

第2回 CMSI 人材育成シンポジウム（配信2） 「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」

日時：2013年12月2日（月），13:00~17:00
場所：豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター マルチメディア教室
主催：大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、
計算物質科学イニシアティブ(CMSI)、
豊橋技術科学大学 次世代シミュレーション技術者教育推進室

参加対象：本学教職員・学生、および一般（学外）（事前登録あり，参加費無料）

概要：京コンピューターの共用が始まって1年が過ぎ、大変多くの利用者が計算を実施、科学的な成果を上げつつあるなか、既に京コンピューターの次のエクサフロップス級のスパコンの実現に向けて話が進められています。しかし、そのような計算機が作られたとき、使う側として直面する問題というものはいくつか挙げられます。その中で今回は2つの事柄に焦点を当てたいと思います。一つが数値誤差で、もう一つは可視化の問題です。超並列計算機を用いた計算では、数値誤差が発生することがありますが、その原因は特定されているものもいくつかありますが、現実のアプリケーションでは様々なアルゴリズムが混ざり合っているので、原因を特定することが難しい場合があります。計算精度が保証されないと結果は意味をなさなくなるので、これは深刻な問題になります。一方、大量の計算データを可視化することも、大変難しい場合があります。これには、結果を理解するために可視化しないといけない場合の問題と、結果を一般の人たちに紹介する場面での問題と、各々の場合による難しさも違ってきます。これは、CMSI の中でも分野によって問題の性質が異なり、一括りにはできないものではありませんが、この問題もプロジェクトとしては非常に大事な問題ですので、今回取り上げてみました。是非活発な議論を期待したいと思います。

プログラム：13:00-13:10 下司雅章（阪大ナノセンター）
「趣旨説明」

13:10-13:50 大石進一（早大理工）
「精度保証付き数値計算とスーパーコンピュータ」

13:50-14:20 片桐孝洋（東大情報基盤センター）、黒田久泰（愛媛大）
「連立一次方程式の反復解法ソルバーにおける並列処理と収束精度の問題について」

14:20 - 14:50 山本有作 (電通大)

「線形計算における誤差解析の事例」

14:50 - 15:20 Break

15:20 - 16:00 小野謙二 (理研)

「大規模な計算結果の可視化における課題とアプローチについて」

16:00 - 16:20 萩田克美 (防大)

「可視化と純粋数学に駆動された計算物質科学の一例
～K4 フェノール樹脂の DFT 計算と古典 MD 計算へ～」

16:20 - 16:40 大綱英生 (ユタ大)

「生物学者のワークフローにフィットさせた可視化解析ソフトの開発と応用」

16:40 - 17:00 まとめ

注意事項： ◆本シンポジウムは、大阪大学と本学をビデオ会議システムで接続し、大阪大学で行われる講演をライブ中継することで行います。

◆参加を希望される方は、第2回 CMSI 人材育成シンポジウム 参加申込フォーム (<http://www.cms-initiative.jp/ja/events/registrationforms/2013-hai-shin2-form>) より、開催日前日 15 時までにお申込みください。その際、受講場所として「豊橋技術科学大学」をお選びください。収容人数を越えた時点で受け付けを締め切りますのでご注意ください。なお、参加人数に余裕がある場合は、事前登録のない方の当日参加を受け付けます。

◆個人情報には正当な理由なく第三者に開示、譲渡、貸与することは一切ありません。但し、お名前、所属、役職に関しては文科省に提出する HPCI 戦略プログラム報告書に記載する場合がございますのでご了承ください。

◆CMSI web にも本シンポジウムに関する情報が掲載されています。
(http://www.cms-initiative.jp/ja/events/jinzai/20131202_jinzai)

担当： 小畑繁昭 (obata@adsim.tut.ac.jp)
濱田信次 (hamada@adsim.tut.ac.jp)

問い合わせ先：次世代シミュレーション技術者教育推進室，田村 (0532-44-6548)

※詳細はホームページでご確認ください：<http://www.adsim.tut.ac.jp/>