

添付資料1 イベント報告書 目次

報告書番号	イベント名	ページ
報告書1	[配信講義] CMSI計算科学技術特論A	1
報告書2	第1回 TOMBOセミナー	3
報告書3	第23回CMDワークショップ	4
報告書4	第17回 分子シミュレーション 夏の学校	5
報告書5	TCCIウィンターカレッジー分子シミュレーション 第7回分子シミュレーションスクールー基礎から応用まで	6
報告書6	第2回CMSI人材育成シンポジウム(配信2)「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」	8
報告書7	第3回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と分子物性の理論～ TCCIウィンターカレッジ:量子化学	10
報告書8	平成25年度CMRI「MPIプログラミング講習会」	12
報告書9	International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	13
報告書10	第24回CMDワークショップ	14
報告書11	【配信セミナー】教育・人材育成「マルチスケールの計算材料科学」	15
報告書12	OCTA講習会&トレーニング	16
報告書13	CMSI 第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題研究会「材料中の複雑構造・組織の第一原理解析」	17
報告書14	第1回 CCMSハンズオン(ソフトウェア講習会) Machikaneyama2002チュートリアル(固体電子状態計算 初級)	18
報告書15	平成25年度 CMRI (東北大学計算材料科学研究拠点) 研究会	19
報告書16	第1部会「新物質・新量子相の基礎科学」夏の学校 2013 エネルギーを創造する新物質の基礎科学的課題を徹底議論	20
報告書17	計算分子科学研究拠点 第4回研究会	21
報告書18	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Kobe - Recent Progress in Tensor Network Algorithms -	24
報告書19	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Tokyo -Novel Electronic Structure Method -	26
報告書20	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Nagoya - Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism	27
報告書21	CMSI International Symposium 2013 -Extending the power of computational materials sciences with K-computer -	29
報告書22	物性研究所 計算物質科学研究センター 第3回シンポジウム 「スピン・軌道相互作用の物理における実験・理論・計算」	32
報告書23	第4回 CMSI研究会 (物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会)	34
報告書24	CMSI/CMRI Workshop for Ferroelectrics and Related Materials	39
報告書25	CMRI International Symposium 2014	41
報告書26	第2回CCMS(柏)ハンズオン: バージョン管理システムチュートリアル	44
報告書27	第3回CCMS(柏)ハンズオン: xTAPP講習会	45
報告書28	第4回CCMS(柏)ハンズオン: rokkoチュートリアル	46
報告書29	第3部会:分子集合系における先端分析と大規模計算 ～高度水利用に資するスマート分離技術の基盤構築を目指して～	47
報告書30	The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference - With the Cerebration of Chongqing University Honorary Professorship Given to Prof. Kawazoe	48
報告書31	The 8th ACCMS-VO General Meeting Scientific Program	50
報告書32	TCCI 第3回実験化学との交流シンポジウム	53
報告書33	第7回 CMSI産官学連続研究会 電気化学系の第一原理シミュレーションからわかったこと・わかること ～高性能電池開発にむけて～	55

報告書34	TCCI 第3回産官学連携シンポジウム	56
報告書35	第8回 CMSI産官学連続研究会「永久磁石研究の最前線:計算科学的アプローチの課題と展望」	58
報告書36	第2回TUT-CMSI見える化シンポジウム 「電子を魅せる」	59
報告書37	第3回HPCI戦略プログラム 分野2×分野5 異分野交流研究会 「量子多体系のダイナミクス計算 -原子核から物質科学まで-」	61
報告書38	生体分子複合システムを計算する 相互作用は何をもたらすのかー	63
報告書39	元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>・大型研究施設(CMSI・SPring-8・J-PARC・KEK) 連携シンポジウム2014 ~大型研究施設を利用した物質・材料研究の課題共有と共創~	64
報告書40	平成25年度 第1回物性セミナー	66
報告書41	第3回CMSI神戸ハンズオン:xTAPPチュートリアル	67
報告書42	「京」一般利用情報交換会	68
報告書43	第4回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル	69
報告書44	平成25年度 第2回物性セミナー	70
報告書45	CMSIアプリ高度化合宿“TOKKUN! 1(実行性能向上)” ~「京」一般利用申請に向けて~	71
報告書46	第5回CMSI神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	72
報告書47	CMSI 若手技術交流会(合宿) [第8回] 「アプリケーションの開発と展開のための情報共有」	73
報告書48	平成25年度 第3回「京」物性セミナー	75
報告書49	第6回CMSI神戸ハンズオン:xTAPPチュートリアル	76
報告書50	CMSIアプリ高度化合宿“TOKKUN! 2(並列性能向上)” ~「京」一般利用申請に向けて~	77
報告書51	平成25年度 第4回「京」物性セミナー	78
報告書52	第7回CMSI神戸ハンズオン:バージョン管理システムチュートリアル	79
報告書53	CMSIアプリ高度化合宿“TOKKUN!3(実行・並列性能向上)” ~「京」一般利用申請に向けて~	80
報告書54	第8回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル	81
報告書55	第9回CMSI神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	82
報告書56	第10回CMSI神戸ハンズオン:feramチュートリアル	83
報告書57	第11回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル	84
報告書58	第12回CMSI神戸ハンズオン:MODYLAS講習会	85
報告書59	平成25年度 第3回「京」物性セミナー	86
報告書60	CMSI 若手技術交流会(合宿) [第8回] 「アプリケーションの開発と展開のための情報共有」	87
報告書61	第13回CMSI神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	89

配布先	報告書1	作成日 2013年7月26日	
関係各位	【配信講義】CMSI 計算科学技術特論 A	No. CMSI-13-12	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

京コンピュータを中心としたネットワークインフラが整備され、日本各地に設置されているスーパーコンピュータを容易に使える環境が整いつつある。それを活用して大規模で高性能なシミュレーションを実行し、科学の進展のみならず、防災やものづくり、創薬といった社会の安全や産業、医療に貢献していくことが願われている。そのためには、そのようなシミュレーションソフトウェアを開発する人材を育成することが必要である。本講義では、新物質開発やエネルギー創製に関する分野に関係が深い科学技術計算ソフトウェアの開発で、物性物理、分子科学、材料科学などの研究に使われているものの開発に必要な要素技術を中心に取り上げた。(参加人数: 184名)

【開催要項】

開催日: 平成 25 年の下記日程 (木曜:13:00~14:30)

開催場所: CMSI 教育拠点(下記一覧参照)

【シラバス】

日程	内容	講師
4月11日(木)	第1回 プログラム高速化の基礎	片桐孝洋(東大)
4月18日(木)	第2回 MPI の基礎	片桐孝洋(東大)
4月25日(木)	第3回 OpenMP の基礎	片桐孝洋(東大)
5月9日(木)	第4回 Hybrid 並列化技法 (MPI と OpenMP の応用)	片桐孝洋(東大)
5月16日(木)	第5回 プログラム高速化の応用	片桐孝洋(東大)
5月23日(木)	第6回 線形代数演算ライブラリ BLAS と LAPACK の基礎と実践1	中田真秀(理研)
5月30日(木)	第7回 線形代数演算ライブラリ BLAS と LAPACK の基礎と実践2	中田真秀(理研)
6月6日(木)	第8回 高速化チューニングとその関連技術1	渡辺宙志(東大)
6月13日(木)	第9回 高速化チューニングとその関連技術2	渡辺宙志(東大)
6月20日(木)	第10回 行列計算における高速アルゴリズム1	山本有作(神戸大)
6月27日(木)	第11回 行列計算における高速アルゴリズム2	山本有作(神戸大)
7月4日(木)	第12回 古典分子動力学法の高速化1	吉井範行(名大)
7月11日(木)	第13回 古典分子動力学法の高速化2	吉井範行(名大)
7月18日(木)	第14回 量子化学計算の大規模化1	石村和也(分子研)
7月25日(木)	第15回 量子化学計算の大規模化2	石村和也(分子研)

【開催場所】

- ・東北大学 金属材料研究所
- ・東京大学 柏キャンパス
- ・東京大学 本郷キャンパス
- ・金沢大学
- ・豊橋技術科学大学
- ・分子科学研究所
- ・名古屋大学
- ・京都大学 福井謙一記念研究センター
- ・大阪大学(配信元) 豊中キャンパス
- ・大阪大学 吹田キャンパス
- ・CMSI 神戸拠点(計算科学研究機構内)

以上

配布先 関係各位	報告書2		作成日 2013年7月10日
	第1回 TOMBO セミナー		No. CMSI-13-09
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 2013年7月5日(金)13:30 - 17:00
 会場： 東京駅八重洲北口サピアタワー10階「東北大学」東京オフィス
 主催： TOMBO 開発グループ
 共催： 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)
 協賛： アクセルリス(株)

【開催趣旨】

TOMBO は平面波基底と数値原子軌道関数基底の両方を用いた全電子混合基底法による高精度第一原理計算プログラムです。LDA での第一原理分子動力学シミュレーション・構造最適化や結晶のバンド計算などが可能な最新バージョンの解説と実習を行い、また、GW 近似や Bethe-Salpeter 方程式の取り扱いなどの高度な計算のデモを行いました。

【プログラム概要】

司会： 東北大金研 CMRI 准教授 寺田弥生
 はじめに 東北大金研 CMRI 拠点長・教授 毛利哲夫、横浜国大教授 大野かおる
 TOMBO の紹介 東北大名誉教授／未来科学技術共同研究センター 川添良幸
 TOMBO の開発と応用 NIMS 元素戦略材料研究センター主幹研究員 佐原亮二
 TOMBO 新バージョンの開発と最新の研究成果 東大物性研助教 野口良史
 TOMBO 新バージョンの高速化(その1) 横浜国大研究教員 小野頌太
 TOMBO 新バージョンの高速化(その2)
 TOMBO 新バージョン(β版)の実習 横浜国大教授 大野かおる
 Materials Studio®/Pipeline Pilot® の TOMBO インターフェースの使い方
 アクセルリス(株)アプリケーション・サイエンティスト 桑原理一

以上

配布先 関係各位	報告書3		作成日 2013年9月10日
	第23回CMDワークショップ		No. CMSI-13-22
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日程： 2013年9月2日(月)－ 9月6日(金)
 場所： 大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟
 主催： 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター
 大阪大学大学院理学研究科物理学専攻
 大阪大学サイバーメディアセンター
 東京理科大学
 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 独立行政法人日本学術振興会 研究拠点形成事業 A.先端拠点形成型
 大阪大学 Quantum Engineering Design Research Initiative
 共催： 東京大学物性研究所
 参加人数： 58名

【概要】

材料科学、物質科学は、21世紀においても社会の技術基盤の発展を支える中心的な役割を果たすと考えられていますが、これまでの経験的な組み合わせ論的新素材開発手法のみでは、新しい知見に到達するまでの研究の効率化と省資源化・環境調和性の実現についての総合的検討の現代の必要性に対処できないと考えられています。コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD®)の手法は、このような状況におけるブレイクスルーとなる可能性が極めて高いと期待されています。このワークショップはコンピューショナル・マテリアルズ・デザインの可能性を展望するとともに、その基本となる最先端の計算手法を学び、実際にマテリアルズ・デザインを体験することにより、物質科学の新しいパラダイムに対応できる基礎能力をつけることを目的としています。第17回からスーパーコンピューターコースを設置し、スーパーコンピューターを活用して大規模な系への適用についての実習も行っています。次世代スパコンプロジェクトが進行している中、それを使いこなす人材の育成が急務です。しかし、F1マシンに例えられる次世代スパコンは容易に使いこなせるものではありません。そのためには、まず現存するスーパーコンピューターを十分使いこなす人材を育成することから始める必要があります。本ワークショップでは、ベクトル化や並列化といったテクニカルな部分よりも、実際に計算して物質を設計する点に重点をおいて、5日間スパコンを自由に使って実習を行いました。

【プログラム】

効率性、環境調和性が要求される 21 世紀の研究開発で重要な役割を果たすコンピューショナル・マテリアルズ・デザイン手法に関するチュートリアルを含むワークショップ。

- ・第一原理計算の基礎
- ・マテリアルデザインの基礎と応用
- ・MACHIKANEYAMA2002 実習
- ・STATE-Senri 実習
- ・Osaka2k 実習
- ・ABCAP 実習
- ・HiLAPW 実習
- ・NANIWA-Series 実習
- ・ES-OPT 実習
- ・RSPACE 実習
- ・Ecalj 実習
- その他

以上

配布先 関係各位	報告書4	作成日 2013年9月6日	
	第17回 分子シミュレーション 夏の学校	No. CMSI-13-21	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

主催： 分子シミュレーション研究会
協賛： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
計算分子科学研究拠点 (TCCI)
白瀧酒造株式会社
日程： 2013年9月2日(月)～4日(水)
会場： 湯沢ニューオータニホテル
参加人数： 45名

【内容】

岡崎 進 先生 (名古屋大学)
「分子動力学法の基礎」
森下 徹也 先生 (産業技術総合研究所)
「拡張系の分子動力学シミュレーションー温度圧力制御から第一原理 MD までー」
齋藤 大明 先生 (金沢大学)
「生体系の分子動力学シミュレーション」

以上

配布先 関係各位	報告書5		作成日 2013年10月28日	
	TCCI ウィンターカレッジ分子シミュレーション 第7回分子シミュレーションスクールー基礎から 応用まで		No. CMSI-13-30	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日にち： 2013年10月23日(水)～25日(金)
 場所： 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
 参加費： 無料
 主催： 自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点(TCCI)
 共催： 分子シミュレーション研究会、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 世話人： 吉井範行(名古屋大学)、奥村久士(分子科学研究所)

【概要】

講義は学部卒業程度の知識があれば理解できるような内容となっており、特にシミュレーションの経験や専門知識は前提としていません。これから分子シミュレーションを始めようとしておられる学部学生や大学院生、または実験家や企業の研究者など、計算科学に興味がある方々を対象としました。

【プログラム】

<第1日目:10月23日(水)>

8:45-9:00 受付
 9:00-9:15 開会式 樋渡 保秋先生(金沢大学名誉教授)挨拶
 9:15-10:45 松本充弘先生(京都大学)「シミュレーションの全体像・概論」
 10:55-12:25 森田明弘先生(東北大学)「コンピュータシミュレーションと理論化学」
 12:25-13:45 昼食
 13:45-15:15 吉井範行先生(名古屋大学)「力学、解析力学、数値解法、拘束動力学」
 15:25-16:55 松林伸幸先生(京都大学) 「統計熱力学の概要」
 16:55-18:35 奥村久士先生(分子科学研究所)
 「各種統計アンサンブルの生成法、拡張アンサンブル法」

<第2日目:10月24日(木)>

9:00-10:30 三上益弘先生(慶應義塾大学)
 「原子間・分子間相互作用エネルギー関数と長距離力計算法」
 10:40-12:10 岡崎進先生(名古屋大学)
 「分子シミュレーションに基づいた自由エネルギー計算」
 12:10-13:30 昼食
 13:30-15:00 長岡正隆先生(名古屋大学)
 「化学反応と分子シミュレーションー気相分子の素反応から分子凝集状態の複合化学反応へー」
 15:10-16:40 北尾彰朗先生(東京大学)「集団座標による分子シミュレーションの解析」
 16:50-18:20 林重彦先生(京都大学)「生体系のQM/MM法」
 18:30-20:30 懇親会 上田 顕先生(京都大学名誉教授)挨拶

<第3日目:10月25日(金)>

- 9:00-10:30 篠田渉先生(産業技術総合研究所)
「階層的分子モデルによるMD-全原子モデルを元にした粗視化分子モデルの構築」
- 10:40-12:10 三浦伸一先生(金沢大学)「経路積分分子動力学法」
- 12:10-13:30 昼食
- 13:30-15:00 山本量一先生(京都大学)「非平衡分子動力学シミュレーション」
- 15:10-16:40 森下徹也先生(産業技術総合研究所)「第一原理分子動力学法」
- 16:50-18:20 兵頭志明先生(兵庫県立大学)「材料のシミュレーション」
- 18:20-18:35 修了書授与および閉会式

以上

配布先 関係各位	報告書6		作成日 2013年12月4日
	第2回 CMSI 人材育成シンポジウム(配信2) 「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」		No. CMSI-13-38
			作成
			CMSI 事務局 三浦

京コンピュータの共用が始まって1年が過ぎ、大変多くの利用者が計算を実施、科学的な成果を上げつつあるなか、既に京コンピュータの次のエクサフロップス級のスパコンの実現に向けて話が進められています。しかし、そのような計算機が作られたとき、使う側として直面する問題とがいくつか挙げられます。その中で今回は2つの事柄に焦点を当てました。

一つが数値誤差で、もう一つは可視化の問題です。超並列計算機を用いた計算では、数値誤差が発生することがあります。その原因は特定されているものもいくつかありますが、現実のアプリケーションでは様々なアルゴリズムが混ざり合っているため、原因を特定することが難しい場合があります。計算精度が保証されないと結果は意味をなさなくなるので、これは深刻な問題になります。一方、大量の計算データを可視化することも、大変難しい場合があります。これには、結果を理解するために可視化しないといけない場合の問題と、結果を一般の人たちに紹介する場面での問題と、各々の場合による難しさも違ってきます。これは、CMSI の中でも分野によって問題の性質が異なり、一括するにはできないものではありませんが、この問題もプロジェクトとしては非常に大事な問題ですので、今回取り上げてみました。

【開催要項】

開催日 : 2013年12月2日(月) 13:00-17:00

開催場所: 大阪大学 基礎工学研究科 G217 (配信元)

配信場所: 以下の開催場所を参照

<主催> 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【プログラム】

- 13:00-13:10 「趣旨説明」
下司雅章 (大阪大学ナノセンター)
- 13:10-13:50 「精度保証付き数値計算とスーパーコンピュータ」
大石進一 (早稲田大学理工) ・テキスト
- 13:50-14:20 「連立一次方程式の反復解法ソルバーにおける並列処理と収束精度の問題について」
片桐孝洋 (東京大学情報基盤センター)、黒田久泰 (愛媛大学)
- 14:20-14:50 「線形計算における誤差解析の事例」
山本有作 (電気通信大学) ・テキスト
- 14:50-15:20 Break
- 15:20-15:40 「可視化と純粋数学に駆動された計算物質科学の一例
～K4 フェノール樹脂の DFT 計算と古典 MD 計算へ～」 萩田克美 (防衛大学)
- 15:40-16:00 「生物学者のワークフローにフィットさせた可視化解析ソフトの開発と応用」
大綱英生 (ユタ大学)
- 16:00-16:40 「大規模な計算結果の可視化における課題とアプローチについて」
小野謙二 (理化学研究所)
- 16:40-17:00 まとめ

