

## 物性研究所短期研究会

# 物性研スパコン共同利用CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」の報告

日時：2016年4月4日(月)13:20~5日(火)17:20

場所：東京大学物性研究所 6階大講義室

物性研究所スーパーコンピュータ共同利用・  
計算物質科学研究センター  
合同研究会「計算物質科学の今と未来」

COMPUTATIONAL  
MATERIALS SCIENCE  
— Now and the Future —

ISSP JOINT-USE  
SUPERCOMPUTER/  
CCMS SYMPOSIUM

2016年4月4日(月)~5日(火)  
東京大学物性研究所 6階大講義室

主催：東京大学物性研究所共催：計算物質科学研究センター(CCMS)

世話人代表：杉野修

組織委員：川島 直輝 (物性研 教授)、野口 博司 (物性研 准教授)、渡辺 宙志 (物性研 助教)、笠松 秀輔 (物性研 助教)、野口 良史 (物性研 助教)、小田 竜樹 (金沢大 教授)、吉本 芳英 (東京大 准教授)、川村 光 (大阪大 教授)、岡本 祐幸 (名古屋大 教授)、求 幸年 (東京大 准教授)、川上 養一 (京大 教授)

平成 27 年度の物性研スパコン共同利用果報告会が 2016 年 4 月 4 日(月)から 5 日(火)の二日間にわたって行われた。この研究会は全国の物性研スパコン利用者が集い最新の成果を報告する会合であり、毎年開催されているものである。従来、この研究会は年末年始ごろに行われてきたが、今回は年度が明けてすぐの 4 月初めに開催された。この時期は授業や研究プロジェクトの会合などが始まる前の時期ということで、参加しやすいと好評であった。実際、口頭発表 17 件、ポスター発表 22 件、参加者 134 名(2 日間の延べ人数)と参加者の増加が見られた。今回は通常の報告会に加え、HPCI 戦略プログラム(「京」コンピュータのプロジェクト)の受け皿機関として設立した計算物質科学研究センター(CCMS)の 5 年間の活動を振り返るための企画として開催された。そのため CCMS 関連の講演に重きを置いて企画した。なお、その企画は次の重点課題(ポスト「京」コンピュータに向けてのプロジェクト)に向けてのスタートアップとして位置付けられる。

本研究会での特別講演者は理化学研究所の藤田航平氏であり、「京」全系を使った都市地震シミュレーションに関する研究紹介があった。東京の 10 km × 10 km の領域の都市地震シミュレーションを可能にするために行った非構造格子陰の時間積分有限要素法に基づくアプリ開発の事例が紹介された。特別講演(1 件)の他に招待講演が 16 件行われた。これは CCMS 関連の講演 7 件を含む。招待講演では、物性研スパコンや「京」コンピュータを用いた大規模アプリ開発とそれを用いた物質科学研究の進展に関して、東京大学の赤井久純氏(非平衡 KKR グリーン関数法)、野口良史氏(多体グリーン関数法)、常行真司氏(熱伝導計算手法)、藤堂眞治氏(確率的最適化法)、大塚孝弘氏(変分

モンテカルロ法)、尾崎泰助氏(OpenMX 開発)、押山淳氏(実空間 DFT 計算法)、小沢遼氏(多項式展開法)による講演が行われた。学外からは、大阪大学の石河孝洋氏(新物質探索)、国立国会図書館の北島顕正氏(レアイベントサンプリング)、防衛大学校の萩田克己氏(粗視化 MD)、理研の辻直人氏(非平衡動的平均場)、正木晶子氏(並列化量子モンテカルロ法)、有田亮太郎氏(超伝導転移温度計算)、名古屋大学の安藤嘉倫氏(大規模 MD)の講演が行われた。これに加えて CCMS の吉見一慶氏からは物性研のソフトウェア開発・高度化プロジェクトの成果についての報告があった。

ソフトウェア開発・高度化プロジェクトは平成 27 年度から新たに始まった企画であり、計算物質科学関連のアプリ開発を支援してコミュニティーソフトの基盤強化を図ろうというものである。物性研スパコンの利用者からアプリ開発などに関する希望を前年度末までに募り、その中から審査を経て絞られた数件のテーマに対して CCMS の人員二名が支援してきた。そこから得られた初めての成果に関して報告が行われた。

本研究会では、更新を迎えるシステム B に関してどのようなアーキテクチャーが望ましいのか、今後の物性研スパコンとしてどのようなアーキテクチャーが選択肢に入ってくるのか、それぞれのアーキテクチャーの長所と短所は、ということを議論するためのパネルディスカッションが行われた。パネリストとして、鳥取大の星健夫氏、東北大学の毛利哲夫氏、東京大学の吉本芳英氏と渡辺宙志氏が選ばれ、それぞれ先進のユーザ、金研スパコン関係者、新旧の物性研スパコン管理者としての発言が行われた。会場の参加者からも質問や意見があがり、熱のこもった議論が行われた。

## プログラム

4月4日(月)

