

筑波大学 計算科学研究センター主催

「先端学際計算科学共同研究拠点キックオフ・シンポジウム」  
第一回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム  
--ポストペタスケールコンピューティングへの学際計算科学の展開--

主催： 筑波大学計算科学研究センター  
日時： 平成 22 年 5 月 6 日（木）～7 日（金）  
場所： 筑波大学大学会館 国際会議場

筑波大学計算科学研究センター長  
佐藤 三久

平成 22 年度から国立大学法人の第二期中期目標・中期計画期間が始まり、筑波大学計算科学研究センターでは、共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として、活動を行います。「共同利用・共同研究拠点」は、全国の関連研究者が共同で利用することにより、我が国の学術の発展に特に資する施設を、文部科学大臣が拠点として認定し、国全体の学術の発展を図ることを目的として 2008 年度から文部科学省が行っている事業で、当センターは計算科学と計算機科学の協働により計算科学の先端を切り拓く学際計算科学を推進する「先端学際計算科学共同研究拠点」として認定されました。

現在、十数ペタフロップスの性能を持つ国の次世代スーパーコンピュータの開発・構築が進められており、計算科学の研究体制の構築が進む中、新たな学術研究を目指し、わが国の計算科学の長期的ビジョンが必要となってきております。このような状況に鑑み、「先端学際計算科学共同研究拠点」のキックオフを機会に、拠点の基本コンセプトである学際計算科学とこれからの計算科学を議論するシンポジウムを開催することにしました。

シンポジウムの趣旨にご賛同いただき、ご協力をお願いする次第です。

**【開催趣旨】**

共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」のキックオフを機会に、拠点の基本コンセプトである、計算科学と計算機科学の協働により計算科学の先端を切り拓く学際計算科学の課題と、国の次世代スパコンの構築・研究体制の整備が進む中、これを踏まえて、新たな学術研究を目指した最先端の学際計算科学の長期的ビジョンについて議論する。「先端学際計算科学共同研究拠点」の概要について明らかにするとともに、次世代スパコン研究開発機関、および次世代スパコン戦略分野の主要戦略機関から有識者をお招し、講演頂き、これからの展開・展望について議論を行う。

また、当拠点で行われている学際計算科学の取組みについても報告する。

平成22年5月6日(木)

【司会】 朴 泰祐 (計算科学研究センター)

13:00 開会挨拶

佐藤 三久 (筑波大学・計算科学研究センター長)

13:15 学長挨拶

山田信博 (筑波大学・学長)

13:25 来賓挨拶

文部科学省ご来賓

13:35 計算科学研究センター名誉フェロー表彰式

13:50 記念講演

「計算科学研究拠点の形成 ～センター設立の頃を回顧して～」

岩崎洋一 (高エネルギー加速器研究機構監事/前筑波大学学長)

14:20 招待講演

「ナノ分野における『グランドチャレンジ』課題への挑戦と計算科学」

平田文男 (自然科学研究機構・岡崎共通施設・計算科学研究センター長/  
文科省「次世代スパコン」プロジェクト「ナノ統合」拠点長)

14:50 休憩

【司会】 北川 博之 (計算科学研究センター)

15:05 招待講演

「次世代スパコン開発に向けて」

石川裕 (東京大学・情報基盤センター長)

15:35 招待講演

「計算科学が推進する学際融合 --- 素粒子・原子核・宇宙分野の取り組み」

橋本省二 (高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・准教授)

16:05 招待講演

「ポストペタスケールの計算機システム

～ ヘテロ, マルチコア, 加速器, 超並列, 大規模ストレージ ～」

松岡聡 (東京工業大学・学術国際情報センター・教授)

16:35 休憩

【司会】 佐藤 三久 (計算科学研究センター)

16:50 計算科学研究センター・新研究部門紹介

(計算科学研究センター・各研究部門主任)

18:35 閉会挨拶

宇川彰 (筑波大学・副学長)