【開催場所】

- ・東北大学 金属材料研究所
- ・東京大学 柏キャンパス 物性研究所
- ・東京大学 本郷キャンパス
- ・金沢大学
- ・豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター
- ・分子科学研究所 実験棟
- ・名古屋大学 工学部 1 号館
- ・京都大学 福井謙一記念研究センター
- ・大阪大学 (配信元) 豊中キャンパス
- ・大阪大学 吹田キャンパス
- ・CMSI 神戸拠点(計算科学研究機構内)

以上

配布先 関係各位	報告書7	作成日 2013年12月18日	
	第3回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と分子物性の理論～ TCCI ウインターカレッジ:量子化学	No. CMSI-13-41	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

現在、量子化学では電子相関や相対論効果を精密に記述する緻密な電子状態理論が開発されています。これらの最先端の理論開発では、理論の基礎を熟知していることが必須になります。今回のスクールでは、この観点から基礎理論の解説を重視し、Hartree-Fock 法やDirac-Fock 法、Coupled Cluster 法から講義するスクールを企画しました。講義では簡単な演習も行い、また電子状態理論は、様々な分子物性の解析、新しい概念の創出、機能性分子や分子デバイスの開発に有用なアプローチとして利用されています。そこで、分子物性の基礎理論やその応用について、いくつかの研究に焦点をあて、解説していただきました。いずれの講義についても、最先端で研究を行っておられる先生方を講師としてお招きし、基礎から分かりやすく解説していただきました。また、講師陣との意見交換や交流もできるように、参加者によるポスター発表も行いました。

電子状態理論を志している学部学生や大学院学生、若手研究者、実験研究者の方々など、電子状態理論に興味を持っておられる皆様を対象として開催しました。

【開催要項】

日にち: 2013年12月16日(月)、17日(火)

参加費: 無料

主催: 自然科学研究機構 分子科学研究所

共催: 計算分子科学研究拠点(TCCI)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI、理化学研究所 計算科学研究機構
ポスター

会場: 小会議室前

懇親会: 2013年12月16日(月)18:00～ (分子科学研究所 職員会館 1F)

世話人: 江原正博(分子研・計算センター)、柳井毅(分子研)、中嶋隆人(計算科学研究機構)、天能精一郎(神戸大学)

【開催プログラム】

12月16日(月)

13:30 - 13:40 はじめに 司会: 倉重佑輝(分子研)

13:40 - 15:30 阿部穰里先生(首都大学東京)

「Dirac-Hartree-Fock 法を中心とした相対論的量子化学法」

15:30 - 15:40 休憩

15:40 - 17:30 中井浩巳先生(早稲田大学)

「量子化学における第2量子化の手法」

18:00 - 19:30 懇親会

12月17日(火)

司会: 秋永宜伸(計算科学研究機構)

9:00 - 10:50 中野雅由先生(大阪大学)

「開殻分子系の光応答物性の理論」

10:50 - 11:00 休憩

11:00 - 12:00 受講者の研究発表(poster)

12:00 - 13:30 昼食

司会:大西裕也(神戸大)

13:30 - 15:20 山下晃一先生(東京大学)

「太陽エネルギー変換過程の理解と予測に向けた計算化学」

15:20 - 15:30 休憩

15:30 - 17:20 福田良一先生(分子科学研究所)

「電子励起状態の量子化学－近赤外光の利用と溶媒効果」

17:20 - 17:30 おわりに

以上

配布先 関係各位	報告書8	作成日 2014年1月6日	
	平成25年度 CMRI「MPIプログラミング講習会」	No. CMSI-13-43	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年12月25日 9:30~17:30

会場: 名古屋工業大学 講堂2階会議室

参加人数: 51名

講師: 青山幸也氏 (高度情報科学技術研究機構(RIST)神戸センター)

受講料: 無料

【主催】東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)

【共催】名古屋工業大学、高度情報科学技術研究機構(RIST)

以上

配布先 関係各位	報告書9		作成日 2014年2月8日	
	International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science		No. CMSI-13-51	
				作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

Date: Tuesday, February 4th, 2014

Venue: Sanjo Conference 2F Hall, The University of Tokyo, Hongo Campus

Number of Attendees: 44 people

【内容】

1. International session

10:00-10:05 Opening remarks: Prof. Hideo Sekino, TUT

10:05-10:10 Welcome speech: Prof. Shinji Tsuneyuki, Univ. of Tokyo

10:10-10:55 Seeking a sustainable model for scientific simulation
Dr. Robert Harrison, Stony Brook Univ.

10:55-11:40 Massively parallel programming techniques in electronic structure theory
Dr. Beverly Sanders, Univ. of Florida

11:40-12:25 Linear Scaling Density Functional Theory with Daubechies Wavelets
for Massively Parallel Architectures
Dr. Laura Ratcliff, CEA/INAC

12:25-14:00 lunch break

2. Japan session

14:00-14:25 Parallel implementation and application of planewave-based first-principles
MD simulator "PHASE"
on K computer

Dr. Takahiro Yamasaki, NIMS

14:25-14:50 Development of massively parallel density matrix renormalization group method
Dr. Shigetoshi Sota, Riken AICS

14:50-15:15 Development of massively-parallelized electron dynamics program on the K computer
and its application
Dr. Masashi Noda, IMS

15:15-15:40 Development of FMO program for recent HPC systems: K-computer and GPGPU cluster
Dr. Hiroaki Umeda, Univ. of Tsukuba

15:40-16:05 Acceleration and parallelization of DFTB aimed at large scale molecular dynamics (tentative)
Dr. Hiroaki Nishizawa, Waseda Univ.

16:05-16:25 coffee break

3. Discussion session chaired by Prof. Hideo Sekino (TUT)

16:25-16:55 Free Discussion

16:55-17:05 Closing remarks

Prof. Hideo Sekino, TUT

以上

配布先 関係各位	報告書10	作成日 2014年3月5日	
	第24回CMDワークショップ	No. CMSI-13-55	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日程： 2014年2月24日(月)－ 28日(金)
 場所： 大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟
 主催： 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター
 大阪大学大学院理学研究科物理学専攻
 大阪大学サイバーメディアセンター
 東京理科大学
 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 独立行政法人日本学術振興会 研究拠点形成事業 A.先端拠点形成型
 大阪大学 Quantum Engineering Design Research Initiative
 共催： 東京大学物性研究所
 参加人数： 38名

【概要】

材料科学、物質科学は、21世紀においても社会の技術基盤の発展を支える中心的な役割を果たすと考えられていますが、これまでの経験的な組み合わせ論的新素材開発手法のみでは、新しい知見に到達するまでの研究の効率化と省資源化・環境調和性の実現についての総合的検討の現代の必要性に対処できないと考えられています。コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD®)の手法は、このような状況におけるブレイクスルーとなる可能性が極めて高いと期待されています。このワークショップはコンピューショナル・マテリアルズ・デザインの可能性を展望するとともに、その基本となる最先端の計算手法を学び、実際にマテリアルズ・デザインを体験することにより、物質科学の新しいパラダイムに対応できる基礎能力をつけることを目的としています。第17回からスーパーコンピューターコースを設置し、スーパーコンピューターを活用して大規模な系への適用についての実習も行っています。次世代スパコンプロジェクトが進行している中、それを使いこなす人材の育成が急務です。しかし、F1マシンに例えられる次世代スパコンは容易に使いこなせるものではありません。そのためには、まず現存するスーパーコンピューターを十分使いこなす人材を育成することから始める必要があります。本ワークショップでは、ベクトル化や並列化といったテクニカルな部分よりも、実際に計算して物質を設計する点に重点をおいて、5日間スパコンを自由に使って実習を行いました。

【プログラム】

効率性、環境調和性が要求される 21 世紀の研究開発で重要な役割を果たすコンピューショナル・マテリアルズ・デザイン手法に関するチュートリアルを含むワークショップ。

- ・第一原理計算の基礎
- ・マテリアルデザインの基礎と応用
- ・MACHIKANEYAMA2002 実習
- ・STATE-Senri 実習
- ・Osaka2k 実習
- ・ABCAP 実習
- ・HiLAPW 実習
- ・NANIWA-Series 実習
- ・ES-OPT 実習
- ・RSPACE 実習
- ・Ecalj 実習
- その他

以上

配布先 関係各位	報告書11		作成日 2014年3月6日	
	【配信セミナー】教育・人材育成 「マルチスケールの計算材料科学」		No. CMSI-13-57	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【概要】

近年の計算材料科学の進展によりマイクロからマクロにいたる時空間のマルチスケールにわたって材料物性について計算機を用いて研究を行うことが可能となりつつある。そこで、本拠点は「マルチスケール計算材料科学」を軸とした新素材の開発や材料物性の解明を目指している。今回のセミナーでは、材料科学の内部組織の形成過程の代表例である dendritic 成長 (ハードマター) と液晶のパターン形成 (ソフトマター) について計算材料科学の第一線で研究をされている 2 名の講師を招いて講演を行っていただく。また、セミナー参加者として、様々な異なるバックグラウンドや専門を持つ修士以上の学生や若手研究者などを対象とし、基礎から最新の研究成果までの講演を予定している。

【開催要項】

開催日: 2014年3月5日(水) 14:00-17:00

配信元: 東北大学青葉山キャンパス 理学合同 B 棟 7 階 721 室(大会議室) (配信元)

主催: 東北大学金属材料研究所 HPCI 計算材料科学研究拠点 (CMRI)、
計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【プログラム】

(司会 寺田 弥生 (東北大学金属材料研究所 CMRI))

14:00 挨拶 川勝年洋 教授 (東北大学 理学研究科 物理学専攻)

14:05-15:25 「フェーズフィールド・モデルの基礎と dendritic 成長への応用」
大野 宗一 准教授
(北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 マテリアル設計分野)

15:25-15:35 休憩

15:35-16:55 「液晶の秩序構造形成の連続体シミュレーション」
福田 順一 主任研究員
(産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 ソフトマターモデリンググループ)

16:55-17:00 総括 川勝 年洋 教授

【開催場所】

- ・東北大学 青葉山キャンパス
- ・東北大学 片平キャンパス
- ・産業技術総合研究所
- ・東京大学 柏キャンパス 物性研究所
- ・東京大学 駒場キャンパス
- ・東京大学 本郷キャンパス
- ・金沢大学
- ・福井工業高等専門学校
- ・豊橋技術科学大学
- ・分子科学研究所 実験棟
- ・名古屋大学
- ・京都大学 福井謙一記念研究センター
- ・大阪大学 豊中キャンパス 基礎工学研究科
- ・大阪大学 吹田キャンパス 工学部
- ・CMSI 神戸拠点 (計算科学研究機構 5F)

以上

配布先 関係各位	報告書12		作成日 2014年3月19日	
	OCTA 講習会&トレーニング		No. CMSI-13-60	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2014年3月18日(火) 10:00-17:00
 会場: (独) 産業技術総合研究所 臨海副都心センター バイオ・IT 融合研究棟(別館)
 参加費: 無料
 参加者: 27名
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)、(独)産業技術総合研究所

【概要】

経済産業省および NEDO の出資による「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」(通称「土井プロジェクト」)の成果物として 2002 年に公開された「ソフトマテリアルのための統合シミュレータ: OCTA」はプロジェクト終了後もバージョンアップが続けられ、昨年 3 月には最新版の OCTA2013 がリリースされました。

また、来る 2014 年 3 月には、OCTA の応用事例をまとめた成書である「高分子材料シミュレーション-OCTA 活用事例集」(化学工業日報社)も発行される運びとなりました。

この機会を利用して、OCTA の講習会とトレーニングを開催しました。OCTA を使い始めたばかりの方、これから OCTA を使ってみようとする方、あるいは「そもそも OCTA って何?」という興味を持たれた方など、主に初心者向けの内容です。午前中はシミュレーションに用いられている理論的背景の解説を行い、午後は実際に OCTA を使って各自ノートパソコンを用いて操作法を学んでいただきました。

最後に OCTA に関する総合的な質疑応答の時間を取り、ユーザー、エンジン開発者との直接的な議論を行いました。

【プログラム】

10:00-10:05 挨拶 (東北大 川勝 年洋、産総研 森田裕史)
 10:05-10:35 OCTA の概要 (JSOL 小沢 拓)
 10:35-11:20 COGNAC の機能と事例紹介 (旭化成 青柳 岳司)
 11:20-12:05 SUSHI の機能と事例紹介 (日本ゼオン 本田 隆)
 12:05-13:00 昼食休憩

 13:00-15:00 OCTA トレーニング 1 (JSOL 小沢 拓)
 15:00-15:15 休憩
 15:15-16:30 OCTA トレーニング 2 (JSOL 小沢 拓)
 16:30-17:00 総合質疑応答

以上

配布先 関係各位	報告書13		作成日 2013年7月18日	
	CMSI 第5部会「マルチスケール材料科学」 重点課題研究会 「材料中の複雑構造・組織の第一原理解析」		No. CMSI-13-11	
				作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

主催： CMSI 第5部会、CMRI

日時： 2013年7月17日(水) 13:00-18:30

会場： 産業技術総合研究所 関西センター

【プログラム】

- 1:00-1:15 香山正憲(産総研)、開催趣旨説明
- 1:15-2:10 尾崎泰助(北陸先端大)「OpenMX での大規模計算の現状と展望」
- 2:10-3:05 澤田英明(新日鐵住金)「鋼中 NaCl 型析出物界面の構造とエネルギーの第一原理計算」
- 3:05-3:20 **Break**
- 3:20-4:15 譯田真人(大阪大)「電子論に基づく Fe-Si 合金中のらせん転位の解析にむけて」
- 4:15-4:40 香山正憲(産総研)「局所エネルギー・局所応力の第一原理計算の現状」
- 4:40-5:05 V. Sharma(産総研)「Fe/TiC 整合界面の局所エネルギー・局所応力解析」
- 5:05-5:20 **Break**
- 5:20-6:15 毛利哲夫(東北大)「Phase-Field 法と第一原理解析の連結に向けて」

以上

配布先 関係各位	報告書14		作成日 2013年7月29日	
	第1回 CCMS ハンズオン(ソフトウェア講習会)		No. CMSI-13-13	
	Machikaneyama2002 チュートリアル(固体電子状態計算 初級)		作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

- 日 時: 平成 25 年 7 月 26 日(金) 10:00 -- 15:30
 場 所: 東京大学物性研究所 6F A614, A612 セミナー室
 受講人数: 10 名
 講 師: 赤井久純(東大物性研)、土居抄太郎(東大物性研)
 主 催: 東京大学物性研究所計算物質科学研究センター(CCMS)
 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 共 催: 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター

<本講習会の対象者>

- * Machikaneyama2002 を用いた電子状態計算に興味のある理論家・実験家
- * UNIX でのファイル操作、編集、コマンドの実行に慣れている方

【概要】

Machikaneyama2002 はグリーン関数法に基づく固体電子状態計算のためのプログラムパッケージである。特徴は有限基底を用いて行列の固有値問題をとく通常の方法と異なり、散乱波法によりコーンシャム方程式を解く点である。そのため高速、高精度な計算が可能になるとともに、一般的な散乱問題を扱うことができる。例えば、不純物問題や不規則系の計算は通常の手法では困難であるが、散乱波法では容易に扱うことができる。またグリーン関数を直接計算するために、輸送現象、相関関数の計算したり、多体摂動計算の出発点として用いることもできる。

今回の講習会では、物性研において各自のノートPCあるいは物性研で用意するPCを端末にして、阪大ナノサイエンスデザイン研究センターに設置したクラスターPC に接続して、単純な結晶の電子状態計算から、不規則合金の計算、不規則局所モーメントを用いた磁気転移温度の評価等に関する実習を行った。

以上

配布先 関係各位	報告書15		作成日 2013年7月31日	
	平成25年度		No. CMSI-13-14	
	CMRI (東北大学計算材料科学研究拠点) 研究会			作成
	合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日にち: 平成25年7月30日(火)
 場所: 東北大学金属材料研究所 2号館会議室
 参加費: 無料(懇親会:会費4500円程度)
 参加対象者: 物質科学、計算科学に興味がある方はどなたでも。
 参加人数: 31名

【プログラム】

11:00-11:15 はじめに: 毛利哲夫(東北大学・金研) 大野かおる(横浜国大)
 11:15-12:00 基調講演: 鋼の casting・凝固における課題
 新日鐵住金(株)松宮 徹

 13:00-13:45 招待講演: 鑄塊のマクロ偏析シミュレーション
 東北大学大学院工学研究科 及川勝成
 13:45-14:30 Quantitative phase-field simulation of microsegregation in alloy solidification
 Munekazu Ohno , Faculty of Engineering, Hokkaido University
 14:30-15:15 Large-scale phase-field simulations during directional solidification of binary alloy
 Tomohiro Takaki, Mechanical and System Engineering, Kyoto Institute of Technology

 15:45-16:30 Understanding interfacial properties of metals during solidification large-scale
 molecular dynamics simulations
 Yasushi Shibuta, Department of Materials Engineering, The University of Tokyo
 16:30-17:30 招待講演
 Nucleation and pattern formation in a simple dynamical density functional theory
 Professor Laszlo Granasy,
 Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre for Physics,
 Budapest, Hungary

以上

配布先 関係各位	報告書16		作成日 2013年8月19日	
	CMSI 第1部会「新物質・新量子相の基礎科学」		No. CMSI-13-17	
	夏の学校 2013			作成
	エネルギーを創造する新物質の基礎科学的課題を徹底議論			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

主催： CMSI 第1部会
 日程： 8月12日(月)～8月16日(金)
 場所： 山形県山形市蔵王温泉ホテル樹林
 参加人数： 32名(CMSI 研究者、関係研究室の若手ポスドク・大学院生等)
 参加費： 無料

【開催主旨】

部会の枠を越えて共通する科学的興味と課題を共有し、課題解決へ向けた議論を継続的に行うため、毎年中心課題を選定してサマースクールを行った。専門家を講師として、また若手研究者を話題提供者として招き、参加者全員が参加し課題解決に向けた活発で濃密な議論を行った。

本年度は、次世代太陽電池や新奇熱電素材など、エネルギー問題への貢献をめざすデバイスの候補に現れる現実の非平衡現象と応用上解決すべき課題やそこから抽出される基礎科学的課題を中心とした。

