

# 第12回稲盛フロンティア研究講演会

## 「実践的課題への応用に向けた大規模計算技術の可能性」

スーパーコンピュータ『京』に代表される大規模計算機を活用した実践的課題解決を目指した電子状態計算には計算機科学と計算科学の連携が不可欠です。本セミナーでは最先端の大規模計算のプログラミング開発および応用計算に関するご講演をいただき、関連する研究者を交えて討論を行います。

日時：2015年1月23日 13:30～17:45

場所：セミナー室（九州大学伊都キャンパス 稲盛財団記念館2F）

参加：無料

申込：shimizu @ ifrc.kyushu-u.ac.jp まで

### プログラム（案）

13:30 青木百合子(九州大学)

「大規模原子分子系の機能設計のための高速高精度量子化学計算法  
-Elongation法-の開発」

14:15 梅田宏明(筑波大学)

「大規模分子軌道計算に向けたFMO計算プログラムのGPGPU化」

14:45 川島雪生(理化学研究所)

「経路積分分子動力学シミュレーションを用いた大規模計算の可能性」

15:15 難波優輔(産業技術総合研究所)

「高エネルギー分光を用いたリチウムイオン二次電池正極材料の電子状態  
解析とその課題」

15:45 休憩

16:00 南里豪志(九州大学)

「スーパーコンピュータがプログラムを高速に実行できる理由  
(もしくはできない理由)」

16:45 本田宏明(九州大学)

「ACP通信ライブラリによる集団通信の実装とRHF計算」

17:15 石元孝佳(九州大学)

「大規模計算を活用した金属ナノ粒子の物性発現機構の解析」

18:00 意見交換会

### 問い合わせ

九州大学稲盛フロンティア研究センター

次世代エネルギー研究部門

古山通久・石元孝佳・清水美幸

TEL/FAX 092-802-6968/6969

e-mail: shimizu @ ifrc.kyushu-u.ac.jp

主催：九州大学稲盛フロンティア研究センター

共催：触媒学会コンピュータの利用研究会

