

日時：2018年4月2日(月) - 3日(火)

場所：東京大学物性研究所 6階 大講義室

URL: <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/seminar/all2.html? ptype=seminar & pid =4202>

所外組織委員：星健夫 (鳥取大学)、泰岡顕治 (慶應義塾大学)、羽田野直道 (東京大学)

所内組織委員：尾崎泰助、川島直輝、杉野修、野口博司、笠松秀輔、野口良史、樋口祐次、森田悟史、渡辺宙志

本研究会は、物性研で運用する全国共同利用スーパーコンピュータの成果報告会で毎年開催してきているものである。ここ数年は、計算物質科学研究センター(CCMS)の活動報告会を兼ねて開催している。共同利用に関しては、2015年度に主力ハードウェアであるシステム A、B を更新した。今回の報告会は更新後 3 年目の終わりにあたり、新機種導入の効果が顕著に表れるべき時期にあっている。また、今年 1 月にはシステム C を更新し、4月から正式に供用を開始した。計算物質科学研究センターの活動としても、2017 年には主な大型プロジェクトの中間評価を終え、これまでの成果を基にしたプロジェクト後半の展望を開くべき時期にあっている。口頭講演(招待講演)については、所外組織委員に講演者の推薦を依頼し、推薦された候補者を中心に、所内組織委

員がプログラムを作成した。2 件の特別講演を含む 16 件の口頭講演と、32 件のポスター講演からなり、参加者は、1 日目が 85 名(学内 49 名、学外 36 名)、2 日目が 78 名(学内 48 名、学外 30 名)で、延べ 163 名を数えた。近年、物性科学分野においても、機械学習を応用した研究が盛んにおこなわれるようになってきているが、今回の研究会では、こうしたトレンドにフォーカスして、離散幾何学の観点から物性発現機構の解明に取り組んでおられる東北大高等研の小谷元子教授と電子顕微鏡などの観測結果と機械学習の連携によって成果をあげておられる東大生産技術研の溝口照康准教授に特別講演をお願いした。口頭講演の各セッション、ポスターセッションともに活発な質疑応答が行われた。(川島記)

--- プログラム ---

2018年4月2日(月)

-----セッション1-----

- 13:00-13:10 **Opening**
- 13:10-14:00 **【特別講演】** 小谷元子 (東北大学)
 “離散幾何学による物質探索への挑戦”
- 14:00-14:30 **【巻頭論文講演】** 越智正之 (大阪大学)
 “第一原理波動関数理論トランスコリレイティッド法の開発と固体 ZnO への適用”
- 14:30-15:00 **篠原康 (東京大学)**
 “固体 GaSe からの高次高調波発生の原子論的シミュレーション”
- 15:00-15:20 **コーヒーブレイク**

-----セッション 2-----

- 15:20-15:50 島村孝平 (神戸大学)
“非平衡不規則系における化学反応過程の理解を目的とした 第一原理分子動力学法の開発と応用”
- 15:50-16:20 榊原寛史 (鳥取大学)
“モデルマップ RPA 法の開発と多軌道系への適用”
- 16:20-16:50 奥村久士 (分子科学研究所)
“アミロイドペプチドの凝集の分子動力学シミュレーション”
- 16:50-18:00 ポスターセッション
- 18:30-20:30 意見交換会 (ららぽーと花あかり)

2018 年 4 月 3 日 (火)

-----セッション 3 -----

- 9:40-10:30 【特別講演】 溝口照康 (東京大学)
“機械学習、計算機シミュレーションおよび原子分解能計測による結晶界面解析”
- 10:30-11:00 【巻頭論文講演】 福島孝治 (東京大学)
“詳細つりあい条件を破るモンテカルロ・サンプリング法の現状”
- 11:00-11:30 中村統太 (芝浦工業大学)
“ガウスクーネル法を用いて生データから臨界点を求める、物理量を求める”
- 11:30-12:00 野村悠祐 (東京大学)
“機械学習を用いた量子多体系の基底状態計算”
- 12:00-13:00 昼食

-----セッション 4 -----

- 13:00-13:30 【巻頭論文講演】 大久保毅 (東京大学)
“並列モンテカルロ法によるフラストレート磁性体におけるトポロジカル転移の探求”
- 13:30-14:00 大槻東巳 (上智大学)
“アンダーソン転移の高精度数値計算”
- 14:00-14:30 浅野優太 (ISSP)
“希薄高分子溶液のカルマン渦の分子動力学シミュレーション”
- 14:30-15:00 コーヒーブレイク

