6日(水) 10:00~16:30
会 場 東京工業大学大岡山キャンパス蔵前会館 3F 手島精一記念会議室
(東京都目黒区大岡山 2-12-1 TEL: 03-5734-3737)
交 通 東急目黒線・大井町線 大岡山駅下車 徒歩約1分

プログラム

<10:00~11:00>

1. 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylasの開発
- ウイルスの全原子シミュレーションへ向けて (名大院工) 岡崎 進

<11:00~12:00>

2. GPUによる大規模分子動力学シミュレーション (電通大情報理工) 成見 哲

<13:00~14:00>

3. SCFの大規模計算 (日本ゼオン) 本田 隆

<14:00~15:00>

4. 「京」の活用事例 - PHASE の性能最適化を通じて (理研) 黒田 明義

<15:30~16:00>

5. 京コンピュータを用いたゴム複合材料の大規模計算 (三ツ星ベルト) 柳生 裕聖

<16:00~16:30>

6. 京コンピュータを用いた大規模粗視化分子動力学シミュレーションの検討 (住友ゴム) 坂牧 隆司

参加要領

1) 定員 50 名

2) 参加費 ①企業 5,250 円 ②大学・官公庁 3,150 円 ③学生 2,100 円

④名誉・終身・フェロー・ゴールド・シニア会員 2,100 円

(高分子計算機科学研究会メンバー 無料)

3) 申込方法 高分子学会ホームページ (<http://www.spsj.or.jp/entry/>) からお申込みください。

参加証、請求書(希望者のみ)を送付いたします。

参加費は、開催日までにお振込みをお願いいたします。

4) 振込先 銀行振込<三菱東京UFJ銀行 銀座支店(普通) 1126232 名義(社)高分子学会>

郵便振替<00110-6-111688 名義(社)高分子学会>

5) その他 演題・講演者は予告なく変更になる場合がございます。予めご了承下さい。

問 合 先 〒104-0042 東京都中央区入船 3-10-9 新富町ビル

高分子学会 12-1 高分子計算機科学研究会係

TEL 03-5540-3770 FAX 03-5540-3737

行事参加申込 QR コード
<http://www.spsj.or.jp/entry/>

