

ミクロものづくり岡山

解析支援ネット OKAYAMA 解析技術普及セミナーの開催について ーコンピュータシミュレーションの普及、促進を目指してー

この度、解析支援ネット OKAYAMA（分子解析グループ）では、シミュレーションによる解析・予測技術の普及、促進を目指す先進的な計算科学ソリューションの取り組みを紹介する「解析技術普及セミナー」を以下のように企画しました。

現在、医療・生命、半導体、自動車、福祉などに関連するバイオ・ナノの最先端の研究分野では、ものづくりに伴う膨大なデータを整理統合し、また、予測に基づく制御や高効率化を可能にするコンピュータシミュレーション支援システムの活用は必要不可欠なものとなっています。

本セミナーは、シミュレーションに少しでも関心があり、ものづくりの改善や効率化を望んでいる方であれば、初心者・経験者を問いません。実験系の研究者を含む全ての方にとって有益な分子化学計算ソリューションの実例をわかりやすく聞ける場を提供し、また、シミュレーションソフトウェアやコンピュータシステムに関するちょっとした疑問点にもお答え致します。

ご多忙中の折とは存じますが、万障お繰り合わせの上、是非ともご参加下さい。

コンピュータシミュレーションの普及、促進を目指して： HPC システムズにおける分子化学計算ソリューションの取り組み

日時：9月10日（金）13：30－17：00

場所：岡山理科大学 21号館 4階 情報処理実習室-1

1. はじめに 直島好伸先生 解析支援ネット OKAYAMA 岡山理科大学総合情報学部

2. 講演

1) クラウドコンピューティング型 Gaussian 量子化学計算 13:35-14:10

渡邊啓正氏 HPC システムズ

2008年11月よりHPCシステムズがサービス提供している Gaussian クラウドコンピューティングサービス「@SIM」を概説する。@SIMはスタートアップ費用が低く、初心者でも視覚的に簡単に Gaussian 計算を行えるという特徴がある。@SIMを用いた Gaussian 計算の実例を紹介する。

2) クラウド型 Amber・Gaussian 計算プラットフォーム 14:10-14:45

渡邊啓正氏 HPC システムズ

岡山理科大学直島研究室と共同研究の下でHPCシステムズが開発した、連成分子化学計算プラットフォーム「Hybrid QM/MD Platform」を概説する。本プラットフォームは直島研究室の生体分子計算フローをシステム化し、Webブラウザの簡便なフォームで Amber 計算・Gaussian 計算を自動的に連続して実行できる。

3) 粒子法計算・分子化学計算の GPGPU 高速化 14:45-15:20

英 憲 悦 氏 HPC システムズ

科学技術計算を GPGPU 技術により劇的に高速化した事例を紹介する。(1)HPC システムズが世界で初めて数千万点~1 億点もの粒子を実用的な時間で計算可能とした大規模 3 次元粒子法。(2)GPGPU に対応した高精度かつ高速な分子化学計算エンジン (XA-CUDA-QM 等)。

休 憩 15:20-15:30

4) 質疑応答 15:30-15:50

英 憲 悦 氏・渡 邊 啓 正 氏 HPC システムズ

5) 簡便な分子化学計算環境を体験する 15:50-17:00

渡 邊 啓 正 氏 HPC システムズ

Gaussian クラウドコンピューティングサービス「@SIM」、連成分子化学計算プラットフォーム「Hybrid QM/MD Platform」をとおして、簡便化された分子化学計算環境を体験的に学習する。