物性研究所短期研究会

物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算の時代における物性科学」報告

物質設計評価施設　川島 直輝

日時：2023 年 4 月 3 日(月)-4 日(火)
場所：東京大学物性研究所 6 階大講義室
https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/seminar/all2.html?ptype=seminar&pid=17808
所外組織委員：畝山多加志（名古屋大学）、初貝安弘（筑波大学）、渡邉聡（東京大学）、河村光晶（東京大学）、森田悟史（慶応義塾大学）
所内組織委員：川島直輝、尾崎泰助、杉野修、野口博司、福島鉄也、井戸康太、中野裕義、春山潤、福田将大、吉見一慶

本短期研究会は、物性研スパコン共同利用と CCMS の成果報告会も兼ねて、毎年計算機関連の所員が輪番で代表世話人を努めている研究会である。

近年、機械学習、人工知能、量子計算、暗号資産、ビッグデータ活用計算、などなど、計算にまつわるトピックスを主要なメディア上で目にしない日は無くなった。我々の日常生活は広い意味の計算にすでに大きく依存しており、今後その依存度はますます高まっていくものと予想される。この潮流は当然に物性計算の世界にも大きなインパクトを持つと同時に、物性科学分野の活動がこうした潮流にもたらす寄与も決して小さくない。物性研共同利用スパコンでは、2022 年度に enaga から kugui へとシステム C の更新を行い、現在総理論演算性能が約 8PF となっている。一方、計算の大規模化にはアクセラレータの利用が必須であり、物性計算における GPU のより一層の活用が一つの懸案事項となっている。これらのような背景から、物性研スパコンユーザおよび CCMS 関係者が集い、最近の計算事例にもとづく情報交換の場を持つことによって、近年の計算動向と我々のコミュニティがどのように相互作用していくべきかについて考察を深める場とすることを目指して開催された。

今回は 3 年ぶりの完全オンサイト開催とし、会議室の利用人数上限のルールも一応まだ残っている中で、参加人数が多すぎたり少なすぎたりしないかやや不安であったが、最終的には参加登録数 70、実際に参加した方は 4 月 3 日が 60 名、4 月 4 日が 55 名となり、どうにか想定内におさまった。各講演に続く討論も活発に行われた。(図 1) 口頭招待講演は有田(東京大学)と古家(NVIDIA)による 2 件の特別講演を含めて 16 件、ポスター講演は 25 件であった。ポスターについては、ポスター賞にエントリーしたポスターのなかから、参加者全員による投票によって、増木亮太(東京大学)、福井毅勇(東京大学)、冨山翔平(物性研)の 3 件を優秀ポスター賞受賞者として選定し、研究会の最後に表彰式を行った。

オンラインではなかなか十分な効果をだすことが難しいポスターセッション(図 2)やささやかながら懇親会(図 3)も開催し、コミュニティメンバ間の相互交流を促進するうえで久しぶりの良い機会となったものと思う。

■■■ プログラム ■■■

■ **2023 年 4 月 3 日（月）**

-----セッション 1----- （座長 福田 将大）

13:00～13:10　開会挨拶（物性研所長　廣井 善二）

13:10～14:00　有田 亮太郎（東京大学）【特別講演】
「転移温度の第一原理計算」

14:00～14:30　濱田 幾太郎（大阪大学）
「密度汎関数理論計算に基づく単一原子触媒の研究」

14:30～15:00　　藤野 智子（物性研究所）
「ドープ型 PEDOT をモデルとした単結晶性オリゴマー型伝導体の開発」
15:00～15:20 休憩
-----セッション 2----- （座長 春山 潤）
15:20～15:50　　小林 亮（名古屋工業大学）
「分子動力学法を用いた非一様固体内のイオン伝導解析」
15:50～16:20　　島村 孝平（熊本大学）
「機械学習原子間ポテンシャルの訓練方法の検討及び分子動力学法への応用」
16:20～16:50　　大谷 実（筑波大学）
「第一原理計算と古典溶液論によるハイブリッド計算法を用いた電気化学シミュレーション」

-----ポスターセッション-----
16:50～18:10　　ポスター発表 [6 階ラウンジ]