【プログラム】

8月12日 午後 講師：石崎 章仁（分子科学研究所）
 講師：野村健太郎（東北大学・金属材料研究所）
 夜 ショートトーク、フリーディスカッション

8月13日 午前 講師：野村健太郎（東北大学・金属材料研究所）
 講師：浅井美博（産総研）
 午後 講師：辻直人（東京大学）
 講師：杉野修（東京大学）

8月14日 午前 講師：浅井美博（産総研）
 講師：館山 佳尚（物質・材料研究機構）
 午後 講師：但馬敬介（理化学研究所）
 ショートトーク、フリーディスカッション
 夜 ショートトーク、ディスカッション

8月15日 午前 講師：館山 佳尚（物質・材料研究機構）
 講師：森田 明弘（東北大学大学院理学研究科化学専攻）
 午後 フリーディスカッション

8月16日 午前 講師：森田 明弘（東北大学大学院理学研究科化学専攻）
 午後 ショートトーク

以上

配布先 関係各位	報告書17		作成日 2013年9月12日
	計算分子科学研究拠点 第4回研究会		No. CMSI-13-24
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年9月10日(火) 13:00～ 及び 懇親会
2013年9月11日(水) 9:00～

場所: 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 大会議室

主催: 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点

参加費: 無料

参加人数: 68名

【プログラム】

第1日目: 9月10日(火) 13:30～18:45

座長: 榊 茂好(京大福井謙一記念研究センター)

セッション1: ご挨拶、将来のHPCIについて

13:00-13:10 開会の辞、拠点報告
高塚 和夫 (東大院総合文化/分子研)

13:10-13:15 ご挨拶 (文部科学省)

13:15-13:35 将来のHPCI講演1
「計算化学にとってのポスト「京」コンピュータ」
平尾 公彦(理研 AICS)

13:35-13:45 将来のHPCI講演2
「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来のHPCIシステムに関する調査研究」
石川 裕(東大情報基盤センター)

13:45-13:55 将来のHPCI講演3
「高バンド幅アプリケーションに適した将来のHPCIシステムのあり方に関する調査研究」
小林 広明(東北大サイバーサイエンスセンター)

13:55-14:05 将来のHPCI講演4
「将来の演算加速機構について」
児玉 祐悦(筑波大計算科学研究センター)

14:05-14:25 全体質疑

14:25-14:40 休憩

座長: 中嶋 隆人(理研 AICS)

セッション2: 重点課題報告: 「京」が化学を変える(1)、神戸拠点、国際会議

14:40-15:10 重点課題報告1
「アクトミオシンモーターの計算分子科学」
笹井 理生(名大院工)

15:10-15:25 重点課題報告2
「モデル空間量子モンテカルロ法の並列実装といくつかの応用例」
大塚 勇起(神戸大院システム情報)

- 15:25－15:40 重点課題報告3
「超並列 MP2-F12 法による巨大分子の相互作用エネルギーの計算」
大西 裕也(神戸大院システム情報)
- 15:40－16:10 重点課題報告4
「大規模分子系の量子化学計算」
北浦 和夫(神戸大院システム情報)
- 16:10－16:30 神戸拠点の活動、国際会議について
北浦 和夫(神戸大院システム情報)
- 16:30－16:45 休憩

座長: 北浦 和夫(神戸大院システム情報)

セッション3:セッション3:TCCIの連携、特別支援課題報告:「京」への大展開を目指して(1)

- 16:45－17:15 連携講演1
「エネルギー・環境関連の連携研究」
榊 茂好(京大福井謙一記念研究センター)
- 17:15－17:45 連携講演2
「NTChemと京コンピュータ」
中嶋 隆人(理研 AICS)
- 17:45－18:15 連携講演3
「ハイブリッド分子シミュレーションで探る生体分子機能」
林 重彦(京大院工)
- 18:15－18:45 特別支援課題報告1
「レプリカ交換法付加機能プログラム REM の開発と利用」
榮 慶丈(名大院理)
- 18:45－19:00 移動・休憩
- 19:00－20:30 懇親会(場所:自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室)

第2日目:9月11日(水)9:00～17:00

座長:奥村 久士(分子研)

セッション4:技術報告、CMSI/TCCI教育活動報告

- 9:00－9:30 技術報告1
「京コンピュータは特殊な計算機なのか」
石村 和也(分子研)
- 9:30－10:00 技術報告2
「2013 International HPC summer school 参加報告」
安藤 嘉倫(名大院工)
- 10:00－10:25 CMSI教育活動報告
「計算科学における人材育成(仮題)」
下司 雅章(阪大ナノサイエンスデザイン教育研究センター)
- 10:25－10:40 TCCI教育活動報告
「TCCIにおける人材育成・教育活動の報告」
吉井 範行(名大院工)
- 10:40－10:50 休憩

座長:佐藤 啓文(京大院工)

セッション 5: TCCI の連携、特別支援課題報告:「京」への大展開を目指して(2)

10:50-11:20 連携講演4

「触媒・電池の元素戦略」

江原 正博(分子研)

11:20-11:50 特別支援課題報告2

「量子論的分子プロセスに向けた経路積分法と電子状態計算の結合手法・計算プログラムの開発」

三浦 伸一(金沢大院自然科学)

11:50-12:20 特別支援課題報告3

「ナノ・生体系の化学反応ダイナミクス: 分割統治法を用いた検討(仮題)」

小林 正人(早大高等研)

12:20-13:30 昼食・休憩

座長:関野 秀男(豊橋技科大情報・知能)

セッション 6: 特別講演、重点課題報告:「京」が化学を変える(2)

13:30-14:00 特別講演1

「TOMBO による超並列第一原理全電子スペクトル計算」

大野 かおる(横浜国大工/東北大金研)

14:00-14:30 特別講演2

「オーダーN 法 DFT 計算プログラムの開発とゲルマニウムハットクラスターの成長過程に対する応用計算」

宮崎 剛(物材機構)

14:30-15:00 重点課題報告5

「京コンピュータを用いたウイルスカプシドの全原子シミュレーション」

岡崎 進(名大院工/分子研)

15:00-15:30 重点課題報告6

「メタンハイドレートの融解のダイナミクス(仮題)」

田中 秀樹(岡山大理)

15:30-15:50 休憩

座長:岡崎 進(名大院工/分子研)

セッション 7: 特別支援課題:「京」への大展開を目指して(3)、まとめ

15:50-16:20 特別支援課題報告4

「有機系太陽電池の高効率化へ向けた超並列時代の計算化学」

城野 亮太(東大院工)

16:20-16:50 重点課題報告5

「分子集団機能:原子レベル解析からデザインへ」

松林 伸幸(京大化研)

16:50-17:00 まとめ、閉会の辞

岡崎 進(名大院工/分子研)

以上

配布先 関係各位	報告書 1 8		作成日 2013 年 10 月 16 日	
	Satellite Meeting 2013 in Kobe ~CMSI Kobe International Workshop 2013: Recent Progress in Tensor Network Algorithms~		No. CMSI-13-26	
				作成
				CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 2014 年 10 月 16 日（水）～18 日（金）
 会場： 理化学研究所 計算科学研究機構 R104-2 セミナー室
 参加費：無料
 参加者：40 名（講師 6 名含む）
 主催： 計算物質科学イニシアティブ（CMSI）

【概要】

The tensor network algorithm is one of the most promising numerical methods for investigating quantum many-body systems in computational condensed-matter physics and quantum chemistry. In recent years, it has achieved a great progress with the help of quantum information theory and new matrix decomposition technique in computational science. The objective of this workshop was to offer a forum where concerned researchers could assemble and exchange information on the latest results and newly established methodologies, and discussed future directions of the interdisciplinary studies between the computational chemistry, physics, and mathematics, and the computer science.

【プログラム】

- Oct. 16th (Wed) 10:20-18:00
 - 9:30- Registration
 - 10:20- Opening
 - 10:30- Garnet Chan (Princeton) [60+30min]
 - 12:00- Lunch at FOCUS
 - 13:30- Shintaro Takayoshi (NIMS) [30+15min]
 - 15:00- Roman Orus (Johannes Gutenberg-Universität Mainz) [60+30min]
 - 17:00- Tsuyoshi Okubo (ISSP) [30+15min]
 - 18:00- Banquet and Poster Session at AICS Lounge
- Oct. 17th (Thu) 9:30-18:00
 - 09:30- Hiroaki Matsueda (Sendai National College of Technology) [60+30min]
 - 11:00- K computer tour & group photo
 - 12:00- Lunch at FOCUS
 - 13:30- Kohei Hayashi (NII, ERATO) [30+15min]
 - 15:00- Hui-Hai Zhao (ISSP) [60+30min]:
 - 17:00- Hiroshi Ueda (RIKEN) [30+15min]
 - 19:00- Dinner at Kobe downtown

- Oct. 18th (Fri) 9:30-17:00
 - 09:30- Vladimir Kazeev (ETHZ) [60+30min]
 - 11:15- Naoki Nakatani (Hokkaido) [30+15min]
 - 12:00- Lunch at Kachoen
 - 13:30- Shigetoshi Sota (RIKEN AICS)[30+15min]
 - 15:00- Glen Evenbly (Caltech)[60+30min]
 - 16:30- Closing

以上

配布先 関係各位	報告書19		作成日 2013年10月23日	
	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Tokyo Novel Electronic Structure Method		No. CMSI-13-27	
				作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年10月18日(金)~19日(土)
 会場: 東京大学 本郷キャンパス
 参加費: 無料
 参加者: 23名

【プログラム】

●Oct 18

13:30 Opening
 13:40-14:50 (1)
 14:50-15:00 Break
 15:00-16:10 (2)
 16:10-16:20 Break
 16:20-16:50 Short Talk 1
 16:50-17:20 Short Talk 2
 17:20 welcome party

●Oct 19

10:00-11:10 (3)
 11:10-11:20 Break
 11:20-12:30 (4)
 12:30-13:40 Lunch
 13:40-14:50 (5)
 14:50-15:00 Break
 15:00-16:10 (6)
 16:10-16:20 Break
 16:20-16:50 Short Talk 3
 16:50-17:20 Short Talk 4
 17:20 Closing

◆Invited Speakers

Jussi Enkovaara (Aalto University)
 Luigi Genovese (CEA)
 Volker Schauer (University of Stuttgart)
 Eiji Tsuchida (AIST)
 Tomoya Ono (Osaka University)

以上

配布先 関係各位	報告書20		作成日 2013年10月23日	
	CMSI International Satellite Meeting 2013 in Nagoya Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism		No. CMSI-13-28	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2013年10月17日(木)~19日(土)

会場: 名古屋都市センター

参加費: 無料

参加者: 20名

【Aims and scope】

Computational studies of the biomolecular systems such as proteins and lipid membranes have been carried out using massive parallel supercomputers.

In this meeting the latest findings of the research obtained by using the large-scale molecular dynamics and QM/MM calculations were given by the invited speakers.

In addition to these presentations we also discussed the future scientific challenges to be solved in the computational sciences and the technical problems of computation that we must overcome.

【Program】

Oct 17, Thu.

14:00–14:15 Plenary Talk by host

14:15–15:00 Domestic

Coarse-Grained Molecular Dynamics Study of Lipid Self-Assembly
Wataru Shinoda(AIST)

15:00–15:45 Domestic

Molecular Dynamics Simulations of Biomolecular Motor F1-ATPase
Mitsunori Ikeguchi(Yokohama City Univ.)

15:45–16:15 Coffee Break

16:15-16:45 Domestic

A Molecular Dynamics Study on Proton Behavior in Aqueous and Biological Environments
Takefumi Yamashita(Tokyo Univ.)

16:45-17:30 Domestic

All-Atom Analysis of Protein Solvation through Combination of Molecular Simulation
and Solution Theory
Nobuyuki Matubayasi(Kyoto Univ.)

17:30-18:30 International

Monte Carlo Simulations of Concentrated Protein Solutions
Mikael Lund(Lund Univ.)

18:30–19:00 Discussion

Oct 18, Fri.

9:30-10:15 Domestic

Development of a Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation
Program, MODYLAS, on the K computer
Yoshimichi Andoh(Nagoya Univ.)

- 10:15–10:45 Coffee Break
- 10:45-11:45 International
Large-scale Molecular Dynamics Simulations with LAMMPS
Tzu Ray Shan(Sandia National Labs)
- 11:45-13:30 Lunch
- 13:30-14:00 Domestic
Development of GENESIS for large Scale Molecular Dynamics Simulation
Jaewoon Jung(RIKEN)
- 14:00-14:30 Domestic
Molecular Dynamics Simulation of Structure and Vibrational Spectra at Water/
Vapor and Ice/Vapor Interfaces : Effect of Charge Transfer
Tatsuya Ishiyama(Tohoku Univ.)
- 14:30–15:00 Coffee Break
- 15:00-15:45 Domestic
Implementation and Application of the Massively Parallel QM/MM-ER Method
Hideaki Takahashi(Tohoku Univ.)
- 15:45-16:45 International
Multi-scale computational analysis of biomolecular actions
Qiang Cui(University of Wisconsin)
- 18:00-20:00 Banquet

Oct 19, Sat.

- 9:30-10:15 Domestic
Kenji Yasuoka(Keio Univ.)
- 10:15-10:45 Coffee Break
- 10:45-11:15 Domestic
Free Energy of Solubilization of Solute Molecules in SDS Micelle
Kazushi Fujimoto(Ritsumeikan Univ.)
- 11:15-11:30 Wrap-up

◆Invited Speakers

Qiang Cui, University of Wisconsin, USA
Mikael Lund, Lund University, Sweden.
Tzu Ray Shan, Sandia National Laboratories, USA.
Kenji Yasuoka, Keio Univ.
Mitsunori Ikeguchi, Yokohama City Univ
Nobuyuki Matubayasi, Kyoto Univ.
Hideaki Takahashi, Tohoku Univ.
Wataru Shinoda, AIST
Yoshimichi Andoh, Nagoya Univ.

以上

配布先 関係各位	報告書21		作成日 2013年10月23日
	CMSI International Symposium 2013 - Extending the power of computational materials sciences with K-computer -		No. CMSI-13-29
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年10月21日(月)~22日(火)

場所: 伊藤国際学術研究センター

参加人数: 123名

【開催趣旨】

1) 超並列計算がもたらす新しい計算物質科学を発信

物性、分子、材料の分野や、各部会で取り組む戦略課題を基盤とし、それを超えた大規模超並列計算が拓くサイエンスの課題を話題として取り上げ、「京」を中心とする HPCI を用いた成果を世界に発信した。

2) 若手国際交流促進

前半3日程度は小人数で課題特化型若手中心の「サテライトミーティング」、後半2日は「京」のタイムリーな成果や計算物質科学のトピックスの講演等による「シンポジウム」で構成。前半は国際的な若手間の人脈形成を図り、そこでの交流をシンポジウムに持ち込み、活発な議論ができる環境を提供した。

3) 新奇サイエンスの議論の場を継続的に提供

CMSI 研究会(戦略課題の成果発表と計算物質科学の分野振興)とは別開催とし、CMSI 国際シンポジウムとして平成 25、26、27年度の3年連続開催可能な規模として実施し、新しいサイエンスに関する国際的な議論を継続的に行える場を提供した。

【開催概要】

1) 会議の構成

「サテライトミーティング」

ホスト研究室を3カ所定め、特定テーマを設定し、そのテーマに関係した若手ホープを海外から3名招聘。最大20名程度の規模で若手を中心としたコアなミーティングを最大3日間、3箇所でもラレルに行った。

「シンポジウム」

サテライトミーティング後、2日間の日程で会議を行った。海外より2名、国内より2名の計4名の招待講演、「京」利用成果発表、サテライトミーティングで招聘した若手研究者等によるショートプレゼンとラウンジセッション、ポスターセッション、プロジェクト紹介展示、メーカー展示等を行った。

【プログラム】

October 21st, Monday

Chair: Naoki Kawashima (The Univ. of Tokyo)

10:00-10:10 Welcome Address

- Kazuo Kitaura (General chair, Kobe Univ.)
- Yoshio Kawaguchi (MEXT)

10:10-10:30 Welcome & Introduction of CMSI

Shinji Tsuneyuki (CMSI Representative Director, The Univ. of Tokyo)

Chair: Kazuo Takatsuka (The Univ. of Tokyo)

10:30-11:30 Keynote Speech

Global Reaction Route Mapping Strategy: Automatic Exploration of Chemical Reaction Mechanisms

Keiji Morokuma (Kyoto Univ.)

Chair: Takami Tohyama (Kyoto Univ)

©CMSI Priority Research Topic

- 11:30-12:00 Novel Quantum Phases and Nonequilibrium Dynamics in Strongly Correlated Quantum Systems
Masatoshi Imada (The Univ. of Tokyo)
- 12:00-12:30 Post-Hartree-Fock Electronic Structure Calculations on the K
Seiichiro Ten-no, (Kobe Univ.)

Chair: Masatoshi Imada (The Univ. of Tokyo)

- 14:00-15:00 Invited Talk-1
Exploring the dark side of cuprate high-temperature superconductors
by a combination of numerical simulations and experiments"
Shiro Sakai (The Univ. of Tokyo)

©CMSI Priority Research Topic

- 15:00-15:30 Large-Scale and All-Atom Molecular Dynamics Simulation of Viruses Using the
K Computer
Susumu Okazaki (Nagoya Univ.)

