

物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会
「機械学習と計算物性科学の未来」報告

物性研だより第 65 巻第 2 号 36

13:40～14:20 北尾 彰朗（東京科学大学）
「タンパク質の複合体形成・解離のダイナミクスとアロステリック効果」

14:20～14:50 大槻 純也（岡山大学）【高度化】
「動的平均場理論による強相関化合物の多極子応答」

14:50～15:10 星 健夫（核融合科学研究所）【高度化】
「汎用逆問題解析フレームワーク ODAT-SE（旧称 2DMAT）の学際展開」

15:10～17:00 ポスターセッション [6 階ラウンジ]

17:00～ 懇談会 [6 階ラウンジ]

4 月 4 日（金）

09:30～10:10 大上 雅史（東京科学大学）
「AI とシミュレーションが駆動する分子設計」

10:10～10:40 大久保 毅（東京大学）
「テンソルネットワーク法による二次元量子スピン系の有限温度物性の解析」

10:40～11:00 Coffee break

11:00～11:40 田中 剛平（名古屋工業大学、東京大学）
「リザーバーコンピューティングと非線形物理現象」

11:40～12:10 春山 潤（理化学研究所）【巻頭論文】
「金属吸着系の二次非線形感受率の第一原理計算手法の開発及び機械学習力場を用いたイオン伝導物質の解析」

12:10～13:30 Lunch

13:30～14:30 ポスターセッション 【6 階ラウンジ】

14:30～15:00 中村 和磨（九州工業大学）【巻頭論文】
「隠れマルコフモデルを用いた蛍光修飾 DNA の蛍光時系列データ解析」

15:00～15:20 Coffee break

15:20～15:50 望月 維人（早稲田大学）【巻頭論文】
「近藤格子磁性体におけるトポロジカル磁性のスピン-電荷励起ダイナミクス」

15:50～16:20 乾 幸地（東京大学）
「自動微分を用いた所望の磁気コンダクタンスパターンを示す量子細線の逆設計」

16:20～16:50 高橋 惇（東京大学）
「半正定値計画階層における擬密度行列とフラストレーションフリー性の双対性」

16:50～17:00 Closing 及びポスター賞表彰式

《賞選考対象ポスター》

PA-1 佐藤 龍平（東京大学）「機械学習ポテンシャル分子動力学計算による超伝導水素化合物合成機構の解析」

PA-2 Soungmin Bae（東北大学）「密度汎関数理論の交換相関汎関数による生成熱計算の評価およびエネルギーの補正項の導出」

PA-3 Shibghatullah Muhammady（理化学研究所）“Thermal catalytic reactions for ammonia synthesis on terrace and stepped Ru(0001) surfaces from first-principles calculation”