18:45 懇親会 大学会館レストラン

平成22年5月7日(金)

平成21年度 学際共同利用成果報告会

発表 10分+質疑 3分

- 10:00 「configuration interaction による QMC 全エネルギー評価の改善」  
木野日織 (物質・材料研究機構)
- 10:13 「大気大循環モデル NICAM による台風の再現計算と領域気候モデル WRF による都市気候の将来予測」  
日下博幸 (筑波大学)
- 10:26 「格子 QCD によるバリオン間相互作用の研究」  
石井理修 (東京大学)
- 10:39 「格子 QCD による  $\pi$ -K 散乱長の研究」  
佐々木 潔 (東京工業大学)
- 10:52 「テラヘルツ波駆動半導体超格子における動的ファノ効果」  
前島展也 (筑波大学)
- 11:05 「中重質量領域における光核反応断面積の TDDFT 線形応答計算」  
中務 孝 (理化学研究所)
- 11:18 「実空間密度汎関数法による Si ナノ構造体の大規模電子構造計算」  
岩田潤一 (筑波大学)

—休憩—

【座長】 白石 賢二 (計算科学研究センター)

- 11:45 「生体高分子機能の動力的解析」  
舘野 賢 (筑波大学)
- 11:58 「半導体デバイスにおけるキャリア輸送の大規模分子動力学シミュレーション」  
神岡武文 (早稲田大学)
- 12:11 「パルスレーザーが誘起する電子・フォノンダイナミクスの第一原理計算」  
矢花一浩 (筑波大学)
- 12:24 「不均質な系における粒子コードの効率的並列化」  
坂上仁志 (核融合科学研究所)
- 12:37 「オーダーN法第一原理計算プログラム CONQUEST による大規模計算」  
宮崎剛 (物質・材料研究機構)
- 12:50 「多成分自己重力系の緩和過程」  
梅村雅之 (筑波大学)
- 13:03 「格子 QCD を用いたチャーモニウム核子間相互作用の研究」  
佐々木勝一 (東京大学)

－昼食－

【座長】 田中 博（計算科学研究センター）

- 14:15 「ヒューリスティックな樹形探索効率評価」  
稲垣祐司（筑波大学）
- 14:28 「最尤系統樹の信頼性に対する樹形探索労力量と初期樹形の影響」  
田辺晶史（筑波大学）
- 14:41 「HIV-1 プロテアーゼ複合体における相互作用エネルギーの DFT 計算」  
岩瀬智行（筑波大学）
- 14:54 「実空間差分法に基づく第一原理電子構造・量子輸送特性計算コードとそのアプリケーション」  
小野倫也（大阪大学）
- 15:07 「マルチコア／マルチレーン・クラスタにおける性能評価及び最適化」  
朴 泰祐（筑波大学）
- 15:20 「並列固有値解法の ILC 加速器設計への応用」  
櫻井鉄也（筑波大学）
- 15:33 「格子ゲージ理論を用いたクォーク・グルオンプラズマ相の研究  
・高エネルギー重イオン衝突におけるチャーモニウム」  
野中千穂（名古屋大学）

－休憩－

【座長】 梅村 雅之（計算科学研究センター）

- 16:00 「ナノスケール系の量子伝導シミュレーション」  
小林伸彦（筑波大学）
- 16:13 「物理的クォーク質量における 2+1 フレーバー格子 QCD」  
蔵増嘉伸（筑波大学）
- 16:26 「回転球殻熱対流系における帯状流の形成」  
陰山 聡（神戸大学）
- 16:39 「次世代スーパーコンピュータに向けたグランドチャレンジ・アプリケーションの開発」  
高橋大介（筑波大学）
- 16:52 「DFT ベース On The Fly MD 計算の実証と応用」  
館山佳尚（物質・材料研究機構）
- 17:05 「強レーザー場における分子過程に関する時間発展計算法」  
全 暁民（筑波大学）