Chair: Shinji Saito (Institute for Molecular Science)

- 16:00-16:30 Large-Scale Density-Functional Calculations in the Real-Space Scheme: Bilayer
Graphen and Silicene
Atsushi Oshiyama (The Univ. of Tokyo)
- 16:30-17:00 Understanding the electrode-solution interface from first-principles
Osamu Sugino (The Univ. of Tokyo)
- 17:00-17:30 Mechanism of hydrogen and methane hydrate formation and dissolution
and thermodynamic stability
Hideki Tanaka (Okayama Univ.)
- 17:30-18:00 Development of multiscale structural design and assessment techniques to
improve the performance of metallic structural materials
Masanori Kohyama (Advanced Industrial Science and Technology)

October 22nd, Tuesday

Chair: Naoki Kawashima (The Univ. of Tokyo)

~~ New Science Developed by New Massively Parallel Computation Approach ~~

Plenary Session @ Hall

- 9:00- 9:10 Recent Progress in Tensor Network Algorithms
Synge Todo (CMSI Kobe, The Univ. of Tokyo)
- 9:10-10:00 Invited Talk-2
Simulating quantum many body systems with tensor network states
Glen Evenbly (Caltech)
- 10:20-10:30 Large MD Simulation
Noriyuki Yoshii (Nagoya Univ.)
- 10:30-11:20 Invited Talk-3
Simulating chemical and redox processes in solution and in enzymes
with multiscale QM/MM minimum free energy path method
Weitao Yang (Duke Univ.)
- 11:20-11:30 Novel Electronic Structure Method
Jun-ichi Iwata (The Univ. of Tokyo)
- 11:30-12:20 Invited Talk-4
Taking Nanoelectronics to the Next Level Through NEMO and nanoHUB.org
Gerhard Klimeck (Purdue University)

Parallel Session @ Gallery 1, 2, 3

Gallery-2: Recent Progress in Tensor Network Algorithms

- 13:00-13:30 The tensor-structured solution of high-dimensional evolution equations
Vladimir Kazeev (ETH Zurich)
- 13:30-14:00 Tensor Network Method on Finite Lattice with Periodic Boundary Condition
Hui-Hai Zhao (ISSP, Univ. of Tokyo)
- 14:00-14:30 Tree Tensor Network States (TTNS) and post-DMRG theory for Quantum Chemistry: Generalizations of the DMRG algorithm
Naoki Nakatani (Hokkaido Univ.)
- 14:30-15:00 Doubling entanglement spectrum of tensor renormalization group
Hiroshi Ueda (RIKEN)

Gallery-1: Large MD Simulation

- 13:00-13:30 Monte Carlo Simulations of Concentrated Protein Solutions
Mikael Lund (University of Lund)
- 13:30-14:00 Large-scale Molecular Dynamics Simulations with LAMMPS
Tzu Ray Shan (Sandia National Laboratories)
- 14:00-14:30 Development of Massively Parallel QM/MM method Combined with a Theory of Solutions
Hideaki Takahashi (Tohoku Univ.)
- 14:30-15:00 Development of a Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program, MODYLAS, on the K computer
Yoshimichi Andoh (Nagoya Univ.)

Gallery-3: Novel Electronic Structure Method

- 13:00-13:30 The Reduced Basis Method in All-Electron Calculations with Finite Elements
Volker Schauer (Stanford Univ.)
- 13:30-14:00 Wavelets opportunities for DFT and Post-DFT calculations
Luigi Genovese (Institut Nanosciences et Cryogénie)
- 14:00-14:30 Massively Parallel Electronic Structure Calculations with Real-Space Grids
Jussi Enkovaara (CSC - IT Center for Science)
- 14:30-15:00 Free Discussion

Chair: Koichi Yamashita (The Univ. of Tokyo)

- 15:15-16:15 Invited Talk-5
Electrocatalysis - Atomic Scale Insight
Jan Rossmeisl (Center for Atomic-scale Materials Design (CAMD))

Chair: Tetsuo Mohri (Tohoku Univ.)

- 16:15-17:15 Invited Talk-6
First principles at finite temperatures: New concepts and massively parallel computations
Blazej Grabowski (Max-Planck-Institut für Eisenforschung)
- 17:15-17:30 Closing Remarks
Kazuo Kitaura (The chairman of Executive Committee)

配布先 関係各位	報告書22		作成日 2013年11月21日	
	物性研究所 計算物質科学研究センター 第3 回シンポジウム		No. CMSI-13-36	
	「スピン・軌道相互作用の物理における実験・理 論・計算」		作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時：2013年11月19日(火) 13:00 - 17:40 (18:00～懇親会)

11月20日(水) 10:00 - 17:30

会場：東京大学物性研究所 6階大講義室

【概要】

物性研究所計算物質科学研究センター(CCMS)は K-computer の利用を念頭に、大規模並列計算による物質科学研究の推進を目的として2011年4月に発足した。とくに第1回(2011年9月)、第2回(2012年10月)のシンポジウムでは、共用法大規模実験施設(J-PARC, SPring-8, SACLA, K-computer)の連携をキーワードとして、実験家も交えた討論を行った。

CCMS では、今年度より、元素戦略磁石拠点との連携も深まり、永久磁石の設計に関する研究にも重点をおいている。今回は前2回と比べてよりテーマを絞り、「スピン軌道相互作用」とくに「磁気異方性」に関連したトピックスを中心として、実験・理論・計算にまたがる問題について討論した。

【プログラム】

<11月19日(火)>

- 13:00-13:10 瀧川 仁 (物性研究所長)
- 13:10-13:50 中辻 知 (物性研究所)
「Pr系スピンアイスにおける量子揺らぎと量子臨界性」
- 13:50-14:30 求 幸年 (東京大学)
「スピンアイス伝導系が示す特異な量子伝導現象」
- 14:30-15:10 宮下 精二 (東京大学)
「掃引磁場下での大きなスピン($S > 1/2$)の磁化反転機構」
- 15:10-15:40 コーヒーブレイク
- 15:40-16:20 赤井 久純 (東京大学)
「f電子系の第一原理計算と永久磁石研究への応用」
- 16:20-17:00 小野 輝男 (京都大学)
「電流駆動磁壁移動のメカニズムとスピン軌道相互作用」
- 17:00-17:40 鈴木 義茂 (大阪大学)
- 18:00 懇親会

<11月20日(水)>

- 10:00-10:40 有馬 孝尚 (東京大学)
「磁気秩序が誘起する強誘電性と実効的ベクトルポテンシャル」
- 10:40-11:20 左右田 稔 (物性研究所)
「マルチフェロイック物質 Ba₂CoGe₂O₇ における反強磁的相互作用の観測」
- 11:20-12:00 小野瀬 佳文 (東京大学)
「反対称磁気相互作用による磁性体のトポロジカル輸送現象」

12:00-13:00	ランチ
13:00-13:40	合田 義弘 (東京大学) 「永久磁石材料の保磁力・微細構造と磁気異方性」
13:40-14:20	小田 竜樹 (金沢大学) 「磁性薄膜および MgO 界面の磁気異方性とその電界効果に関する理論的研究」
14:20-15:00	鈴木 隆史 (兵庫県立大学) 「シャストリーサザランド格子磁性体の磁気秩序」
15:00-15:30	コーヒーブレイク
15:30-16:10	山地 洋平 (東京大学) 「イリジウム酸化物における磁性とトポロジカルな磁壁状態」
16:10-16:50	大串 研也 (東京大学) 「稜共有イリジウム酸化物における量子コンパス模型の実証」
16:50-17:30	近藤 猛 (東京大学) 「強相関イリジウム酸化物におけるフェルミノードの直接観察」
17:30	終了

【組織委員】

赤井久純(物性研)、有馬孝尚(東大新領域)、加藤岳生(物性研)、川島直輝(物性研)、辛埴(物性研)、常行真司(物性研)、中辻知(物性研)、益田隆嗣(物性研)、村上洋一(KEK)

以上

配布先 関係各位	報告書23		作成日 2013年12月16日	
	第4回 CMSI 研究会 (物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会)		No. CMSI-13-40	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2013年12月10日(火)～13日(金)
 会場: 東京大学物性研究所 6F 大講義室
 参加費: 無料
 参加者: 183名

【概要】

本年度は、CMSI「計算物質科学イニシアティブ」設置から4年、京コンピュータの供用開始から1年が経過し、数々の成果が上がっている。同時に、次世代エクサスケールコンピューティングに向けたハード、ソフト両面の取り組みが具体性を帯びつつある。このような潮流のもと、物性研スパコン共同利用システムにおいては、京コンピュータと高い互換性を有するシステム C の供用を開始すると共に、1年半後に迫るシステム A、B の更新に向けた検討を進めている。

本研究会では、物質科学諸分野の気鋭の研究者に最新の研究を紹介していただき、その上で、計算物質科学と計算機科学の協働によるさらなる物質科学の発展の青写真を描くことができた。

ポスター賞(渡辺宙志・東大)、若手奨励賞(石村和也・分子研)、ビジュアル賞(矢ヶ崎琢磨・岡山大)を、参加者全員の投票によって決定した。

【プログラム】

12月10日(火)

《物性研スパコン共同利用 特別講演》

13:05 - 13:45 中島 研吾(東京大学)
 「ポストペタスケール・エクサスケールシステムへ向けての東京大学情報基盤センターの取組」

《物性研スパコン共同利用》

13:45 - 14:25 利用者アンケートの紹介・ディスカッション
 《コーヒーブレイク 14:25 - 14:45》

14:45 - 15:10 星 健夫(鳥取大学)
 「数学・計算物質科学・HPC 分野の融合としての超大規模電子状態計算」

15:10 - 15:35 濱田 幾太郎(物質・材料研究機構)
 「固体と表面のためのファン・デル・ワールス密度汎関数」

15:35 - 16:00 山内 邦彦(大阪大学)
 「第一原理計算を用いたマルチフェロイック物質の材料設計」
 《コーヒーブレイク 16:00 - 16:20》

16:20 - 16:45 荒木 武昭(京都大学)
 「多孔質に閉じ込めたネマチック液晶が示す非線形・非平衡挙動」

16:45 - 17:10 村島 隆浩(東北大学)
 「高分子流体の階層連携シミュレーション」

17:10 - 17:35 大槻 東巳(上智大学)
 「3次元トポロジカル絶縁体の半金属・金属転移における状態密度スケーリング」

12月11日(水)

《物性研スパコン共同利用 特別講演》

10:00 - 10:40 廣井 善二(東京大学)
「フラストレーション格子化合物の物理と化学」

《物性研スパコン共同利用》

10:40 - 11:05 富田 裕介(芝浦工業大学)
「誘電体のモデル計算」
《コーヒーブレイク 11:05 - 11:25》

11:25 - 11:50 阪野 墨(東京大学)
「近藤状態にある量子ドット系での非平衡電流の揺らぎ」

11:50 - 12:15 森田 悟史(東京大学)
「多変数変分モンテカルロ法によるスピン液体の研究」
《昼食 12:15 - 13:00》

《CMSI 研究課題発表(第1部会)》

13:00 - 13:05 第1部会(分子課題)レビュー[天能精一郎]

13:05 - 13:25 大西 裕也(神戸大学)
「超並列 MP2-F12 法による大規模分子の相互作用エネルギーの高精度計算」

13:25 - 13:45 大塚 勇起(神戸大学)
「モデル空間量子モンテカルロ法の並列実装といくつかの応用例」

13:45 - 14:05 笹井 理生(名古屋大学)
「アクトミオシンモーターの動作機構」

14:05 - 14:25 河野 裕彦(東北大学)
「自在回転部位を有するナノ複合分子の機能評価から制御へ」
《コーヒーブレイク 14:25 - 14:40》

14:40 - 14:45 第1部会(物性課題)レビュー[今田正俊]

14:45 - 15:05 遠山 貴己(京都大学)
「二次元 DMRG の開発と強相関係への応用」

15:05 - 15:25 原田 健自(京都大学)
「SU(N)ハイゼンベルクモデルで脱閉じ込め転移はあるのか？」

15:25 - 15:45 三澤 貴宏(東京大学)
「多変数変分モンテカルロ法を用いたハバード模型における高温超伝導機構の解析」

15:45 - 16:05 山地 洋平(東京大学)
「新奇量子相の実現・観測へむけた電子状態に基づく理論的予測
—スピン軌道相互作用と電子相関が生み出すトポロジカル量子相」

《ポスターセッション》

16:05 - 18:20 場所:物性研究所 6階ラウンジ
《懇親会》

18:30 - 20:00 場所:柏キャンパス カフェテリア

12月12日(木)

《CMSI 研究課題発表(第2部会)》

- 9:00 - 9:05 第2部会レビュー[押山淳]
- 9:05 - 9:25 岩田 潤一(東京大学)
「実空間密度汎関数法コード RSDFT の機能拡張」
- 9:25 - 9:45 小野 倫也(大阪大学)
「RSPACE を用いた電子構造・輸送特性シミュレーション」
- 9:45 - 10:05 宮崎 剛(物質・材料研究機構)
「オーダーN 法 DFT プログラムの開発と半導体ナノ構造物質に対する応用」
- 10:05 - 10:25 土田 英二(産業技術総合研究所)
「ベリー位相を用いた電気伝導率の計算」
《コーヒープレイク 10:25 - 10:40》
- 10:40 - 11:00 吉本 芳英(鳥取大学)
「第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の開発と一般公開」
- 11:00 - 11:20 尾形 修司(名古屋工業大学)
「ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション」
- 11:20 - 11:40 信定 克幸(分子科学研究所)
「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクス」
- 11:40 - 12:00 斎藤 峯雄(金沢大学)
「スラブ系の電子状態計算の開発と応用」
《昼食 12:00 - 13:20》
- 《招待講演》
- 13:20 - 13:50 福島 孝治(東京大学)
「STM 画像データから物理モデルの構成方法 -データ駆動科学の例として-」
- 13:50 - 14:20 加藤 雅治(東京工業大学)
「固体中の第2相の形状:エネルギー論を中心にした考察」

《CMSI 研究課題発表(第3部会)》

- 14:20 - 14:25 第3部会レビュー[岡崎進]
- 14:25 - 14:45 小関 史朗(大阪府立大学)
「有機 EL 発光材料分子の理論的設計とシミュレーション」
- 14:45 - 15:05 小林 正人(早稲田大学)
「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」
《コーヒープレイク 15:05 - 15:20》
- 15:20 - 15:40 岡本 祐幸(名古屋大学)
「拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明」
- 15:40 - 16:00 松林 伸幸(京都大学)
「ポリモルフから生起する分子集団機能」
- 16:00 - 16:20 北浦 和夫(神戸大学)
「フラグメント分子軌道法の開発と創薬への応用」
- 16:20 - 16:40 岡崎 進(名古屋大学)
「小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」
- 16:40 - 17:00 吉井 範行(名古屋大学)

「ポリオウイルスカプシドとレセプター CD155 との相互作用に関する大規模全原子分子動力学計算」
17:00 - 17:20 安藤 嘉倫(名古屋大学)
「汎用分子動力学計算ソフト MODYLAS 開発の最近の進展」
《コーヒーブレイク 17:20 - 17:30》

ー 討論会「計算物質科学のためのコンピュータアーキテクチャーとは？」ー
モデレーター:藤堂眞治

《招待講演》

17:30 - 18:00 小柳 義夫(神戸大学)
「将来の HPCI 計画推進」
18:00 - 18:15 SC13 参加報告[笠松秀輔]
18:15 - 18:30 FS 進捗, ロードマップ[藤堂眞治]
18:30 - 18:50 全体討論

12月13日(金)

《CMSI 研究課題発表(第4部会)》

9:00 - 9:05 第4部会レビュー[杉野修・山下晃一]
9:05 - 9:25 吉田 紀生(九州大学)
「3D-RISM による KcsA チャンネル中のカチオン結合モード解析」
9:25 - 9:45 山下 晃一(東京大学)
「太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算」
9:45 - 10:05 三浦 伸一(金沢大学)
「第一原理経路積分インスタントン法の開発とプロトン移動過程への応用」
10:05 - 10:25 矢ヶ崎 琢磨(岡山大学)
「メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算」
《コーヒーブレイク 10:25 - 10:40》
10:40 - 11:00 Nicephore Bonnet(東京大学)
“Enhancement of the Catalytic Activity of Nanoparticles by the Thermal Motion of a Polar Solvent”
11:00 - 11:20 木崎 栄年(大阪大学)
「ステップ構造を持つ Pt(322)表面における水バイレイヤー中の OH 吸着及び水の解離
～第一原理分子動力学シミュレーション～」
11:20 - 11:40 袖山 慶太郎(京都大学)
「DFT-MD 自由エネルギー計算によるリチウムイオン電池電解液・添加剤の還元反応解析」
11:40 - 12:00 浅井 美博(産業技術総合研究所)
「非平衡量子伝導理論の展開:ナノエレクトロニクスから熱マネジメント材料へ」
《昼食 12:00 - 13:20》

《CMSI 研究課題発表(第5部会)》

13:20 - 13:25 第5部会レビュー[香山正憲]
13:25 - 13:45 澤田 英明(新日鐵住金)
「鋼中析出物界面の第一原理計算」
13:45 - 14:05 譚田 真人(大阪大学)

- 「電子論に基づく Fe-Si 合金のマクロな機械的特性の予測」
- 14:05 - 14:25 寺田 弥生(東北大学)
- 「多分散レナード・ジョーンズ系における相図の粒度分布と温度依存性」
- 14:25 - 14:45 澁田 靖(東京大学)
- 「合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算
—大規模分子動力学法による高温物性値の導出と固液界面挙動解析—」
- 14:45 - 15:05 西松 毅(東北大学)
- 「強誘電体の電気熱量効果の分子動力学計算」
- 15:05 - 15:25 大野 かおる(横浜国立大学)
- 「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス」
《コーヒーブレイク 15:25 - 15:40》
- 《CMSI 支援課題》
- 15:40 - 16:00 中野 博生(兵庫県立大学)
- 「フラストレート磁性体の計算科学的研究
—スピン空間に異方性のない系でのスピントロップ現象—」
- 16:00 - 16:20 芝 隼人(東京大学)
- 「界面活性剤系のマルチスケール高次構造形成の大規模粗視化分子動力学計算」
- 16:20 - 16:40 大久保 毅(東京大学)
- 「フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化」
- 16:40 - 17:00 石村 和也(分子科学研究所)
- 「ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索
—大規模並列計算プログラムの効率的な開発—」
- 17:00 - 17:20 土居 抄太郎(東京大学)
- 「Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算」
- 17:20 - 17:40 茂木 昌都(日産アーク)
- 「HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明」

以上

配布先 関係各位	報告書24		作成日 2014年1月8日
	CMSI/CMRI Workshop for Ferroelectrics and Related Materials		No. CMSI-13-44
			作成
			CMRI 事務局 門脇

【開催要項】

日 時:2014年1月6日(月)12:00-、1月7日(火) 13:00-

会 場:東北大学金属材料研究所 2号館 7階セミナー室

参加費:無料

参加者:8名

主 催:計算材料科学研究拠点 (CMRI)

【概要】

feram <http://loto.sourceforge.net/feram/> は、平成25年度 HPCI 戦略プログラム分野2の第5部会『マルチスケール材料科学』の特別支援課題の1つである『超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化』の主要なアプリケーションである。(1)ユーザの意見交換、(2)研究担当者の進捗報告や打ち合わせ、(3)実験家から最新の研究報告や意見をいただく、ために今回表記の小さなワークショップを開催した。