■ 2023 年 4 月 4 日（火）
-----セッション 3 ----- （座長 井戸 康太）
9:30～10:20　　古家 真之介（NVIDIA）【特別講演】
「GPU コンピューティングを活用した物性研究」
10:20～10:30 休憩
-----セッション 4 ----- （座長 森田 悟史）
10:30～11:00　　吉田 恒也（京都大学）
「数値的対角化を用いた強相関非エルミートトポロジーの解析」
11:00～11:30　　小布施 秀明（北海道大学）
「非エルミート・トポロジカル相と Julia による任意精度演算」
11:30～12:00　　井戸 康太（物性研究所）
「機械学習・データ科学手法を活用した第一原理有効ハミルトニアンの網羅的解析」
12:00～13:00 昼食
-----セッション 5 ----- （座長 吉見 一慶）
13:00～13:30　　田村 亮（物質・材料研究機構）
「ブラックボックス最適化による物性研究」
13:30～14:00　　中野 裕義（物性研究所）
「異方的アクティブマターと外部駆動格子ガスに共通する協同現象」
14:00～14:30　　星 健夫（鳥取大学）
「富岳における超並列データ駆動科学と全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) への応用」
14:30～14:50 休憩
-----セッション 6 ----- （座長 野口 博司）
14:50～15:20　　眞弓 皓一（東京大学）
「MD シミュレーションを用いた高強度高分子ゲルの力学物性発現メカニズム解明」
15:20～15:50　　福田 順一（九州大学）
「液晶の秩序構造とその光学的性質に関する数値的研究」
15:50～16:20　　大槻 道夫（大阪大学）
「弾性体の摩擦の物体形状による制御」
16:20～16:25　　ポスター賞表彰式・閉会挨拶

■ ポスター講演

PA-1　増木 亮太（東京大学）
「フォノン理論に基づいた有限温度における結晶構造の第一原理計算」

PA-2　山口 直也（金沢大学）
「LCPAO 法における一様電場下第一原理計算手法の開発とスピンテクスチャへの応用」

PA-3　Chandro Pardede（金沢大学）
“Accelerated Density Functional Calculation using GPU”

PA-4　天野 智仁（東京大学）
「ルチル型 TiO_2 の格子誘電特性：自己無撞着フォノン法による第一原理的研究」

PA-5　Li Hengyu (物性研究所)
“Ab initio Molecular Dynamics Simulation accelerated by On-the-fly Machine Learning”

PA-6　小正路 崚太郎（物性研究所）
「最密球充填構造と四元系水素化物の網羅的探索」

PA-7　安 碩奎（物性研究所）
「内殻準位分光の密度汎関数計算」

PB-1　福井 毅勇（東京大学）
「環境と結合したキタエフ模型における磁場誘起転移」

PB-2　張 成燻（物質・材料研究機構）
「大規模並列計算を用いた f 電子系におけるキタエフ型相互作用の研究」

PC-1　本間 健司（物性研究所）
「核ノルム正則化によるテンソルネットワークのループ最適化」

PC-2　赤松 克哉（物性研究所）
“Numerical Study on the Faithfulness of Real-Space Renormalization Group Maps”

PC-3　菊地 駿太（慶應義塾大学）
「分子動力学法による脂質二重膜の揺らぎの測定」

PC-4　山本 哲也（慶應義塾大学）
「赤血球モデルのエネルギースペクトル解析」

PC-5　冨山 翔平（物性研究所）
「分子シミュレーションにおける自由エネルギー計算手法の高次内挿による改良」

PZ-1　三澤 貴宏（物性研究所）
「有機反強磁性体における強相関トポロジカル絶縁体」

PZ-2　品岡 寛（埼玉大学）
“Multi-scale space-time ansatz for correlation functions of quantum systems based on quantics representations”

PZ-3　吉見 一慶（物性研究所）
「東京大学物性研究所データリポジトリに関する紹介」

PZ-4　渕崎 員弘（愛媛大学）
「畳み込みニューラルネットワークのメモリヒステリシスによって連続/不連続転移を判断可能か？」

PZ-5　日沼 洋陽（産業技術総合研究所）
「$In2O_3$ 担持金属ナノ粒子における酸素空孔生成エネルギーの金属依存性の探索」

PZ-6　青山 龍美（物性研究所）
「2022 年度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の活動紹介」

PZ-7　森田 悟史（物性研究所）
「古典ダイマー模型における Ashkin-Teller 型相転移」
PZ-8　春山 潤（物性研究所）
「第一原理計算を用いた金属/吸着水系の二次非線形感受率の解析」
PZ-9　篠原 康（NTT）
「高強度パルスを照射された水晶中の電子エネルギー分布の第一原理計算」
PZ-10　森井 洋平（東北大学）
「機械内複雑流動のマルチスケールシミュレーション」
PZ-11　榊原 寛史（鳥取大学）
「ニッケル酸化物超伝導体の圧力効果の第一原理バンド計算」

図 1：講演後の質疑応答

図 2：ポスターセッションの様子

図 3：懇親会の様子