

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 「計算物質科学の新展開」

【会場】 東京大学物性研究所 大講義室 (6 階)

【日程】 2019 年 4 月 2 日 (火)、3 日 (水)

【主催】 東京大学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

【協賛】 ポスト「京」重点課題 (7)、計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS

【組織委員会】 星健夫 (鳥取大学)、遠山貴巳 (東京理科大学)、奥村久士 (分子科学研究所)、尾崎泰助 (物性研究所)、川島直輝 (物性研究所)、杉野修 (物性研究所)、野口博司 (物性研究所)、樋口祐次 (物性研究所)、森田悟史 (物性研究所)、渡辺宙志 (物性研究所)、河村光晶 (物性研究所)、春山潤 (物性研究所)

東京大学物性研究所では計算物質科学の発展のためにスーパーコンピュータ・システム B (通称 sekirei, 2015 年 7 月より運用開始) とシステム C (通称 enaga, 2018 年 1 月より運用開始) を広くコミュニティに提供し、スーパーコンピュータの全国共同利用施設としての活動を展開している。本シンポジウムは共同利用スパコンの利用者による成果報告会と、計算物質科学研究センター (CCMS) の活動報告会を兼ねた合同研究会として毎年、開催されているものである。システム B の運用は 4 年目を迎え、多数の研究成果の創出が期待されるだけでなく、次世代機導入に向けた議論が必要な時期にある。またシステム C は稼働から 1 年ほどが経過し、本格的な活用が期待されている。

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、30 件のポスター講演からなり、参加者は、1 日目が 85 名、2 日目が 72 名で、延べ 157 名を数えた。特別講演として量子マスター方程式による低光子密度量子

状態の研究を進めておられる宮下精二名誉教授 (東京大学) と NISQ 時代の量子コンピューティングに取り組まれている藤井啓祐教授 (大阪大学) に分野を包括する教育的なご講演をお願いし、活発な質疑応答があった。

計算物質科学研究センターの活動としても、2019 年度はポスト「京」プロジェクトの最終年度にあたり、これまでの成果を総括し、今後の展望を開くべき時期にあっている。ポスト「京」に代表されるエクサ級の計算機が数年のスパンで登場すると予想され、益々、超大規模計算やハイスループット計算がより身近になると考えられる。また機械学習やデータ駆動科学が隆盛しており、その一方で量子計算機への期待も高まっている。これらの最近の発展を踏まえ、これからの 10 年で計算物質科学にどのような新展開が期待できるのか、また期待だけでなく、現状を正しく理解し、どのような方向で計算科学の研究を展開していくべきか、議論する機会を設けるために、「計算物質科学の新展開」と題したパネルディスカッションを設け、パネラーと参加者にて大変に活発な議論が展開された。(尾崎記)

【プログラム】

4 月 2 日 (火)

13:00~13:05 はじめに

13:05~13:50 宮下精二 (東京大学) [特別講演] 座長: 尾崎
量子マスター方程式による低光子密度量子状態での光双安定性の研究

13:50~14:10 河村光晶 (東京大学) [巻頭論文講演]

14:10~14:35 曾田繁利 (理化学研究所)

14:35~14:50 ブレイク



- 14:50～15:15 高田彰二（京都大学） 座長：野口
シミュレーションと1分子イメージングの融合による生体分子動態解析
- 15:15～15:40 下川直史（JAIST）
粗視化分子動力学シミュレーションによる荷電脂質膜ベシクルのダイナミクス
- 15:40～16:05 磯部雅晴（名古屋工業大学）
- 16:05～16:30 春山潤（東京大学）
密度汎関数法と溶液理論を用いた 電荷移動反応の解析
- 16:30～18:00 ポスターセッション
- 18:30～ 意見交換会

4月3日（水）

- 9:30～10:15 藤井啓祐（京都大学）[特別講演] 座長：川島
NISQ時代の量子コンピューティング
- 10:15～10:35 本山裕一（東京大学）[高度化]
量子格子模型の経路積分モンテカルロ法ソルバーDSQSSの高度化
- 10:35～10:55 ブレイク
- 10:55～11:20 中村和磨（九州工業大学）[高度化] 座長：三澤
- 11:20～11:45 藤堂眞治（東京大学）[巻頭論文講演]
- 11:45～12:10 藤田貴敏（分子研）
フラグメント分子軌道法の開発と有機半導体材料への応用
- 12:10～13:10 ランチ
- 13:10～13:35 瀧川一学（北海道大学） 座長：杉野
化学研究のための機械学習と最適実験計画
- 13:35～14:00 塩見淳一郎（東京大学）
マテリアルズインフォマティクスによる熱機能材料の開発
- 14:00～14:25 山口周（大学改革支援・学位授与機構）
- 14:25～14:50 小田竜樹（金沢大学）
- 14:50～15:10 ブレイク
- 15:10～16:10 パネルディスカッション「計算物質科学の新展開」
ファシリテーター：尾崎泰助（東京大学）
パネリスト：藤井啓祐（京都大学）、藤堂眞治（東京大学）
小田竜樹（金沢大学）、塩見淳一郎（東京大学）



成果報告会の写真