-----セッション 5 -----

- 15:00-15:30 北尾彰朗 (東京工業大学)
“PaCS-MD によるタンパク質のダイナミクスと離合集散”
- 15:30-16:00 高江恭平 (東京大学)
“流体粒子ダイナミクス法の GPGPU 化”



16:00-16:30 品岡寛 (埼玉大学)

“量子格子模型プログラムパッケージ DCore (integrated DMFT software for CORrelated Electrons)の
開発”

16:30-16:35 Closing

--- ポスターセッション ---

2018年4月2日(月) 16:50 ~ 18:00

P-1 “有向浸透臨界現象におけるエントロピーから見たユニバーサリティクラス”

原田健自 (京都大学)

P-2 “第一原理シミュレーションによる二酸化炭素還元反応過程の研究”

森川良忠 (大阪大学)

P-3 “変形 Lennard-Jones 系のスピノーダル”

淵崎員弘 (愛媛大学)

P-4 “磁化率解析法によるスピギャップ有無の判定”

坂井徹 (兵庫県立大学)

P-5 “Ga 添加型 Nd 焼結磁石界面に対する第一原理的研究”

立津慶幸 (東京工業大学)

P-6 “フラストレート量子スピン系の磁気励起とスピン伝導”

大西弘明 (日本原子力研究開発機構)

P-7 “強相関フェルミオン系における収束半径ゼロのファインマン・ダイアグラム級数の総和法と量子モンテカルロ
法への応用”

大越孝洋 (東京大学)

P-8 “テンソルネットワークくりこみ群を用いた 磁化の高次モーメント計算と有限サイズスケリング”

森田悟史 (ISSP)

P-9 “カーボンナノチューブのプラズモン誘起電子放出の TDDFT シミュレーション”

内田一樹 (東京理科大学)

P-10 “第一原理計算による一次元 Rashba 効果を示す新たな表面系の探索”

田中友規 (東京工業大学)

P-11 “二準位系を介したフォノン輸送の連続時間量子モンテカルロ法による解析”

山本剛史 (ISSP)

P-12 “チタニア表面における欠陥誘起の酸素還元反応”

山本良幸 (ISSP)

P-13 “非ハミルトン系における Velocity Verlet 法の安定性”

渡辺宙志 (ISSP)

P-14 “TDDFT による単原子層物質の角度分解二次電子放出スペクトル”

上田純裕 (東京理科大学)

P-15 “第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発とイオン結晶の不規則性への応用”

笠松秀輔 (ISSP)

P-16 “共振器で起こる光双安定性の微視的模型による記述”

白井達彦 (ISSP)

- P-17 “GUI 支援ツール C-Tools による電子状態計算の実行経過時間の評価”
吉澤香奈子（高度情報科学技術研究機構）
- P-18 “有限要素法を用いた解析接続によるグリーン関数の評価方法”
福田将大（ISSP）
- P-19 “Peculiar honeycomb bonding structures in silicene and borophene revealed by the absolute binding energies of core electrons”
Lee Chi-Cheng（ISSP）
- P-20 “空間相関をもつランダム場イジング模型の臨界現象と有効次元の解析”
藤堂眞治（東京大学）
- P-21 “OpenMX Viewer - a web-based crystalline and molecular graphical user interface program”
リーヨンティン（ISSP）
- P-22 “量子格子模型プログラムパッケージ HΦ による量子多体系の実時間発展”
山地洋平（東京大学）
- P-23 “Kitaef の量子スピン液体の新たな広がりとは有限温度励起ダイナミクス”
山地洋平（東京大学）
- P-24 “テンソルネットワーク法を用いた Kitaef 模型の基底状態の記述”
金子隆威（ISSP）
- P-25 “スピン分解アンフォールディング法による表面ラッシュバ状態の解析”
山口直也（金沢大学）
- P-26 “ハーフホイスラー化合物 $\text{CoMSb}(\text{M}=\text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn})$ における異常ネルンスト効果の第一原理的研究”
見波将（金沢大学）
- P-27 “ Z_2 不変量の第一原理計算コードの開発と 2 原子層 $\text{Bi}(111)$ への応用”
澤端日華瑠（金沢大学）
- P-28 “不十分な実験データを利用した結晶構造探索”
辻本直人（東京大学）
- P-29 “スピントロニクス材料の原子構造、磁気状態、電子状態の解析”
小田竜樹（金沢大学）
- P-30 “Potts 模型における弱い 1 次相転移の数値的診断について”
飯野隼平（ISSP）
- P-31 “並列テンソルネットワーク法の開発と 2 次元量子スピン模型への応用”
大久保毅（東京大学）
- P-32 “Zinc blende-like 型構造を持つ GaSe についての計算”
新田寛和（北陸先端科学技術大学院大学）