海外からの参加者を加わり活発な議論ができ、また、親睦を深めることができた。翌日7日には feram の利用講習会も行った。これには CMSI の支援により購入した材料アプリアイアル用サーバーが用いられた。

【プログラム】

<1月6日>

12:00-12:10 Takeshi Nishimatsu

Opening remarks and some announcements

12:10-12:40 Masato Matsuura (Cross Tokai)

Structural and dynamic properties in lead-free ferroelectric (Bi_{1/2}Na_{1/2})TiO₃

12:40-13:10 Takanori Kiguchi (IMR)

Atomic resolution imaging for Pb-based ferroelectric thin films using aberration-corrected electron microscopy

13:10-13:40 Hiroki Moriwake (JFCC)

A first-principles study of the ferroelectric phase of AgNbO₃

---lunch break---

14:40-15:10 Scott Beckman (Iowa State University)

First-principles study of K_{0.5}Na_{0.5}NbO₃ using special quasirandom structures

15:10-15:40 Takeshi Nishimatsu (IMR)

Molecular-dynamics simulations of electrocaloric effects in relaxors

15:40-16:10 Jordan Barr (Iowa State University)

Molecular-dynamics simulations of the caloric response of perovskite compounds due to applied external fields

---coffee break---

16:30-17:00 Kenji Tsuda (IMRAM)

Two-dimensional mapping of polarizations of rhombohedral nanostructures in the

tetragonal phase of BaTiO₃ by the combined use of the scanning transmission electron microscopy and convergent-beam electron diffraction methods

17:00- Speaker TBA

Closing remarks

18:00- Small dinner

<1月7日>

13:00- FERAM Tutorial

以上

配布先 関係各位	報告書25		作成日 2014年1月14日
	CMRI International Symposium 2014		No. CMSI-13-45
			作成
			CMRI 事務局 門脇

【開催要項】

日時:2014年1月8日(水)13:00~1月10日(金)14:00

会場:東北大学金属材料研究所 2号館講堂

参加費:無料

参加者:57名

主催:計算材料科学研究拠点(CMRI)

【概要】

CMSI に属する他の4つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、物性科学、分子科学の代表者に招待講演を依頼し、第1部会~第4部会までの現状について理解を深めた。

重点課題(2件)と特別支援課題(6件)に関して成果の発表を行うと共に、関連する外国人研究者6人や国内の研究者6人を招聘し、意見やアドバイスを得た。招待講演や、物性科学、分子科学の代表者の招待講演を介して、それぞれの研究内容について理解を深め、今後の計算科学技術体制の構築の推進に資する機会となった。

【プログラム】

<January 8, Wed.>

Chairman: T. Mohri

13 : 00 Tadashi Furuwara

Institute for Materials Research, Tohoku University

Yoshio Kawaguchi

MEXT (Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology)

13 : 30 Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Analysis of Materials Interfaces and Defects

Masanori Kohyama

AIST Kansai

14 : 00 First-principles study of interface between iron and precipitate

Hideaki Sawada

Nippon Steel & Sumitomo Metal Corporation

[cancelled]Invited Deformation in magnesium from first-principles

Dallas R. Trinkle

Materials Science and Engineering, University of Illinois

14 : 30 Invited Theory and material design for antiferromagnetic topological insulator

Xiao Hu

International Center for Materials Nanoarchitectonics, NIMS

15 : 15 Coffee Break

Chairman: M. Kohyama

16 : 00 All Carbon Mackay-Like crystals with 8-fold symmetry

Yunye Liang

New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University

16 : 30 Report for short dispatch of overseas - UMKC and UCSD-

Shingo Tanaka

AIST Kansai

18 : 00 party

<January 9, Thu.>

Chairman: T. Matsumiya

10 : 00 Special Lecture Metallic Biomaterials with High Mechanical Biocompatibility

Mitsuo Niinomi

Institute for Materials Research, Tohoku University

10 : 45 Invited Electronic properties of silicene-based nanostructures

Jun Ni

Department of Physics and State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics, Tsinghua

University, Beijing

11 : 30 Study on grain topology via Potts model Monte Carlo simulation

Hao Wang

School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology, Beijing

12 : 00 Lunch

Chairman: M. Ohno

13 : 00 Invited Simulation of super-Cu atom manipulation on oxidized Cu(110) surface by non-contact AFM

Ivan Stich

Slovak Academy of Sciences

13 : 45 Invited A non-linear damage accumulation and fatigue model for predicting strain life at variable amplitude loadings based on constant amplitude fatigue data

Scott Beckman

Iowa State University

14 : 30 Fast Molecular-Dynamics Simulations of Dipolar Magnetic Nanoparticles

Takeshi Nishimatsu

Institute for Materials Research, Tohoku University

15 : 00 Coffee Break

Chairman: T. Nishimatsu

15 : 30 Large-scale atomistic simulations of solid-liquid interfaces in Li-ion battery, silica, ice, etc.

Shuji Ogata

Nagoya Institute of Technology

16 : 00 Invited Topological Defects and Phase Transitions

Naoki Kawashima

ISSP, University of Tokyo

16 : 45 Recent activities of CMSI and CMRI

Tetsuo Mohri

Institute for Materials Research, Tohoku University

<January 10, Fri.>

Chairman: K. Ohno

10 : 00 Quantitative phase-field study of growth orientation of directionally solidified dendrites in alloys

Munekazu Ohno

Faculty of Engineering, Hokkaido University

10 : 30 Phase-field simulations of dendritic competitive growth during directional solidification of binary alloy

Tomohiro Takaki

Kyoto Institute of Technology

[cancelled]Invited Materials design based on ab initio thermodynamics: Prospects and challenges

Joerg Neugebauer

Max-Planck-Institut für Eisenforschung

11 : 00 Invited All-Atom Analysis of Protein Solvation through Combination of Molecular Simulation and Solution Theory

Nobuyuki Matubayasi

Institute for Chemical Research, Kyoto University

11 : 45 Lunch

Chairman: S. Ogata

13 : 00 Implementation of efficient Fourier transformation for obtaining one- dimensional radial potential and potential fitting procedure using Chebyshev polynomials

Shota Ono

Yokohama National University

13 : 30 The algorithm for calculating Van der Waals dispersion coefficients within the all-electron mixed-basis approach

Vladimir Belosludov

Nicolaev Institute of Inorganic Chemistry

以上

配布先 関係各位	報告書26		作成日 2014年1月15日
	第2回 CCMS(柏)ハンズオン: バージョン管理システムチュートリアル		No. CMSI-13-46
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程: 平成 26 年 1 月 14 日 (火) 13:00～17:00
 会 場: 東京大学物性研究所 A612 号室
 受講人数: 12 名
 講 師: 五十嵐 亮 (東大物性研)、松尾春彦 (RIST)、安田真也 (東大院工)
 受講料 : 無料

<本講習会の対象者>

- * git や subversion などのバージョン管理システムに興味をお持ちの方
- * バージョン管理システムに触ったことはあるが、使い方がよく分からない方
- * オープンソースソフトウェアの開発・公開に興味のある方

【概要】

バージョン管理システム(バージョンかんりシステム)とは、コンピュータ上で作成、編集されるファイルの変更履歴を管理するためのシステム。特にソフトウェア開発においてソースコードの管理に用いられることが多い。バージョン管理システムの最も基本的な機能は、ファイルの作成日時、変更日時、変更点などの履歴を保管することである。これにより、何度も変更を加えたファイルであっても、過去の状態や変更内容を確認したり、変更前の状態を復元することが容易になる。更に、多くのバージョン管理システムでは、複数の人間がファイルの編集に関わる状況を想定している。商業的なソフトウェア開発やオープンソースプロジェクトなどでは、複数の人間が複数のファイルを各々編集するため、それぞれのファイルの最新の状態が分からなくなったり、同一ファイルに対する変更が競合するなどの問題が生じやすいが、バージョン管理システムは、このような問題を解決する仕組みを提供する。(バージョン管理システム より)

本講習会では、バージョン管理システム初心者を対象に、その特徴と概要に関する講義の後、ノート PC、ワークステーションを用いて実習を行った。実習は主に git を用いた。また、github や sourceforge を用いたオープンソースソフトウェアの開発・公開の進め方についても紹介した。

以上

配布先 関係各位	報告書27		作成日 2014年2月27日	
	第3回 CCMS(柏)ハンズオン: xTAPP 講習会		No. CMSI-13-54	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日 程: 平成 26 年 2 月 26 日(水) 13:00~16:00
 会 場: 東京大学物性研究所 A612 号室
 受講人数: 10 名
 講 師: 吉本芳英(鳥取大学)、吉澤香奈子(東大物性研)
 受講料 : 無料

【概要】

xTAPP(eXtended Tokyo Ab-initio Program Package)は、密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理計算コードです。xTAPP に興味がある方で、初心者を対象とした xTAPP 講習会を行った。xTAPP の概要と基本的な使い方についての講義と実習、また GUI による入出力の補助ツール(TAPIOCA)を用いた計算実習を行った。

【プログラム】

演習環境設定
 xTAPP の概要の解説
 チュートリアル
 可視化ツール TAPIOCA の実習
 計算実習

以上

配布先 関係各位	報告書28		作成日 2014年3月12日	
	第4回 CCMS(柏)ハンズオン: rokko チュートリアル		No. CMSI-13-59	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日 程: 平成 26 年 3 月 11 日(火) 13:00~18:00

会 場: 東京大学物性研究所 A612 号室

受講人数: 5 名

講 師: 藤堂眞治(東大理、東大物性研)、五十嵐 亮(東大物性研)、本山裕一(東大工)

受講料 : 無料

【開催主旨】

Rokko (<https://github.com/t-sakashita/rokko>) は、EigenExa, Elemental, ScaLAPACK などの並列ライブラリを利用する大規模密行列の対角化、および SLEPc などのライブラリを利用する大規模疎行列の対角化を統一的に利用するための C++, C, Fortran ラッパーライブラリです。本講習会では、Rokko インターフェースの概要の講習とともに、Rokko 開発者による、ユーザープログラムの Rokko 利用支援を行った。

【プログラム】

- 演習環境設定
- Rokko の概要
- 計算実習
- ユーザープログラムへの Rokko の組み込み実習

以上

配布先 関係各位	報告書29		作成日 2014年3月25日	
	第3部会:分子集合系における先端分析と大規模計算 ～高度水利用に資するスマート分離技術の基盤構築を目指して～		No. CMSI-13-61	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時 2014年3月20日(木) 13:00～17:40 及び 懇親会
 場所 ウィズビジネスセンター(東京駅から徒歩5分)
 〒103-0027 東京都中央区日本橋3-3-3 八重洲山川ビル5F
 主催 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)第3部会
 共催 計算分子科学研究拠点(TCCI)
 世話人 森田 明弘(東北大院理)、松林 伸幸(京大化研)

【概要】

物質の分離技術は、化学・材料の産業界全体に共通の基礎的な重要性をもち、その高度化と省エネルギー化は国家的な課題です。たとえば我が国の高度な水処理技術にも関わる問題で、水資源の有効活用は国家として戦略的な課題でもあります。

本研究会では、分離や水処理技術と計算化学との融合を目指す展望について議論を深めました。

【プログラム】

<セッション1> 座長 松林 伸幸(京大化研)

13:00-13:15 趣旨説明 松林 伸幸(京大化研)

13:15-13:45 「京コンピュータを用いた大規模分子動力学シミュレーション」
 岡崎 進(名大院工/分子研)

13:45-14:15 「逆浸透膜の進歩と海水淡水化への適用」
 佐々木 崇夫(東レ地球環境研)

14:15-14:45 溶液界面の計算分子科学と分光学
 森田 明弘(東北大院理)

14:45-15:15 マイクロ・ナノバブルの基礎と応用
 高橋 正好(産総研環境管理)

15:15-15:30 休憩

<セッション2> 座長 森田 明弘(東北大院理)

15:30-16:00 電気化学界面での計算化学
 山本 雅博(甲南大理工)

16:00-16:30 「分子シミュレーションによる機能膜設計の展望」
 茂本 勇(東レ先端材料研)

16:30-17:00 「生体膜モデルにおける電荷移動-電気化学的手法に基づく解釈」
 白井 理(京大院農)

17:00-17:30 「水溶液中ナノ構造における物質分配の計算化学解析」
 松林 伸幸(京大化研)

17:30-17:40 まとめ 森田 明弘(東北大院理)

以上

配布先 関係各位	報告書30		作成日 2013年8月30日	
	The 20th Anniversary of TOMBO and Russian Megagrant Opening International Conference - With the Cerebration of Chongqing University Honorary Professorship Given to Prof. Kawazoe -		No. CMSI-13-20	
				作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

Date: 21st and 22nd August, 2013

Venue: Newly Opened Katahira Seminar Room Espace,
Tohoku University and the Westin Hotel Sendai

【SCIENTIFIC PROGRAM】

12:30 - 13:20 Registration

Session 1: Chair: Y. Kawazoe

13:20 - 13:30 Opening Y. Kawazoe, Tohoku University

13:30 - 14:00 H. Mizuseki, Korea Institute of Science and Technology,
"Computational Materials Science by using the New Supercomputer in IMR
- 27 Years with Prof. Kawazoe" (Keynote)

14:00 - 14:30 R. Belosludov, O. S. Subbotin, H. Mizuseki, V. R. Belosludov,
and Y. Kawazoe, Tohoku University, "Description of properties of gas
hydrates using interaction potentials evaluated from TOMBO program"
(Invited)

14:30 - 15:00 S. Velappa, Tohoku University, "Some studies on pristine and
functionalized graphene using first principles calculations"

15:00 - 15:30 Coffee Break

Session 2: Chair: G. Chen

15:30 - 16:00 J. T. Wang, C. F. Chen, and Y. Kawazoe, Chinese Academy of Sciences,
"Kinetic Origin of Phase Transformation Pathways in Carbon, Silicon and Germanium" (Invited)

16:00 - 16:30 Z. Zeng, H. Mei, Z. Qiu, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe,
Chongqing University, "Numerical simulation of ACRT with a Fourier
Legendre spectral element method" (Invited)

16:30 - 17:00 S. S. Han, Korea Institute of Science and Technology,
"Improved Design of Metal Organic Frameworks for Efficient Gas Adsorption by Multi-scale
Simulations" (Invited)

18:00-20:30 BANQUET @Westin Hotel Sendai
with Greeting from the President of Tohoku University, Susumu Satomi

22nd August, 2013 (Thursday)

Session 3: Chair: Y. Kawazoe

9:30 - 9:45 Opening: M. Kohyama, and T. Mohri

9:45 - 10:45 TOMBO tutorial: K. Ohno, R. Sahara, and Y. Kawazoe

10:45 - 11:15 Y. Noguchi, Tokyo University,

- 11:15 - 11:30 "Optical properties of $M^+@C60$ (M= H, Li, Na, and K): All-electron GW+Bethe-Salpeter method"
S. Ono, and K. Ohno, Yokohama National University,
"Efficient electronic structure calculation in the mixed basis approach"
- 11:30 - 12:00 K. Ohno, R. Kuwahara, S. Ono, and M. Zhang, Yokohama
National University, "Recent implementations of spectroscopy calculations
in the all-electron mixed basis code, TOMBO" (Invited)
- 12:00 - 13:00 Lunch

Session 4: Chair: Z. Nurobosyn

- 13:00 - 13:30 M. S. Bahrany, RIKEN, Emergent phenomena in giant bulk Rashba semiconductors
- 13:30 - 14:00 V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov, H. Mizuseki,
Y. Kawazoe, Siberian Branch-Russian Academy of Sciences,
"Van der Waals interaction within density-functional theory in the all-electron mixed-basis
TOMBO approach" (Invited)
- 14:00 - 14:30 Y. Y. Liang and Y. Kawazoe, Tohoku University, "Introduction of Wannier function into TOMBO"
- 14:30 - 15:00 R. Sahara, H. Mizuseki, M. H. F. Sluiter, K. Ohno, and Y. Kawazoe,
National Institute for Materials Science,
"Effect of a nickel cluster on the dissociation dynamics of a hydrogen molecule" (Invited)
- 15:00 - 15:30 Coffee Break

Session 5: Chair: K. Ohno

- 15:30 - 16:00 X. Hu, National Institute for Materials Science,
"Novel Topological State in Perovskite Materials"(Invited)
- 16:00 - 16:30 Y. Chen, A. Saengdeejing and T. Mohri, Tohoku University,
"Mechanomagneto effects in Fe-Si system" (Invited)
- 16:30 - 17:00 Y. Kawazoe, Tohoku University,
"Present and Future of Our Collaboration"

以上

配布先 関係各位	報告書31	作成日 2013年11月12日	
	The 8th ACCMS-VO General Meeting Scientific Program	No. CMSI-13-33	
			作成
		CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

Date: 7th – 9th November, 2013

Venue: Sakura Hall at Tohoku University and Hotel Matsushima Taikanso

【PROGRAM】

7th November, 2013 (Thursday)

8:30 Registration Desk Open

Session 1 with Opening (9:00 - 10:30)

Chair: Y. Kawazoe

Opening Remarks: Y. Kawazoe

(Invited) Hongming Weng, Xi Dai, and Zhong Fang, "Transition-Metal Pentatelluride ZrTe₅ and HfTe₅: a Paradigm for Large-gap Quantum Spin Hall Insulators"

(Invited) Yong Yang and Yoshiyuki Kawazoe, "Characterization of zero-point vibration in one-component crystals"

(Oral) Mohammad Saeed Bahramy, "Zeeman-- like spin splitting controlled by an electric field"

10:30 - 11:00 Coffee Break

Session 2 (11:00 - 12:10) Gas Storage Materials

Chair: T. Ikeshoji

(Invited) K. Iyakutti, R. Lavanya, V. Vasu, V.J. Surya and Y. Kawazoe, "Hydrogen Storage in Ni+MgH₂ and Ti+MgH₂ clusters - A First Principles Study"

(Oral) Yu. Yu. Bozhko, O.S. Subbotin, R.V. Belosludov, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, V.R. Belosludov and V.M. Fomin, "Modeling Structure and structural Transitions of Neon Hydrate"

(Oral) Ravil Zhdanov, Oleg Subbotin, Vladimir Belosludov, Rodion Belosludov and Yoshiyuki Kawazoe, "Theoretical Modeling of the Phase Diagram of Hydrogen Clathrate Hydrate in Wide Pressure Range"

