

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 「計算物質科学の現在と未来」 報告

物質設計評価施設 尾崎 泰助

日時：2024 年 4 月 3 日(水)－4 日(木)

場所：東京大学物性研究所 6 階大講義室

<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/news/5770>

所外組織委員：南谷英美（大阪大学）、坂井徹（兵庫県立大学）、篠田渉（岡山大学）、渡辺宙志（慶応義塾大学）

所内組織委員：尾崎泰助、川島直輝、杉野修、野口博司、三澤貴宏、吉見一慶、井戸康太、中野裕義、春山潤、福田将大

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。

「富岳」に代表されるスーパーコンピュータと計算手法の両者の絶え間ない進展により、近年のシミュレーションは精緻、大規模かつ網羅的なものとなり、物理現象の本質的な理解に大いに貢献しているだけでなく、実験との協奏的研究においても多くの成果が生み出されている。さらに最近では機械学習手法の台頭により、驚くべき速さで人工知能技術が進展しており、物性・物質科学の研究においてもその活用が進んでいる。一方、物性研究所は 2022 年度に enaga から kugui へとシステム C の更新を行い、総理論演算性能として約 8PF の共同利用スパコンを有しており、全国中の研究者の物性・物質科学シミュレーションのプラットフォームを提供している。このような国内外の計算物質科学の現状を踏まえ、本研究会は、物性研スパコンユーザ及び CCMS 関係者が集い、最近の計算事例に基づく情報交換の場を持つことによって、研究成果を共有し、さらに我々のコミュニティをどのように発展させていくべきかについて考察を深める機会となるべく企画・開催された。

昨年度に引き続き、完全オンサイトによる開催とし、参加登録数 66、実際の参加者は 4 月 3 日が 54 名、4 月 4 日が 52 名となった。口頭招待講演は初貝安弘氏(筑波大学)と近藤正章氏(慶應義塾大学)による特別講演を含めて 16 件、ポスター講演は 31 件であった。特に東西交流を促進するため、下川統久朗氏(OIST)、樋口克彦氏(広島大学)、土屋旬氏(愛媛大学)、藤井幹也氏(NAIST)に講演を依頼した。強相関係、第一原理計算、機械学習、ソフトマターの分子動力学計算など、幅広い話題の講演が行われ、活発な質疑応答がなされた(図 1)。強相関係や第一原理計算など従来からの研究分野における最近の進展が議論されるとと

もに、機械学習やデータ駆動科学に基づく手法が随所に活用された研究の紹介があった。これらの融合研究により、本質的に新しい視点が生み出されていることが分かり、「計算物質科学の現在と未来」を知る良い機会となった。また近藤正章氏による特別講演「次世代計算基盤に向けて：フィジビリティスタディの検討状況」では 5 年程度の近未来で実現されうるスーパーコンピュータ開発への展望が紹介され、計算物質科学コミュニティにおけるソフトウェア開発への指針が得られた。ポスターセッション(図 2)については、ポスター賞にエントリーしたポスターの中から、参加者全員による投票によって、荒川泰政氏(山形大学)、山本哲也氏(慶應義塾大学)の 2 件を優秀ポスター賞の受賞者として選定し、研究会の最後に表彰式を行った(図 3)。講演やポスターセッションにおける質疑応答では学生を含めた若手研究者が活発に議論する様子が見られ、コミュニティメンバー間の相互交流を促進する良い機会となったと考えている。

4月3日(水)