---

- 13:20-13:30            Opening
- 13:30-13:55    A01 赤井 久純 (東京大学)  
「非平衡 KKR グリーン関数法の開発とショットキー障壁への応用」
- 13:55-14:20    A02 野口 良史 (東京大学)  
「第一原理による UV-vis 吸収スペクトルと X 線吸収スペクトル計算」
- 14:20-14:45    A03 常行 真司 (東京大学)  
「物質構造と電子状態の第一原理シミュレーション手法の開発と応用」
- 14:45-15:00            Coffee Break
- 15:00-15:25    A04 石河 孝洋 (大阪大学)  
「遺伝的アルゴリズムによる硫黄-水素系化合物の高圧相探索」
- 15:25-15:50    A05 北島 顕正 (国立国会図書館)  
「レアイベントサンプリングによる魔方陣の数の推定」
- 15:50-16:15    A06 萩田 克美 (防衛大学校)  
「ナノ粒子充填高分子系の粗視化 MD 法による仮想散乱実験」
- 16:15-17:45            Poster Session 〈6 階ラウンジ〉
- 18:15 -                    懇親会 〈「和ダイニング 花あかり」ららぽーと柏の葉 3 階〉

4月5日(火)

---

- 10:00-10:40    B01 藤田 航平 (理化学研究所) 【特別講演】  
「『京』全系を使った都市地震シミュレーション」
- 10:40-11:05    B02 辻 直人 (理化学研究所)  
「非平衡動的平均場理論と強結合超伝導体の量子ダイナミクス」
- 11:05-11:30    B03 藤堂 眞治 (東京大学)  
「確率的最適化によるランダムスピン系の量子臨界現象の研究」
- 11:30-11:40            Coffee Break
- 11:40-12:05    B04 大越 孝洋 (東京大学)  
「電子格子相互作用を考慮した多変数変分モンテカルロ法の拡張とホルシュタイン・ハバード模型の数値解析」
- 12:05-12:30    B05 正木 晶子 (理化学研究所)  
「並列化量子モンテカルロ法の開発と格子ボース系への応用」
- 12:30-13:30            Lunch Break
- 13:30-14:30            パネルディスカッション「全国共同利用スパコンの今後について」  
渡辺 宙志 (東京大学)、星 健夫 (鳥取大学)、吉本 芳英 (東京大学)、毛利 哲夫 (東北大学)

- 14:30-14:55 B06 尾崎 泰助 (東京大学)  
「OpenMX Ver. 3.8 の開発」
- 14:55-15:20 B07 有田 亮太郎 (理化学研究所)  
「高圧下硫化水素の超伝導転移温度の第一原理計算」
- 15:20-15:45 B08 押山 淳 (東京大学)  
「実空間密度汎関数法による物性計算 : SiC ナノファセットの形状とスピン」
- 15:45-16:00 Coffee Break
- 16:00-16:25 B09 安藤 嘉倫 (名古屋大学)  
「ソフトウェア MODYLAS を用いた大規模分子動力学シミュレーション」
- 16:25-16:50 B10 小澤 遼 (東京大学)  
「遍歴磁性体における多項式展開法を用いた高効率シミュレーションによる新奇な非共面的磁気秩序状態の探索」
- 16:50-17:30 B11 吉見 一慶 (東京大学)  
「東京大学物性研究所 ソフトウェア開発・高度化プロジェクトについて」
- 17:30- Closing

**Poster Session 月 4 日 (月) 16:15-17:45 <6 階ラウンジ>**

- 
- P01 萩田 克美 (防衛大学校) 「ペンタグラフェンの物性と工学応用構造体の計算」
- P02 原田 健自 (京都大学) 「分岐とテンソルネットワーク」
- P03 羽田野 直道 (東京大学) 「局在長の多項式展開 : エルミート系と非エルミート系」
- P04 弘瀬 大地 (東京大学) 「第一原理 GW+Bethe-Salpeter 法によるポルフィリンの解析」
- P05 井戸 康太 (東京大学) 「非平衡強相関電子系のための時間依存多変数変分モンテカルロ法」
- P06 笠松 秀輔 (東京大学) 「vdW-DF+U 法による固体酸素の低圧相および高磁場相の第一原理計算」
- P07 加藤 岳生 (東京大学) 「物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps」
- P08 川崎 愛理 (東京大学) 「量子埋め込み法を用いた多体波動関数理論」
- P09 水田 耀ビエール (金沢大学) 「大きな異常熱電効果を示すスキルミオン結晶物質の第一原理的探索に向けて」
- P10 森田 悟史 (東京大学) 「分散メモリ型並列行列積演算の GPGPU 化」
- P11 本山 裕一 (東京大学) 「連続空間中の量子モンテカルロ法における拡張アンサンブル法」
- P12 中川 恒 (東京大学) “Shape transformations of bilayer membrane induced by hydrolysis reaction”
- P13 越智 裕紀 (東京大学) 「転送行列法によるスケーリング次元の数値的研究」
- P14 大久保 毅 (東京大学) 「大規模並列モンテカルロ法による  $Z_2$  ボルテックス転移の研究」
- P15 鈴木 隆史 (兵庫県立大学) 「蜂の巣格子キタエフ・ハイゼンベルク模型の動的性質」
- P16 只野 央将 (東京大学) 「熱電材料 SnSe におけるソフトモードと格子熱伝導率の第一原理計算」
- P17 渡辺 宙志 (東京大学) 「一般化 Langevin 方程式における温度と H 定理」
- P18 山口 直也 (金沢大学) 「SrTiO<sub>3</sub> 薄膜におけるスピン軌道相互作用と層分極の第一原理計算」
- P19 山地 洋平 (東京大学) 「高並列汎用量子格子模型ソルバーパッケージ HΦ」
- P20 山本 良幸 (東京大学) 「水素不純物の荷電状態を移り変わる反応の第一原理計算」
- P21 吉本 芳英 (東京大学) 「第一原理計算プログラム xTAPP の高度化」
- P22 吉澤 香奈子 (RIST) 「第一原理計算 GUI 支援ソフトウェア TAPIOCA と C-Tools の開発」

