

者と参加者との間で活発な意見交換が行われ、研究内容に関する技術的な議論にとどまらず、ソフトウェアの公開・再利用や今後の共同研究の可能性についても踏み込んだ交流がなされました。

本研究会は、計算物性科学における最新の研究成果の発表、活発な学術情報交換、そして研究者間のコミュニティ

形成を促進する場として、盛況のうちに閉会しました。分野や世代を越えた意見交換を通じて、今後の研究およびソフトウェア開発の方向性について多くの示唆が得られたことは、大きな成果であったといえます。ご参加いただいた皆様、ならびに本研究会の開催にご協力いただいた関係者の皆様に、心より感謝申し上げます。

プログラム一覧

はじめに

10:00-10:10 「はじめに」 川島 直輝 (東京大学)

10:10-10:30 「ソフトウェア開発・高度化プロジェクト全般の紹介」 吉見 一慶 (東京大学)

第一原理計算関係

10:30-10:50 「固液界面における DFT-古典溶液論ハイブリッドシミュレーションの開発と応用」 大谷 実 (筑波大学)

10:50-11:10 「TurboRVB 及び TurboGenius の高度化と最近のアルゴリズム的進展」 中野 晃佑 (物質・材料研究機構、理化学研究所)

11:10-11:30 「固溶体の配置サンプリングフレームワーク abICS の高度化」 笠松 秀輔 (山形大学)

強相関電子系関係

13:00-13:20 「強相関第一原理計算手法とソフトウェア開発・高度化プロジェクト」 三澤 貴宏 (東京大学)

13:20-13:40 「DCore+ChiQ : 動的平均場法による強相関化合物の一粒子スペクトルと二粒子応答」 大槻 純也 (岡山大学)

13:40-14:00 「テンソルネットワーク法による量子スピン模型解析ソフトウェアの開発」 大久保 毅 (東京大学)

データ駆動科学関係

14:00-14:20 「ベイズ最適化パッケージ PHYSBO」 田村 亮 (物質・材料研究機構)

14:20-14:40 「データ解析フレームワーク ODAT-SE と計測インフォマティクス」 星 健夫 (核融合科学研究所)

ポスター発表

15:00-16:00 ポスター発表

ソフトウェア普及・開発関係

16:00-16:20 「MateriApps プロジェクト : 物質科学シミュレーションのコミュニティ形成に向けて」 井戸 康太 (東京大学)

16:20-16:40 「MateriApps LIVE! / Installer : 物質科学シミュレーションの環境構築」 藤堂 眞治 (東京大学)

16:40-17:00 「オープンソースライセンス」 本山 裕一 (東京大学)

17:00-17:20 「グループ・コミュニティでのコーディング」 青山 龍美 (東京大学)

パネルディスカッション

17:30-18:00 「今後の計算物質科学におけるソフトウェア開発のあり方について」 座長 : 吉見 一慶 (東京大学)

登壇者 : 大谷 実 (筑波大学)、大久保 毅 (東京大学)、田村 亮 (物質・材料研究機構)、井戸 康太 (東京大学)