12:10 - 13:10 Lunch (Box Lunch) and Group Photo

Session 3 (13:10 - 15:40) Keynote Talk 1 and Nanostructures

Chair: G. P. Das

(Keynote 1) K. Hirao, "The K Computer and Advanced Institute for Computational Science"

(Oral) Hannes Raebiger, "Transition Metal Atoms in Insulators: Point Defects and Embedded Nanostructures"

(Oral) Hideki Masuda, Hidehiro Yasuda and Jun Onoe, "Structural Analysis of Electron-Beam-Irradiated C₆₀ Single Crystal Film Using Electron Diffraction"

(Oral) Tetsuichiro Hayakawa, Kazuhiro Egashira, Masashi Arakawa, Tomonori Ito, Shun Sarugaku, Kota Ando, and Akira Terasaki, "X-Ray Spectroscopy of Size-Selected Free Metal-Oxide Clusters for Oxidation-State Analysis"

(Invited) G. Chen and Y. Kawazoe, "Role of Transition Metal in Catalyzing H₂ Splitting"

15:40 - 16:10 Coffee Break

Session 4 (16:10 - 18:50) Bulk Alloy Systems and Energy Materials

Chair: G. Chen

- (Invited) Tribhuwan Pandey, and Abhishek K. Singh,
"Origin of enhanced thermoelectric properties of doped CrSi₂"
- (Oral) Ryoji Sahara, Satoshi Emura, Seiichiro Ii, Shigenori Ueda, and Koichi Tsuchiya,
"Simulation of Electronic Structures and Stability of Body-centered Cubic Ti-Mo Alloys
by Special Quasirandom Structures"
- (Oral) Tetsuo Mohri, "First-principles Calculation for Stability Analysis of Fe-Ni System"
- (Oral) Abhijit Chatterjee, "Material Genomics a Preview of Future for Material"
- (Oral) Hisato Yasumatsu and Nobuyuki Fukui, "Catalytic Function Induced by Charge Accumulated
at Sub-Nano Interface Between Platinum Cluster Disk and Silicon Substrate"
- (Invited) Jeoung Eui Hong, Kwang Sun Ryu, and Sang Uck Lee, "Electrochemical Characteristics
of Halogen-doping Li₄Ti₅O₁₂ as Anode for Lithium-ion Batteries"
- (Oral) Nurbosyn U. Zhanpeisov, "Theoretical DFT Study on Energy Materials and Some Insights
on the Origin of Raman Band Shifts"

8th November, 2013 (Friday)

Session 5 (9:00 - 10:30) Keynote Talk 2 and TOMBO Development

Chair: R. Belosludov

- (Keynote 2) K. Ohno, "Development of the all-electron mixed basis program, TOMBO"
- (Invited) V. R. Belosludov, O. S. Subbotin, R. V. Belosludov, H. Mizuseki and Y. Kawazoe,
"Formalism for Calculation Van der Waals Dispersion Coefficients within the All-electron
Mixed-basis Approach"

10:30 - 11:00 Coffee Break

Session 6 (11:00 - 12:00) : TOMBO Tutorial

Chair: Y. Kawazoe

12:00 - 13:00 Lunch (Box Lunch) and Poster Awarding Ceremony

Session 7 (13:00 - 15:00) Surface and Interface

Chair: J. L. Kuo

- (Invited) Chia-Ching Wang, Jyun-Yi Wu, and Jyh-Chiang Jiang, "Ammonia Oxidation
on RuO₂(110) Surfaces"
- (Invited) T. M. Inerbaev, A. T. Akilbekov and A. K. Dauletbekova, "Water Interaction
with Fluorine-Doped Co₃O₄ (100) and (111) Surfaces"
- (Oral) K.-H. Chew, K.-G. Lim, L.-H. Ong and M. Iwata, "Effect of Electrostatic Coupling and Interface
Intermixing on Internal Electric Field and Polarization in Ferroelectric Superlattices"
- (Oral) Sirichok Junthawan and Worawat Meevasana, "First-principles Study of Potassium Intercalation
in Hexagonal Molybdenum Disulfide (2H-MoS₂)"
- (Oral) Tamio Ikeshoji, "Ion Transfer in Solid and Polymer Electrolyte"

Coffee Break (15:00 - 15:30)

Session 8 (15:30 - 17:00) Experimental and Basic Theories

Chair: K. Ohno

- (Invited) B. N. Dev, "Evolution of electronic structure and transport properties of ultra-thin films near the 2-D
limit"
- (Oral) Sergey Seriy, "Multi-fractal Basis for Wave-functions Approximation in ab-initio Calculations"
- (Oral) Yoshihito Ogasawara, Shin'ichi Oishi, "On the Methods of Recognizing Natural Phenomena"

(Oral) Yayoi Terada, "Pressure Dependence of Phase Diagram on Polydisperse Lennard-Jones System"
17:20 - 18:20 Move to Matsushima by Bus

9th November, 2013 (Saturday)

Session 9 (9:00 - 10:20) Carbon-related Materials

Chair: K. Iyakutti

(Invited) Jer-Lai Kuo, "2D Materials: Graphene, BN, TMD and Beyond"

(Invited) G.P. Das, C. Majumder, A.H.M. Abdul Wasey, and S. Chakrabarty,

(Oral) Tamio Ikeshoji, "Ion Transfer in Solid and Polymer Electrolyte"

Coffee Break (15:00 - 15:30)

Session 8 (15:30 - 17:00) Experimental and Basic Theories

Chair: K. Ohno

(Invited) B. N. Dev, "Evolution of electronic structure and transport properties of ultra-thin films near the 2-D limit"

(Oral) Sergey Seriy, "Multi-fractal Basis for Wave-functions Approximation in ab-initio Calculations"

(Oral) Yoshihito Ogasawara, Shin'ichi Oishi, "On the Methods of Recognizing Natural Phenomena"

(Oral) Yayoi Terada, "Pressure Dependence of Phase Diagram on Polydisperse Lennard-Jones System"

17:20 - 18:20 Move to Matsushima by Bus

9th November, 2013 (Saturday)

Breakfast (7:00 - 9:00) in Hotel Matsushima Taikanso

Session 9 (9:00 - 10:20) Carbon-related Materials

Chair: K. Iyakutti

(Invited) Jer-Lai Kuo, "2D Materials: Graphene, BN, TMD and Beyond"

(Invited) G.P. Das, C. Majumder, A.H.M. Abdul Wasey, and S. Chakrabarty,

"How to make inert h-BN monolayer catalytically active by providing transition metal support?"

(Oral) Y. Y. Liang, Makoto Tagami, Hisashi Naito, Yoshiyuki Kawazoe, and Motoko Kotani,

"All Carbon Mackay-like crystals with 8-fold symmetry"

10:20 - 10:50 Coffee Break

Session 10 (10:50 - 12:00) : Chemical Reactions

Chair: N. U. Zhanpeisov

(Invited) Hsueh-Chien Li, Jer-Lai Kuo, and Ming-Kang Tsai, "CO₂ Binding by Nucleophilic Attack: from Methodology Comparison to the Reaction Dynamics"

(Oral) Masahiko Ichihashi and Shinichi Hirabayashi, "Reactions of NO Molecules on Copper and Copper Oxide Cluster Ions"

(Oral) Momoji Kubo, "Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations for Clarification of Chemical Mechanical Polishing Mechanism"

Closing Remarks (12:00 - 12:30) Y. Kawazoe

12:30 - 13:30 Lunch (Restaurant Shiosai)

14:00 - 16:30 Boat Trip in the Matsushima Bay + Godaido Tour

Move Back to Sendai by Bus (16:30 - 17:30)

以上

配布先 関係各位	報告書32		作成日 2013年11月12日	
	TCCI 第3回実験化学との交流シンポジウム		No. CMSI-13-31	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時 2013年11月5日(火)13:30~18:05 及び 懇親会
2013年11月6日(水) 9:00~17:15

場所 京都大学福井謙一記念研究センター
〒606-8103 京都市左京区高野西開町 34-4

参加費 無料(懇親会参加費:5000円)

懇親会会場: 京都大学福井謙一記念研究センター
(主催)分子科学研究所 計算分子科学研究拠点 (共催)京都大学 福井謙一記念研究センター

【プログラム】

第1日目:11月5日(火) 13:30~18:05

座長 山下 晃一(東大院工)

セッション1:ご挨拶、拠点報告、ダイナミクス

- 13:30-13:40 開会の辞、拠点報告 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)
- 13:40-14:05 TCCI 報告1
「多電子ダイナミクスから反応制御へー理論化学の視点からー」 河野 裕彦(東北大院理)
- 14:05-14:55 招待講演1
「超高速光誘起分子過程 Ultrafastphotoinduced molecular processes」
山内 薫(東大院理)
- 14:55-15:45 招待講演2
「イオン化で誘起される水の運動を観るー水和クラスターのピコ秒時間分解赤外分光」
藤井 正明(東工大資源研)
- 15:45-16:00 休憩

座長 江原 正博(分子研)

セッション2:光関係(1)

- 16:00-16:25 TCCI 報告2
「開殻分子系に基づく新規光機能物質の理論設計:非線形光学応答と一重項分裂について」
中野 雅由(阪大院基礎工)
- 16:25-17:15 招待講演3
「有機薄膜太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」 平本 昌宏(分子研)
- 17:15-18:05 招待講演4
「計算化学を利用した分子設計と有機電子材料開発」 若宮 淳志(京大化研)
- 18:05-18:20 休憩・移動
- 18:20-20:00 懇親会(場所:京都大学 福井謙一記念研究センター)

第2日目:11月6日(水) 9:00~17:15

座長 佐藤 啓文(京大院工)

セッション3:動的過程

- 9:00-9:25 TCCI 報告 3
「生体膜周辺の水分子の挙動の分子シミュレーション」 泰岡 顕治(慶大理工)
- 9:25-10:15 招待講演 5
「膜ダイナミクスにおける弱秩序」 高木 昌弘(北陸先端大院マテリアル)
- 10:15-11:05 招待講演 6
「軸分子に沿っての環状分子の動き」 原田 明(阪大院理)
- 11:05-11:15 休憩

座長 岡崎 進(名大院工)

セッション4:エネルギー

- 11:15-11:40 TCCI 報告 4
「水の液液相転移」 松本 正和(岡山大院自然科学)
- 11:40-12:30 招待講演 7
「メタンハイドレート資源開発とシミュレーション技術」 成田 英夫(産総研)
- 12:30-13:40 昼食・休憩

座長 長谷川 淳也(北大触媒センター)

セッション5:光関係(2)

- 13:40-14:05 TCCI 報告 5
「多核金属酵素・触媒の電子状態計算～光合成水分解反応を中心に～」
倉重 佑輝(分子研)
- 14:05-14:55 招待講演 8
「生物による可視光を利用した水分解の仕組み」 沈 建仁(岡山大院自然科学)
- 14:55-15:05 休憩

座長 中野 雅由(阪大院基礎工)

セッション6:物質科学・反応

- 15:05-15:55 招待講演 9
「鉄分子触媒の設計～還元反応を例に～」 永島 英夫(九大先導研)
- 15:55-16:45 招待講演 10
「金属ナノ粒子の構造ダイナミクス」 山内 美穂(九大 I2CNER)
- 16:45-17:10 TCCI 報告 6
「Changes in Molecular and Electronic Structure of Metal Oxide Clusters in Batteries During Charging and Discharging」 Irle, Stephan(名大院理)
- 17:10-17:15 まとめ、閉会の辞 榑 茂好(京大福井センター)

以上

配布先 関係各位	報告書33		作成日 2013年11月22日	
	第7回 CMSI 産官学連続研究会 電気化学系の第一原理シミュレーションからわ かったこと・わかること ～高性能電池開発にむ けて～		No. CMSI-13-37	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日程： 平成 25 年 11 月 21 日(木) 13:00～17:25
 会場： 秋葉原ダイビル (5 階カンファレンスフロア 5A)
 共催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)、産業技術総合研究所
 企画： CMSI 産官学連携小委員会

【開催主旨】

計算科学シミュレーションの大規模化、高度化にともない、従来扱うことが難しかった電池の動作状態でのシミュレーションが可能になってきました。実際、電極/電解質界面での電気化学反応、イオン伝導や溶媒の分解反応など電池内で起こる多くの現象が第一原理シミュレーションを用いて扱われています。燃料電池や蓄電池などの高性能化へ向けて、これらのシミュレーションが開発現場で役立つことが期待されていますが、最先端のシミュレーション研究のシーズと開発現場のニーズに少なからずギャップがあることも事実であります。開発現場での課題設定とそれに合うシミュレーションモデルの構築、大規模な計算リソースの確保の難しさから、電池材料開発において第一原理シミュレーションは広く普及している訳ではありません。

本研究会ではこれらの問題に直面している企業の開発現場の研究者と理論・シミュレーション研究を行っている大学・研究機関の研究者の対話を促し、計算シミュレーションによる電池開発の展望を議論するきっかけとなった。

【プログラム】

- 13:05-13:35 「電池シミュレーション」
池庄司 民夫(東北大学)
- 13:35-14:05 「第一原理計算による電気化学触媒物性の予測：現状と課題」
陣内 亮典(豊田中央研究所)
- 14:05-14:35 「自動車用先端材料開発における分子シミュレーション活用」
河村 芳海(トヨタ自動車)
- 14:35-15:05 「大規模第一原理分子動力学計算に基づくリチウムイオン電池系シミュレーション」
大脇 創(日産自動車)
- 15:05-15:20 コーヒーブレイク
- 15:20-15:50 「in situ XANES とシミュレーションによる Li イオン電池の反応解析」
今井 英人(日産アーク)
- 15:50-16:20 「「京」を用いた LIB 電解液の還元分解から膜形成にいたる過程の反応解析」
館山 佳尚(物質・材料研究機構)
- 16:20-16:50 「リチウムイオン二次電池向け正極材料の第一原理シミュレーション」
浅利 裕介(日立製作所)
- 16:50-17:20 「第一原理計算によるリチウムイオン導電性固体電解質材料の効率的探索」
中山 将伸(名古屋工業大学)
- 17:20-17:25 おわりに

以上

配布先 関係各位	報告書34		作成日 2014年2月3日
	TCCI 第3回産官学連携シンポジウム		No. CMSI-13-50
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時 2014年1月31日(金)13:20~18:25
 場所 名古屋大学 野依記念学術交流館
 〒464-8602 名古屋市千種区不老町
 参加費 無料(懇親会参加費:5000円)
 懇親会会場 名古屋大学 ユニバーサルクラブ
 (主催) 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 (共催) 公益財団法人 計算科学振興財団 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

【開催主旨】

日本が今後も産業立国として世界をリードして行くためには、企業における研究者、技術者と国公立研究機関や大学の研究者が情報を共有し、相互の研究の一層の進展に役立てる必要があります。国公立研究機関や大学の研究者が企業での研究課題から学ぶことも、研究機関での成果を民間企業で活用して頂くことも必要と考えています。また、新しい技術につきましては、それを理解し利用できる人材も必要となります。

産学におけるこのような情報共有を、計算分子科学の分野で行うことを目的に開催しました。今回は「人材」について継続的に考えつつ、「HPCの利用と成果」を中心としたテーマで行いました。

【プログラム】

座長 太田 浩二(京大 触媒・電池元素戦略)

セッション 1: ご挨拶、拠点報告、京の利用課題に採択された企業から

13:20-13:35 開会の辞、拠点報告 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

13:35-13:45 ご挨拶 新宮 哲(高度情報科学技術研究機構 (RIST))

13:45-14:10 招待講演

「京を利用した有用酵素改質の試み

-FMO 法による LipA のエナンチオ選択性の機構解明への取り組みを例に-

阿部 幸浩(東洋紡株式会社)

14:10-14:35 招待講演

「産業用高分子の接着界面現象に関する大規模シミュレーションへの期待」

島津 彰(日東電工株式会社)

14:35-14:55 休憩

座長 佐藤 啓文(京大院工)

セッション 2: アプリと京以外の HPCI の利用について

14:55-15:20 招待講演

「開発アプリを企業の技術者に使ってもらうためには何が必要か？」

西川 武志(計算科学振興財団(FOCUS))

- 15:20-15:45 TCCI 報告
「分子研 TCCI マシン上の公開ソフト-それを使って何ができるか-」
岡崎 進(名大院工/分子研)
- 15:45-16:10 TCCI 報告
「拡張アンサンブル法による分子シミュレーション」
岡本 祐幸(名大院理)
- 16:10-16:35 TCCI 報告
「溶液理論の融合によるソフト分子集合系の自由エネルギー解析」
松林 伸幸(京大化研)
- 16:35-17:00 セッション1も含め、パネル的に全体質疑
- 17:00-17:20 休憩

座長 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

セッション 3: 特別講演とまとめ

- 17:20-17:30 ご挨拶
高田 章(旭硝子株式会社/今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討 WG 委員)
- 17:30-18:10 特別講演
「理工系ポスドクのキャリアパスにおける現状と課題」
橋本 昌隆(株式会社フューチャーラボラトリ)
- 18:10-18:25 本日のまとめ 榊 茂好(京大福井センター)
- 18:25-18:40 休憩・移動
- 18:40-20:10 懇親会(場所:名古屋大学 ユニバーサルクラブ)

以上

配布先 関係各位	報告書35		作成日 2014年2月6日	
	第8回 CMSI 産官学連続研究会 「永久磁石研究の最前線:計算科学的アプローチ の課題と展望」		No. CMSI-13-52	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日程: 平成 26 年 2 月 5 日(水) 13:00~16:30
 会場: 秋葉原ダイビル (5 階カンファレンスフロア 5A)
 共催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)、産業技術総合研究所
 企画: CMSI 産官学連携小委員会

【開催主旨】

低消費電力社会実現の基盤技術として、磁石研究がクローズアップされています。過去30年間、最強磁石の座にあるネオジウム磁石は、大きな磁化を持つ一方で高温での保磁力が弱点で、ハイブリッドカーや電気自動車で使用可能な希少元素フリー高性能磁石の開発が大きな課題になっています。保磁力機構の解明と新磁石材料の提案において計算科学に対する期待は大きく、文部科学省・元素戦略プロジェクト、経済産業省・未来開拓研究プロジェクト等の磁石プロジェクトに計算科学の研究者が参画しています。この問題には元素戦略、マルチスケール、複雑界面、強電子相関など他の研究テーマと共通する課題も多く含まれ、基礎科学の観点からも注目を集めています。本研究会では、ネオジウム磁石の発明者である佐川真人博士を迎え、これらの問題に直面している企業の開発現場の研究者と理論・シミュレーション研究を行っている大学・研究機関の研究者の対話を進め、計算シミュレーションによる高性能磁石研究の展望を議論した。