- 12:55～13:00 Opening (物性研所長 廣井 善二)
- 13:00～13:50 初貝 安弘 (筑波大学)【特別講演】 座長 川島直輝
「強相関トポロジカル相の数値的研究」
- 13:50～14:20 大門 俊介 (量子科学技術研究開発機構)
「深層学習 AI による量子伝導現象の解説」
- 14:20～14:50 下川 統久朗 (OIST)
「実験的に測定可能な量子もつれ測度を用いた量子スピン液体の数値的研究」
- 14:50～15:05 Break
- 15:05～15:35 今田 正俊 (早稲田大学)【巻頭論文】 座長 三澤貴宏
「スーパーコンピュータを用いた高温超伝導と量子スピン液体の解明」
- 15:35～16:05 大久保 毅 (東京大学)【高度化】
「テンソルネットワーク法による二次元量子格子モデルの解析」
- 16:05～16:35 樋口 克彦 (広島大学)
「非摂動 MFRTB 法による磁場下固体の磁気現象の解析」
- 16:40～18:00 ポスターセッション [6 階ラウンジ]
- 18:15～ 懇談会「カフェテリア(物性研究所前)」

4月4日(火)

- 09:30～10:20 近藤 正章 (慶應義塾大学)【特別講演】 座長 尾崎泰助
「次世代計算基盤に向けて：フィジビリティスタディの検討状況」
- 10:20～10:50 藤井 幹也 (NAIST)
「デジタル技術によるクロズドループを用いた材料設計とプロセス開発」
- 10:50～11:05 Break
- 11:05～11:35 土屋 旬 (愛媛大学) 座長 吉見一慶
「第一原理計算による地球惑星内部における含水物質の研究」
- 11:35～12:05 永井 佑紀 (東京大学)
「機械学習によるシミュレーションの高速化：自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」
- 12:05～13:10 Lunch
- 13:10～13:40 是常 隆 (東北大学) 座長 杉野修
「第一原理ワニエ有効モデルに関する最近の発展」
- 13:40～14:10 尾崎 泰助 (東京大学)
「基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の開発」
- 14:10～14:40 佐藤 駿丞 (筑波大学)
「時間依存密度汎関数理論に基づく第一原理アト秒電子ダイナミクス計算」
- 14:40～15:00 Break
- 15:00～15:30 川口 一朋 (金沢大学)【巻頭論文】 座長 野口博司
「分子動力学計算による脂質二重膜中の超長鎖脂肪酸の構造の解明」
- 15:30～16:00 岡崎 圭一 (分子研)
「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるタンパク質構造変化ダイナミクスの解明」
- 16:00～16:30 山本詠士 (慶應義塾大学)
「生体分子動的構造体における分子挙動解明に向けた分子動力学シミュレーションによる取り組み」
- 16:30～16:35 Closing (+ポスター賞表彰式)

《賞選考対象ポスター》

- 《一般ポスター》

- 49 物性研だより第 64 巻第 2 号



- PB-6 森井洋平（東北大学）
「高分子/界面活性剤系の複雑流動のマルチスケールシミュレーション」
- PB-7 福田 将大（ISSP）
「物性研データリポジトリ (ISSP Data Repository) とその利用例」
- PB-8 森田 悟史（慶應義塾大学）
「ボンド重み付きテンソルくりこみ群を用いた期待値計算アルゴリズム」
- PB-9 Li Hengyu (ISSP)
“A Compact Tensor Regression Model for Accelerating First-Principle Molecular Dynamics Simulations”
- PB-10 黒田 文彬（筑波大学）
「ハイスループット DFT 計算と証拠理論による C2 化合物選択的 CO₂ 還元触媒スクリーニング」
- PB-11 篠原 康（NTT 基礎研）
「高強度光で励起された物質の電子密度変化の第一原理計算」
- PB-12 本山 裕一（ISSP）
「物性研究所ソフトウェア開発・高度化プロジェクト」
- PB-13 三澤 貴宏（ISSP）
「有機化合物における巨大なスピン分裂を持つ補償フェリ磁性体」
- PB-14 小林 亮（名工大）
「BaTiO₃ の転位芯近傍ドメイン生成シミュレーションのための機械学習ポテンシャル開発」
- PB-15 井戸 康太（ISSP）
「三角格子上の近藤格子模型で発現する多体トポロジカル状態」
- PB-16 山手 奏汰（金沢大学）
「スピンチャーン数の効率的な計算手法の開発」



図 1: 講演の様子

