

## 第2回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム –ソフトマター科学を中心として–

**開催趣旨:** SPring-8、J-PARC/MLF 等の大型実験施設と「京」をはじめとするスーパーコンピュータとの連携利用は、数値シミュレーション手法と実験的手法の特性を相互に補い合う形での研究成果の創出につながり、その推進は多方面から期待されています。本シンポジウムは、この連携利用促進のため昨年に引き続き開催されます。本年はソフトマター科学を中心テーマとし、この分野に於いてすでに実施されている連携利用の研究事例や今後の連携利用を見据えた実験側、計算側の研究内容を紹介していただきます。プログラムの最後に連携利用推進の課題についてパネル・ディスカッションを行います。また、副会場では物質科学計算パッケージソフトの講習会、物質材料計算ソフトウェア紹介展示、物質科学計算・連携利用コンサルティング、各施設(SPring-8、J-PARC/MLF、「京」を中核とする HPCI 共用計算資源)の利用方法の案内ポスター展示等が行われます。

**主催:** (公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)、(一財)総合科学研究機構(CROSS)  
 (一財)高度情報科学技術研究機構(RIST)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI;HPCI 戦略プログラム「新物質・エネルギー創成」/  
 ポスト「京」重点課題(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:** 理化学研究所、J-PARC センター、日本放射光学会、日本中性子科学会、(公財)高分子学会、光ビームプラットフォーム

**後援:** 文部科学省、兵庫県、茨城県

**日時:** 平成 27 年 9 月 2 日(水)9:00~18:00

**場所:** 東京・秋葉原 UDX 4 階 NEXT-1 & NEXT-2

**参加人数:** 150 名程度(どなたでも自由に参加いただけます)

プログラム			
Time Table	NEXT-1(主会場)		NEXT-2(副会場)
9:15-10:45			オプション・セッション
			物質科学計算パッケージソフト MateriApps LIVE!(マテリアアップスライブ)講習会 講師:藤堂眞治(東京大学大学院理学系研究科) 定員:30 名程度(事前申し込み・先着順)
10:50-12:15	第 1 セッション	座長:木村晴行(RIST)	展示等
10:50-10:55	開会挨拶	藤田浩(JASRI 常務理事) 横溝英明(CROSS 東海事業 センター長)	①物質材料計算ソフトウェア紹介展示 (5~6 の基本アプリを予定&事例紹介)
10:55-11:35	連携利用事例紹介 1-1 大規模並列分子動力学シミュレーションによるフェノ ール樹脂の構造・物性相関の解明(仮)	首藤靖幸 (住友ベークライト)	②各施設利用方法の案内ポスター展示 (JASRI, CROSS, RIST の 3 機関) ③3D プリンター試作パイロット事業紹介

11:35-12:15	<b>1-2</b> 大規模粗視化 MD シミュレーションを用いた次世代高機能ポリマー材料の開発(仮)	富永哲雄 (JSR)	
12:15-13:15	ランチ		Coffee Break 会場
13:15-14:35	<b>第2セッション Part 1</b>	座長:佐野則道 (JASRI)	展示等
13:15-13:55	ー連携利用を見据えた実験側/計算側からの研究紹介ー	本田隆 (日本ゼオン)	①-③同上 ④物質科学計算・連携利用コンサルティング (事前申し込み制)
13:55-14:35	<b>2-1</b> 異なる構造をもつ熱可塑性エラストマー混合物のマイクロ相分離構造と力学物性の関係(仮)	萩田克美 (防衛大学校)	
	<b>2-2</b> モンテカルロ探索による散乱関数からの逆問題的構造推定への挑戦(仮)		
14:35-14:50	休憩(Coffee Break)		Coffee Break 会場
14:50-16:10	<b>第2セッション Part 2</b>	座長:福島喜章 (CROSS)	展示等
14:50-15:30	ー同上一	金谷利治 (J-PARC センター)	①-④同上
15:30-16:10	<b>2-3</b> 量子ビームによるゴム状高分子のダイナミクス	寺田弥生 (東北大学)	
	<b>2-4</b> マルチスケール物質科学のソフトマターへの適用ーコロイド分散系をモデルとした実験・計算連携によるダイナミクスの理解ー(仮)		
16:10-16:25	休憩(Coffee Break)		Coffee Break 会場
16:25-17:10	<b>第3セッション</b>	司会:木村晴行(RIST)	
16:25-17:05	パネル・ディスカッション ー連携利用推進の課題ー	司会:増淵雄一(名古屋大学) 第1・第2セッション発表者	①-④同上
17:05-17:10	閉会挨拶	平山俊雄(RIST 神戸センター長) 常行真司(東京大学/CMSI 統括責任者)	
17:15-17:45			個別相談&情報交換