PA-4 ローランド ノエル（慶應義塾大学）「二原子分子における気液相図の分子動力学的研究」

PA-5 小林 睦巳（慶應義塾大学）「クラシック音楽を学習した制限ボルツマンマシンの内部構造の解析」

PA-6 細田 昌景（慶應義塾大学）「分子動力学法を用いた相分離現象の解析」

PA-7 山口 健太（慶應義塾大学）「制限ボルツマンマシンの高速化及び大規模化」

PA-8 寺澤 雄介（電気通信大学）「機械学習を用いた大規模データを活用する動的スケーリング解析法」

- PA-9 勝田 匠（金沢大学）「磁気異方性の第一原理計算手法の開発と電界誘起変調効果への応用」
- PA-10 稲吉 健（埼玉大学）「Quantics Tensor Trains による情報圧縮を活用した非平衡 Green 関数計算の効率化」
- PA-11 山本 哲也（東京大学）「血流中の酸素の拡散のシミュレーション」
- PA-12 竹内 奏人（慶應義塾大学）「Crowdwalk を用いた神戸市中央区付近の避難シミュレーション」
- PA-13 沖上 和希（東京大学）「Inverse Hamiltonian Design によるトポロジカル磁気秩序の探索」
- PA-14 佐々木 遼馬（東京科学大学）「自動微分を用いた分子結晶電解質の古典力場最適化スキームの構築」
- PA-15 丹羽 陽弥（金沢大学）「透明超伝導体 LiTi_2O_4 の第一原理 GW 電子状態計算」
- PA-16 井上 仁（金沢大学）「第一原理計算コードの開発とトポロジカル表面状態の解析」
- PA-17 荒川 泰政（山形大学）「機械学習力場で見える超イオン伝導ガラス $\text{AgI-As}_2\text{Se}_3$ の構造とイオン拡散」
- PA-18 星野 銀太（東北大学）「グリーン関数のゼロを用いたトポロジカル物質探索」
- PA-19 Ho Ngoc NAM（名古屋大学）“Machine Learning-Assisted Computational Design of High-Entropy Alloys for Superior Electrocatalysis in Fuel Cells”
- PA-20 藤井 淳太郎（東京科学大学）「超立方格子 $\text{SU}(3)$ フェルミハバードモデルにおける強磁性状態」
- PA-21 柳瀬 調知（金沢大学）「ツイスト 2 層グラフェンの高速な構造決定に向けた機械学習ポテンシャルの構築」
- PA-22 中西 優馬（東京大学）「テンソルネットワーク法を用いたカゴメ格子反強磁性体の熱ホール伝導の解析」
- PA-23 宋 峰峰（東京大学）「テンソルネットワーク法による J1-J2 XY 模型における創発的中間相」
- PA-24 Babu Baijnath Prasad（東京大学）“Magnetism-induced second-order nonlinear optical responses in bismuth ferrite”
- PA-25 皆川 諒（京都大学）「MPS 表現における動的低ランク近似法のグラウバーダイナミクスへの応用」
- PA-26 村林 史啓（東京大学）「分数量子ホール液滴におけるエッジ状態のマイクロ波応答」
- PA-27 柏村 周平（東京大学）「サロゲートモデルを用いた交換モンテカルロ法による磁性絶縁体 azurite の有効パラメータ推定」
- PA-28 渡辺 凌真（東京大学）「テンソルネットワークを用いた loop $\text{O}(2)$ 模型の universality class の数値解析」
- PA-29 安 碩奎（東京大学）「X 線吸収分光の密度汎関数計算」
- 《一般ポスター》
- PB-1 只野 央将（物質・材料研究機構）「ハイスループット第一原理計算による機能性ホイスラー合金の探索」
- PB-2 笠松 秀輔（山形大学）「不規則物質系におけるユニバーサル機械学習ポテンシャルの評価」
- PB-3 榊原 寛史（鳥取大学）「2 層及び 3 層ニッケル酸化物超伝導体の第一原理計算に基づく研究」
- PB-4 濱田 幾太郎（大阪大学）「水素貯蔵多孔質材料の密度汎関数理論計算」
- PB-5 中野 裕義（東京大学）「低次元流体の定常流を预言する上でのゆらぐ流体力の必要性」
- PB-6 渕崎 員弘（愛媛大学）「黒リンの圧力誘起 A17-A7 転移に対する力場モデル」
- PB-7 菊地 駿太（慶應義塾大学）「分子動力学法による液液界面における Rayleigh-Plateau 不安定性の解析」
- PB-8 大島 巧（東京大学）「テンソルネットワークを用いたボピュレーションアニーリング」
- PB-9 高本 聡（株式会社 Preferred Networks）「汎用ニューラルネットワークポテンシャル PFP の全安定元素対応と安定性の向上」
- PB-10 山口 直也（金沢大学）「磁性トポロジカル絶縁体における Wannier 基底を用いた層異常ホール伝導度の計算」
- PB-11 坂井 徹（兵庫県立大学）「低次元量子スピン系の磁場誘起量子相転移の数値的研究」
- PB-12 石井 史之（金沢大学）「第一原理計算による薄膜・ヘテロ界面系における異常ホール効果の層分解」
- PB-13 本山 裕一（東京大学）「動的平均場理論ソルバーDCore と Bethe-Salpeter 方程式ソルバーChiQ の高度化」
- PB-14 井戸 康太（東京大学）「変分モンテカルロ法を用いた Kitaev-Kondo 模型の基底状態解析」
- PB-15 福田 将大（東京大学）「領域化学ポテンシャルによる物質表面の電子供与性の可視化」
- PB-16 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有限サイズスケール解析」
- PB-17 石河 孝洋（東京大学）「高圧下における La-N-B-H 系の安定相と超伝導相の探索」
- PB-18 久保 祐貴（東京大学）「データ同化計算を用いたイットリウム高圧相の構造探索」

PB-19 青山 龍美（東京大学）「先端計測向けデータ解析フレームワーク 2DMAT/ODAT-SE の高度化」

PB-20 奥村 久士（分子科学研究所）「生体膜上に流れを発生させる非平衡分子動力学法の開発と応用」

PB-21 小幡 正雄（金沢大学）「マルチ GPU による準粒子自己無撞着 GW 計算コードの高速化と応用: Type II 超格子 InAs/GaSb および磁気形状記憶合金 Ni₂MnGa の電子状態」