【プログラム】

- 13:00-13:05 はじめに
- 13:05-14:05 特別講演
佐川 真人(インターメタリックス)
- 14:05-14:25 「永久磁石の電子論 -概観-」
三宅 隆(産業技術総合研究所)
- 14:25-14:50 コーヒーブレイク
- 14:50-15:10 「スピン・軌道磁気モーメントの評価」
石橋 章司(産業技術総合研究所)
- 15:10-15:40 「希土類磁石における結晶場理論と磁気異方性」
佐久間 昭正(東北大学)
- 15:40-16:10 「永久磁石のマイクロマグネティックスシミュレーションの可能性」
古屋 篤史(富士通)
- 16:10-16:25 コメント
高尾 正敏(大阪大学)
広沢 哲(物質・材料研究機構)
- 16:25-16:30 おわりに

以上

配布先 関係各位	報告書36		作成日 2014年3月11日	
	第2回 TUT-CMSI 見える化シンポジウム 「電子を魅せる」		No. CMSI-13-58	
			作成	
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日程：平成26年3月8日(土) 12:30～17:40

場所：UDXシアター (JR秋葉原駅前)

参加費：無料

主催：豊橋技科大(TUT)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

協力：次世代シミュレーション技術者教育推進室(TUT-ADSIM)

文部科学省 HPCI 戦略プログラム (分野2・分野4大野グループ)、元素戦略プロジェクト<拠点形成型>
理化学研究所計算科学研究機構(AICS)、高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム(MARCEED)

【開催主旨】

電子がもたらす物質機能や反応の最先端成果を一般社会や教育の現場にリアルタイムにわかりやすく展開し、その研究の面白さや社会との繋がりを伝えて興味を持ってもらうこと。そして、物質科学研究の振興と社会への貢献、若手人材を創出することを目標とする。今回は、「電子」の軌道や密度、電子に関連した物質の機能や反応に関して、どのように見せて、魅せるのか？現状の課題を整理し、講演者の方々からいただく講演内容を参考に、参加者間で今後の取り組みや課題を共有し、目標実現に向けた具体的活動は何かを議論した。

【プログラム】

<芸術と科学の融合>

13:00～13:10 「電子が活躍するナノの世界へようこそ」

監修：関野秀男(TUT/CMSI)、Sound Creator:宮崎晃豪(TUT)

Double Bass/Vocal: Pearl Alexander(Acoustematics)

映像：入佐正幸(九州工大)・岡崎進(名古屋大/TCCI)、山崎隆浩(NIMS-分野4/MARCEED)

13:10～13:20 主催者あいさつ

・稲垣康善(TUT 副学長)

・常行真司(CMSI 統括責任者(東京大))

13:20～13:30 来賓あいさつ

・大西隆(日本学術会議会長)

・川口悦生(文部科学省)

<課題提起>

13:30～13:45 「シミュレーション技術で魅せる教育」

後藤仁志(TUT-ADSIM)

13:45～14:00 「続 計算物質科学広報の現状と課題」

藤堂真治(東京大-CMSI)

<電子状態計算最前線>

14:00～14:30 「京」で行う充電電池材料開発 ～スマホから電気自動車に向けて～

館山佳尚(物質・材料研究機構)

14:30～14:50 休憩(展示会)

<招待講演>

- 14:50～15:30 「一枚の写真で魅せる科学の世界」
長我部信行（日立 中央研究所 所長）
- 15:30～16:10 「もしも電子の可愛い表情が見えたなら」
秋本祐希（マブチデザイン／東京大）
- 16:10～16:30 休憩（展示会）

<パネルディスカッション>

- 16:30～17:30 「“電子”その正体と機能を魅せる」
パネリスト：長我部信行、秋本祐希、館山佳尚、干場真弓(AICS)、関野秀男
モデレータ：古宇田光(CMSI)
- 17:30～17:40 「サイエンスを感動的に語ろう！」 関野秀男

以上

配布先 関係各位	報告書37		作成日 2013年11月15日	
	第3回 HPCI 戦略プログラム		No. CMSI-13-34	
	分野2×分野5 異分野交流研究会		作成	
	「量子多体系のダイナミクス計算 –原子核から物質科学まで–」		CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時 2013年11月13日(水)13:30~18:05 及び 懇親会
2013年11月14日(木)9:30~17:25

場所 分子科学研究所

参加費 無料(但し、懇親会は4,000円)

世話人 信定 克幸(分子研)、矢花 一浩(筑波大)

【開催主旨】

量子系の構造やダイナミクスに対する大規模計算は、基礎科学・応用科学を問わず、多くの分野で中心的な課題となっています。HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティングインフラ)戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」と分野5「物質と宇宙の起源と構造」では、物質科学分野(分野2)と素・核・宇宙分野(分野5)で物質階層は異なりますが、量子系の計算に類似した方法が用いられ、共通する多くの課題があります。

今回の研究会は、量子多体系の励起・応答・反応といったダイナミクスに対する計算をテーマに取り上げました。サブアトム的な原子核分野からは光応答や衝突現象に対する量子ダイナミクス計算、分子科学・物質科学の分野からは光電子ダイナミクスの計算を中心とした議論を行った。

【プログラム】

第1日目:11月13日(水)13:30~18:05

- 13:30-14:10 ナノ構造体における電子・電磁場ダイナミクスと超並列計算 信定、野田(分子研)
- 14:10-14:50 TDDFT 計算による原子核の集団励起と反応 中務(理研)
- 14:50-15:30 高強度超短パルスレーザー場中の多電子ダイナミクス 石川(東大)
- 15:30-15:50 休憩
- 15:50-16:30 散逸揺動理論に基づく動力学模型を用いた核分裂過程の記述 有友(東工大)
- 16:30-17:10 時間依存多配置波動関数理論の開発と応用 加藤(東大)
- 17:10-17:35 TDHF 計算による多核子移行反応の研究 関澤(筑波)
- 17:35-18:05 量子化学計算の超並列化と分野2におけるプログラム高度化支援 石村(分子研)
- 18:30-20:30 懇親会(場所:東岡崎駅前)会費4,000円

第2日目:11月14日(木)9:30~17:25

- 9:30-10:10 反対称化分子動力学法による原子核衝突の計算 小野(東北大)
- 10:10-10:50 第一原理計算による高強度光励起が誘起する物質ダイナミクス 宮本(産総研)
- 10:50-11:30 TDDFT 計算による原子核反応機構の研究 岩田(東大 CNS)
- 11:30-11:55 Chebyshev 漸化式を用いた実時間発展 TDHF/TDDFT 計算の効率化 赤間、佐藤、南部(上智)
- 11:55-13:30 昼食
- 13:30-14:10 局在電子波束と原子価結合法による動的化学結合理論 安藤(京大)
- 14:10-14:50 TDDFT 計算による低エネルギー重イオン核融合反応 鷲山(理研)

- 14:50–15:30 非断熱結合係数の TDDFT 計算:大規模励起ダイナミクスの量子シミュレーションに向けて
胡(東理大)
- 15:30–15:50 休憩
- 15:50–16:30 量子多体系のダイナミクス計算—原子核から物質科学まで— 森下(電通大)
- 16:30–17:10 電子ダイナミクス計算と巨視的電磁気学 矢花(筑波大)
- 17:10–17:25 全体総括

以上

配布先 関係各位	報告書38		作成日 2013年12月19日	
	生体分子複合システムを計算する 相互作用は何をもたらすのかー		No. CMSI-13-42	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時 2013年12月17日(火)
 場所 名古屋大学 IB 電子情報館 大講義室
 参加費 無料

【開催主旨】

ハイパフォーマンスコンピューティングの進展により、大規模な生体分子シミュレーションが実施可能となった。特に生体分子の相互作用は分子機能に直結するので重要である。本シンポジウムでは生体分子複合システムのシミュレーションを行っている研究者に講演していただき、相互作用が誘起する分子機能発現メカニズムに焦点をあて、ハイパフォーマンスコンピューティングがもたらす生命分子科学研究について展望した。

【プログラム】

10:30 - 10:40 **Opening** 太田元規 名古屋大学大学院情報学研究科
 10:40 - 11:10 太田元規 名古屋大学大学院情報学研究科
 「CARMIL が誘起するアクチンキャッピングタンパク質の動的構造変化」
 11:10 - 11:40 北尾彰朗 東京大学分子細胞生物学研究所
 「巨大生体超分子の構造転移制御メカニズム」
 11:40 - 12:10 白井剛 長浜バイオ大学コンピュータバイオサイエンス学科
 「超分子モデリングパイプラインの構築」
 12:10 - 12:20 鎌田知佐 理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム
 「生命科学者に開かれた SCLS 計算機システム」
 12:20 - 14:00 昼休憩
 14:00 - 14:30 長岡正隆 名古屋大学大学院情報学研究科
 「タンパク質における緩和と反応の統計的アプローチ」
 14:30 - 15:00 野口博司 東京大学物性研究所
 「生体膜の形成する形態の多様性」
 15:00 - 15:30 杉田有治 理化学研究所杉田理論分子科学研究室
 「膜タンパク質の構造予測と分子シミュレーション」
 15:30 - 15:45 休憩
 15:45 - 16:15 河野秀俊 日本原子力研究開発機構分子シミュレーション研究グループ
 「ヒストンバリエーションとヌクレオソーム構造の安定性」
 16:15 - 16:45 高野光則 早稲田大学大学院先進理工学研究科
 「分子機械と天然変性タンパク質に通底する静電アロステリック機構」
 16:45 - 17:15 笹井理生 名古屋大学大学院工学研究科
 「アクチンモーターの動作機構」
 17:15 - 17:25 **Closing** 笹井理生 名古屋大学大学院工学研究科
 17:45 - 交流会

以上

配布先	報告書39	作成日 2014年3月5日	
関係各位	元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>・大型研究施設 (CMSI・SPRING-8・J-PARC・KEK)連携シンポジウム2014～大 型研究施設を利用した物質・材料研究の課題共有と共創～	No. CMSI-13-56	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

- 日 程: 平成26年2月28日(金)、3月1日(土)
- 開催場所: 東京大学柏キャンパス 物性研究所
・6階大講堂(シンポジウム) ・6階ラウンジ(ポスターセッション)
- 参加対象: ・元素戦略に関連した研究を推進している方
・大型研究施設を利用した研究を推進している方
・共催機関関係者と関連コミュニティーメンバー
- 参加人数: 197名

【開催主旨】

元素戦略プロジェクト(研究拠点形成型)は、大型研究施設(CMSI(「京」・HPCI)・SPRING-8・J-PARC・KEK)を利用して、“磁石材料”、“触媒・電池材料”、“電子材料”、“構造材料”の4つの領域の研究を推進しています。本シンポジウムは、それらの研究で得られた成果や取組、課題を報告し、参加者間で情報を共有して見識を広げるとともに、今後の成果を共創する機会の提供を目的としています。特に、本プロジェクトの課題を実施する研究者と、それ以外の研究者が互いの枠を超え、各施設で何ができるのかを把握、理解し、課題解決の方向性を見出すことを期待しています。

本シンポジウムは、我が国の物質・材料科学研究者が広くかわる意見交換の場の構築を目指して実施しました。今後、元素戦略拠点と課題を共有する、大学や研究機関、他プロジェクト等との連携体制に発展していくことを視野に入れていきます。

【プログラム】

- ◆2月28日(金)◆(司会:河村麻美(文科省))
- 10:30-11:30 物性研施設見学(希望者のみ)
- 13:00-13:10 挨拶(文部科学省)
- 趣旨説明: 福山秀敏・東京理科大 総合研究機構長
瀧川仁・物性研所長)

<各材料領域>(座長:中山智弘(JST))

- 13:10-13:40 「電子材料領域の目指すものとこれまでの成果」(細野秀雄・東工大元素戦略拠点長)
- 13:40-14:10 「構造材料元素戦略研究拠点(ESISM) 現状と課題」(田中功・京大構造材料拠点長)
- 14:10-14:40 「永久磁石研究における元素戦略課題と大型研究施設活用研究の現状」(広沢哲・NIMS 磁性材料拠点長)
- 14:40-15:10 「触媒・電池材料領域現状と課題」(田中庸裕・京大触媒・電池拠点長)
- 15:10-15:30コーヒープレーク.....

<各大型研究施設>(座長:長我部信行(日立))

- 15:30-16:00 「元素戦略スマートツールとしてのSPRING-8/SACLA」(高田昌樹・理研播磨 副センター長)
- 16:00-16:30 「J-PARC 現状と課題」(新井正敏・J-PARC センター物質・生命科学ディビジョン長)
- 16:30-17:00 「元素戦略課題へのPFの取り組み～放射光・中性子・ミュオンの相補利用～」
(村上洋一・KEK 構造物性研究センター長)
- 17:00-17:30 「CMSI(「京」、HPCI) 現状と課題」(常行真司・計算物質科学イニシアティブ総括責任者)

<パネルディスカッション> (モデレーター:常行真司(CMSI))

17:30-18:30 「元素戦略研究における材料拠点と大型研究施設利用のあり方」

<懇親会>

18:30-20:00 懇親会&ポスター(掲示のみ)(会費 4,000 円)

◆3月1日(土)◆

<各材料領域トピックス>

電子材料領域 (座長:高尾正敏(大阪大))

9:00- 9:15 「マルチプローブによる鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ の研究」(平石 雅俊(KEK)他)

9:15- 9:30 「SPring-8 における NIMS 専用ビームラインの現状と元素戦略」(上田茂典(NIMS)他)

9:30- 9:45 電子材料領域議論

構造材料領域 (座長:村上正紀(立命館大))

9:45-10:00 「強度と延性を両立した構造用金属材料の放射光を利用した組織・変形機構の解析」
(辻伸泰(京大)他)

10:00-10:15 「中性子による軽元素の空間分布観察とプロセスその場観察の計画について」
(大沼正人(北大))

10:15-10:30 構造材料領域議論

10:30-11:00 ……コーヒープレーク……

磁石材料領域 (座長:寺倉清之(AIST))

11:00-11:15 「希少元素フリー高性能磁石創製のための放射光ナノ解析」(中村哲也(JASRI))

11:15-11:30 「射光と中性子を用いた磁性材料の構造解析」(小野寛太(KEK))

11:30-11:45 磁石材料領域議論

触媒・電池材料領域 (座長:魚崎浩平(NIMS))

11:45-12:00 「蓄電池電極の異常電子物性と新材料開発」(山田淳夫(東大))

12:00-12:15 「触媒表面の活性種の XAFS による構造解析」(宍戸哲也(首都大東京))

12:15-12:30 触媒・電池材料領域議論

<ポスターセッション (元素戦略各材料領域・大型研究施設・一般)>

12:30-13:00 ランチ&ポスターセッション

13:00-15:00 ポスターセッション(ポスター発表 58 件)

<CMSI 関連機関>(座長: 榊茂好(京都大))

15:00-15:20 「In situ/オペランド軟 X 線発光分光による触媒・電池材料の機能解析」(原田慈久(物性研))

15:20-15:40 「低エネルギー放射光を利用した分子性材料における分子間相互作用の局所解析」(山根宏之(分子研)他)

15:40-16:00 「高強度鋼における材料組織学的課題」(古原忠(東北大金研))

16:00-16:20 「電極界面シミュレーションコードの開発とエネルギー変換問題への応用」(杉野修(物性研))

16:20-16:35 CMSI 関連機関研究領域議論

<全体討議・サマリー> (司会;瀧川仁(物性研))

16:35-17:35 「大型研究施設を利用した物質・材料研究の課題共有と共創に向けて」

17:35-17:45 クロージング(講評:村井 PD/澤岡 PD)

以上

配布先 関係各位	報告書40		作成日 2013年4月12日
	平成25年度 第1回物性セミナー		No. CMSI-13-01
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年4月11日(木) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 R104-2

講師: 紙屋佳知 Yoshitomo Kamiya (ロスアラモス国立研, Los Alamos National Laboratory)

タイトル: フラストレート量子磁性体におけるマルチフェロイクス (Multiferroics in frustrated quantum magnets)

【開催主旨】

フラストレートスピン系においてはマルチフェロイクスがしばしば顔を出す。本講演では(1)磁気渦結晶(2)半整数スピン三量体系の2つの話題を紹介した。前半のフラストレート量子磁性体における磁気渦結晶は、スピンギャップの上に6重縮退した最低エネルギーモードをもつ一粒子励起分散によって特徴づけられるスピン系において、磁場誘起の6-Qの凝縮相としてあらわれることがある。渦格子状態のnon-collinearな磁気構造はスピントラント機構によりナノスケールの電荷分布の変調を伴う。渦格子状態の実現機構を議論した後、スカーミオン格子相が発見された物質群との相違点についてまとめた。後半では半整数スピンの三量体をユニットとする系のマルチフェロイクスについて議論した。半整数スピンの三量体の基底状態はカイラル自由度をもつ $S=1/2$ のダブレットであるが、カイラリティの擬スピンは強結合ハバードモデルにおける電荷ゆらぎの低エネルギー有効演算子でもある。三量体をベースに格子を組むと、磁気自由度と電気分極がカップルしたKugel-Khomskii型のモデルが得られる。このモデルの平均場相図と期待される電気磁気効果を議論した。

以上

配布先 関係各位	報告書41		作成日 2013年4月24日	
	第3回 CMSI 神戸ハンズオン:xTAPP チュートリアル		No. CMSI-13-02	
			作成	
			CMSI 神戸 山下	

【開催要項】

日時: 2013年4月23日(火) 13:00-16:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 13名 (講師2名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

xTAPP (密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理計算コード)に興味がある方で、初心者を対象として xTAPP 講習会を開催した。xTAPP の概要と基本的な使い方についての講義と実習、また GUI による出入力の補助ツール(TAPIOCA)を用いた計算実習を行った。

【プログラム】

13:00-16:00 演習環境設定、xTAPP の概要の解説、チュートリアル、可視化ツールの実習、計算実習

以上

配布先 関係各位	報告書42	作成日 2013年5月9日	
	「京」一般利用情報交換会	No. CMSI-13-03	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 2013年5月8日(水)13:00 - 17:00
 会場： 理化学研究所 計算科学研究機構 6階 講堂(神戸)
 参加費： 無料
 参加者： 26名 (講師4名含む)
 主催： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

「京」の一般利用促進を目的とし、CMSI 内の「京」利用者からの情報提供、高度情報科学技術研究機構による「京」一般利用枠審査基準と採択率に関する報告、富士通による CMSI コンサル事例紹介を行った。
 また、理研 AICS が開発している数値計算ライブラリについて講演を依頼した。

【プログラム】

13:00～13:30 はじめに (藤堂眞治/東大物性研)
 「京」一般利用枠審査基準と採択率等の説明(峯尾・新宮/RIST)
 13:30-14:00 「京一般利用者」からの情報提供 1(信定克幸/分子科学研究所)
 14:00-14:30 「京一般利用者」からの情報提供 2(三澤貴宏/東京大学)
 ～休憩～
 14:45～15:15 対角化、数値計算等のライブラリ紹介(今村俊幸/理研 AICS)
 15:15～15:30 CMSI コンサル事例紹介(富士通)
 15:30～16:00 CMSI 若手技術交流会の報告と技術共有(石村和也/分子科学研究所)
 16:00～16:30 H24年度「京」一般利用申請に関するアンケート結果と
 申請書記載アドバイス(石村和也/分子科学研究所)
 HPCI の利用促進のための支援について(藤堂眞治/東大物性研)
 16:30～17:15 フリーディスカッション
 ・高度化支援に関する要望調査
 ・申請対象個別アプリの診断、相談計画

以上

配布先 関係各位	報告書43		作成日 2013年4月24日	
	第4回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル		No. CMSI-13-04	
				作成
				CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年5月17日(金) 13:00-18:00

会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

参加費: 無料

参加者: 10名 (講師2名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

フラグメント分子軌道(FMO)法による量子化学計算に興味がある方で、FMO法の初心者を対象としたFMO講習会を開催します。FMO法概念と計算法についての説明とGAMESS (アイオワ州立大学・M.S.Gordon教授グループで開発されている分子軌道法計算プログラム)を用いた小さなタンパク質の計算実習を行った。

【プログラム】

13:00-14:00 FMO法の基礎と応用例

14:00-15:00 GAMESSについて(FMO法の実装と使い方)

(休憩)

15:10-17:00 入力データの作成と計算実習

17:00-18:00 計算結果の可視化と質疑応答

以上

配布先 関係各位	報告書44		作成日 2013年5月28日
	平成25年度 第2回物性セミナー		No. CMSI-13-05
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年5月27日(月) 16:00-17:30
 場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 R104-2
 講師: 武藤哲也 Tetsuya Mutou (島根大 Shimane Univ.)
 タイトル: 電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体の動的帯磁率
 (Dynamical susceptibility of electron-doped high-Tc superconductors)

【開催主旨】

銅酸化物高温超伝導体における電子対形成機構に反強磁性スピン揺らぎが関与していることが、長年の理論的・実験的研究により明らかにされてきた。特に、中性子散乱実験からは、スピンドYNAMIXの微視的な情報が得られ、これまでにホールドーピング系銅酸化物高温超伝導体では、超伝導状態において強い反強磁性スピン相関が発達していることを反映した磁気共鳴ピークが観測されている。近年、電子ドーピング系銅酸化物高温超伝導体における中性子散乱実験から、電子ドーピング系においても磁気共鳴的なピークが観測され、その電子対形成機構に対する知見が得られている。我々は、電子ドーピング系銅酸化物超伝導体を念頭に置いた Hubbard モデルを対象にして、揺らぎ交換近似 (FLEX) を用いて、中性子散乱スペクトルに対応する動的帯磁率を計算した。得られたスペクトルは実験で得られているスペクトルの特徴を定性的に再現する。Fermi 液体に基づく FLEX による本結果は、電子ドーピング系の電子状態を Fermi 液体に基づくアプローチで記述することの妥当性を示していると考えられる。RPA により得られたスペクトルが実験結果を再現しないことから、Fermi 液体に基づくアプローチが妥当ではないと主張する過去の研究との比較検討も行った。

以上

配布先 関係各位	報告書45	作成日 2013年6月4日	
	CMSI アプリ高度化合宿 “TOKKUN! 1 (実行性能向上)” ～「京」一般利用申請に向けて～	No. CMSI-13-06	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 2013年6月3日(月) 13:00-6月5日(水) 15:00

会場: 理化学研究所 計算科学研究機構 R501CMSI 神戸拠点

参加費: 無料

参加者: 13名 (講師2名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

【概要】

「京」一般利用枠採択を目指して、実行性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で3日間開催し、13名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくは FX10 のプロファイラを用いてアプリの解析と実行性能の低い問題箇所の特典、その解決方法の議論とプログラミングを行った。プログラムコードの改良だけではなく、計算式やアルゴリズムなど根本部分から考え直すため長時間の議論を複数の参加者で行い、様々な意見を出し合った。wiki を立ち上げ重要なノウハウを書き込み、他の TOKKUN!でも情報を共有した。計算アルゴリズムから見直してプログラミングし直した結果、計算時間を約1割削減できたアプリもあり、多くの参加者が実行性能の向上に成功した。最終日には、神戸大学の3次元可視化装置 π -CAVE の体験も行き、「京」の計算結果の可視化方法についても議論した。

【プログラム】

<6月3日(月)>

13:00-14:00 各参加者の高度化支援内容説明

14:00-18:00 高度化作業

<6月4日(火)>

9:00-12:00 高度化作業

13:30-18:00 高度化作業

<6月5日(水)>

9:00-12:00 高度化作業

13:30-15:00 情報共有及び「MateriApps」紹介

以上

配布先 関係各位	報告書46	作成日 2013年6月12日	
	第5回 CMSI 神戸ハンズオン:ALPS チュートリアル	No. CMSI-13-07	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年6月10日(月) 13:00-18:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 15名 (講師3名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

ALPS アプリケーションを用いた古典/量子スピンモデルのシミュレーションに興味をお持ちの方を対象として、ALPS の概要と基本的な使い方についての講義、CMSI 神戸拠点のワークステーションクラスタを用いた厳密対角化・古典/量子モンテカルロアプリケーションの実行、結果の可視化に関する実習を行った。

【プログラム】

13:00-13:15 はじめに
 13:15-14:00 ALPS の概要
 14:00-15:00 ALPS の実行 (実習)
 (休憩)
 15:30-16:30 Python, pyalps, matplotlib 入門
 16:30-18:00 ALPS アプリケーションを用いた実習

以上

配布先 関係各位	報告書47		作成日 2013年7月5日	
	CMSI 若手技術交流会(合宿) [第8回]		No. CMSI-13-08	
	「アプリケーションの開発と展開のための情報共有」			作成
				CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 時: 2013年7月1日(月)13:00 ~ 3日(水)15:00
 会 場: 東レ総合研修センター(静岡県三島市)
 参加者数: 36名
 主 催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 参加費: 無料

【概要】

第8回 CMSI 若手技術交流会では、各自のアプリケーション、研究を様々な価値観で眺めてみる機会を提供するために、東大知的財産部から講師をお呼びして、知的財産の一般的知識やソフトウェアの特許についての講義のほか、東レの研究者の方による、企業での研究に関する講演を行った。また、アプリケーション公開に対する意識向上を目指して、MateriApps 等で公開されているアプリケーションを実際に使ってみて、公開方法、使用感、バグ、等のレポートを行う実習を行った。

【プログラム】

[第1日:7月1日]

13:00-16:00 講義「計算科学を知的資産につなげる」 時田 稔(東大知的財産部)
 16:00-16:30 休憩
 16:30-18:00 公開アプリの普及(その1:使ってみる)
 18:00-19:00 夕食
 19:00-21:00 座談会「チューニング苦労話大賞」
 「第7回 CMSI 若手技術交流会で得られたチューニングノウハウ集」(石村和也・分子研)
 「非平衡 MD コードのチューニング」(小西優祐・産総研)
 「私をとりまく環境とプログラム性能向上の関係」(野田真史・分子研)
 (高並列化や実効性能のチューニングの際に遭遇した 思いがけない発見、失敗、個人的な経験則、等の体験談を紹介し、知識を共有すると共に、失敗を繰り返さない秘訣を参加者で共有した。)

[第2日:7月2日]

09:00-12:00 公開アプリの普及(その2:使ってみる)
 12:00-13:00 昼食
 13:00-15:00 公開アプリの普及(その3:使ってみる)
 15:00-15:30 休憩
 15:30-16:30 東レショールーム見学
 16:30-18:00 講義「計算物質科学を素材産業につなげる」 茂本 勇(東レ株式会社)
 18:00-19:00 懇親会(夕食)
 19:00-21:00 座談会「結果を魅せるには」～結果の可視化・動画化の例と今後～
 「A poor man's way to show up scientific results in solid state physics」(山地洋平・東大)
 「自作可視化ソフトの紹介と可視化の例」(河野貴久・東大物性研/名工大)

「結果を魅せるための、可視化研究の軽〜い連携の紹介」(萩田克美・防衛大)
(研究の成果を分かりやすく伝える技術の共有を目指して、「結果の可視化」の成功例
失敗例を紹介し、合宿の参加者でより良い表現方法を語り合った。)

[第3日:7月3日]

09:00-12:00 公開アプリの普及 (その4:意見交換と課題抽出)

12:00-13:00 昼食

13:00-14:30 研究紹介 (その1)

「ワーム更新による並列化量子モンテカルロアルゴリズム」(正木晶子・物性研)

「Metallic Interface Emerging at Magnetic Domain Wall of Antiferromagnetic Insulator
--- Fate of Extinct Weyl Electrons」(山地洋平・東大)

「HPC Summer School 2013 参加報告」(笠松秀輔・物性研)

(京の一般利用開始からおよそ一年経ち、これまでに得られた最新の研究成果、
共有可能な技術の発展を紹介することで、計算科学によるサイエンス、技術の広がりを共有し、
新しい共同研究の可能性も目指す企画です。)

14:30-15:00 総合議論

以上

配布先 関係各位	報告書48	作成日 2013年7月17日	
	平成25年度 第3回「京」物性セミナー	No. CMSI-13-10	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年7月16日(火) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2

講師: 村瀬洋介 Yohsuke Murase (理化学研究所 計算科学研究機構 RIKEN AICS)

タイトル: シミュレーション実行管理ソフトウェア "CASSIA Manager"

("CASSIA Manager", a software for management of simulation results)

【開催主旨】

近年の計算能力および計算アルゴリズムの発展により、様々な問題に対してシミュレーションによるアプローチをするための計算リソースは容易に手に入るようになった。一方で、数百のモデル、数千のパラメータセットに対してシミュレーションを行うだけの計算リソースを持っているとしても、その多岐にわたるシミュレーションを複数のホストで効率的に実行し、計算結果を管理し、意味のある結果を取り出す事は、人間の作業がボトルネックとなり容易には実現できない。

セミナーでは我々が開発中の CASSIA Manager というシミュレーション結果を管理するソフトウェアを紹介した。ウェブブラウザから特定のパラメータを選びシミュレータや解析のジョブを複数のホストで実行し、すべてのシミュレーション結果は実行日時や計算ホスト、実行時間などの情報とともに自動でトレース可能な状態で格納される。また API を使用する事により、パラメータ選択やジョブ投入を自動化することも可能である。CASSIA Manager の簡単なデモや応用例とともに、社会現象のシミュレーションを念頭においた将来展望を議論した。

以上

配布先 関係各位	報告書49	作成日 2013年8月1日	
	第6回 CMSI 神戸ハンズオン:xTAPP チュートリアル	No. CMSI-13-15	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年7月30日(火) 13:00-18:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 9名 (講師2名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

xTAPP(密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理計算コード)に興味がある方で、初心者を対象とした xTAPP 講習会を開催した。xTAPP の概要と基本的な使い方についての講義と実習、また GUI による出入力の補助ツール(TAPIOCA)を用いた計算実習を行った。

【プログラム】

13:00-18:00
 演習環境設定 xTAPP の概要の解説
 チュートリアル
 可視化ツールの実習
 計算実習

以上

配布先 関係各位	報告書50		作成日 2013年8月16日	
	CMSI アプリ高度化合宿" TOKKUN! 2 (並列性能向上) ～「京」一般利用申請に向けて～		No. CMSI-13-16	
			作成	
			CMSI 神戸 松下	

【開催要項】

日時： 2013年8月5日(月) 13:00-8月7日(水) 18:00
 会場： 理化学研究所 計算科学研究機構 R501CMSI 神戸拠点
 参加費：無料
 参加者：14名 (講師3名含む)
 主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

【概要】

「京」一般利用枠採択を目指して、並列性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で3日間開催し、14名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくはFX10のプロファイラを用いてアプリの解析、計算負荷分散が均等になっていないもしくは通信時間がかかっている箇所の特定、その解決方法の議論とプログラミングを行った。計算式やアルゴリズムから見直して、通信データ量や回数の削減、通信と計算のオーバーラップ、ノード内並列では負荷分散の均等化に多くの参加者が取り組んだ。コピーを含めたデータ送受信に関連する時間を約1/4に削減、通信時の待ち時間を2割弱削減などの成果を得ることができた。この合宿でのアドバイスを基に2か月ほどかけてプログラムを大幅に書き変えた参加者は、最終的に実行性能を3%から16%まで向上させ2014年度「京」一般利用枠に採択された。

【プログラム】

<8月5日(月)>

13:00-14:00 各参加者の高度化支援内容説明

14:00-18:00 高度化作業

<8月6日(火)>

9:15-12:00 高度化作業

13:30-18:00 高度化作業

<8月7日(水)>

9:15-12:00 高度化作業

13:30-15:00 成果発表及び情報共有

以上

配布先 関係各位	報告書51		作成日 2014年3月5日
	平成25年度 第4回「京」物性セミナー		No. CMSI-13-18
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2013年8月20日(火) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2

講師: 宮下精二 Seji Miyashita (東京大学理学系研究科 Department of Physics, University of Tokyo)

タイトル: Phase Transition and Cooperative Phenomena in Cavity Systems

【開催主旨】

キャビティ内での原子あるいはスピン系とキャビティ光子の相互作用による協力現象は近年いろいろな実験系で盛んに研究され注目されている。この系は、各スピンが独立に外場としての光子と相互作用していると見なせる古典電磁場領域と、スピンとキャビティ光子の量子力学的相互作用が重要になるいわゆる強結合領域が存在する。ここでは、相互作用が強くなると様々な相転移が表れることも知られている。特に、最近我々のグループで発見した、励起自由度が示す対称性に破れに関する新しいタイプの相転移も含め、これらの系での現象を紹介し、それらを取り扱う方法についても議論した。さらに、これらの系を計算物理的手法で取り扱う方法についても触れた。

以上

配布先 関係各位	報告書52		作成日 2013年8月16日
	第7回 CMSI 神戸ハンズオン: バージョン管理システムチュートリアル		No. CMSI-13-19
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年8月22日(木) 13:00-18:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 15名 (講師3名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

xTAPP(密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理計算コード)に興味がある方で、初心者を対象とした xTAPP 講習会を開催した。xTAPP の概要と基本的な使い方についての講義と実習、また GUI による入出力の補助ツール(TAPIOCA)を用いた計算実習を行った。

【プログラム】

13:00-18:00

- ・バージョン管理システムとは? (講義)
- ・git と subversion の基礎 (講義 & 実習)
- ・ブランチとマージ (講義 & 実習)
- ・github や sourceforge を用いたオープンソースソフトウェアの開発・公開 (講義・実習)
- ・MateriApps と MateriApps Live (講義 & 実習)

以上

配布先 関係各位	報告書53	作成日 2013年9月6日	
	CMSI アプリ高度化合宿 "TOKKUN!3 (実行・並列性能向上)" ～「京」一般利用申請に向けて～	No. CMSI-13-23	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 2013年9月3日(火) 13:00-9月5日(木) 15:00

会場: 理化学研究所 計算科学研究機構 R501CMSI 神戸拠点

参加費: 無料

参加者: 11名 (講師1名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

【概要】

「京」一般利用枠採択を目指して、実行・並列性能向上をテーマにアプリの高度化合宿を理化学研究所計算科学研究機構で3日間開催し、11名が参加した。すでに「京」で大規模計算を実施している研究者と富士通のエンジニアが支援を行い、「京」もしくは FX10 の詳細プロファイラを用いてキャッシュミス率や命令タイプの割合調査などアプリの細かな解析も行い、計算機の性能を引き出すための高度化に取り組んだり、以前の TOKKUN! で解決できなかった問題に再挑戦する参加者が多くいた。富士通コンパイラの指示行を追加して SIMD 化や software pipelining の制御をすることで実行性能を3割向上させるなど、高度なプログラミング技術を用いたチューニングでも成果が得られた。最終日、大型スクリーンに各参加者のソースコードを出して全員で議論した際、様々な意見やアドバイスが出た。そのアドバイスを参考に TOKKUN!3 終了後に改良を行った参加者は、問題箇所の計算時間を3割以上削減することができた。

【プログラム】

<9月3日(火)>

13:00-13:30 高度化支援に関する説明

13:30-18:00 高度化作業

～終了後、懇親会～

<9月4日(水)>

9:15-12:00 高度化作業

13:30-18:00 高度化作業

<9月5日(木)>

9:15-12:00 高度化作業

13:30-15:00 成果発表及び情報共有

以上

配布先 関係各位	報告書54		作成日 2013年9月30日	
	第8回 CMSI 神戸ハンズオン:FMO チュートリアル		No. CMSI-13-25	
			作成	
			CMSI 神戸 山下	

【開催要項】

日時: 2013年9月27日(金) 13:00-18:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 10名 (講師2名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

「タンパク質の電子状態計算に興味があるが FMO 計算の経験が無い方」を対象に、プログラム(GAMESS に組み込まれている FMO)の機能と使い方を解説した。その後、基本的な FMO 計算と計算結果のグラフ化の実習を行った。実習では、新規開発の FMO 計算支援プログラム(名称・FU)を使用した。構造モデルの作成、入力データの作成、FMO 計算の実行と計算結果の可視化の一連の操作をこのソフトウェアで行った。

【プログラム】

- 13:00-18:00
1. GAMESS で可能な FMO 計算 (Fedorov)
 2. 入力データの作り方 (Fedorov)
 3. FMO 計算支援プログラム"FU"の使い方 (北浦)
 4. FMO 計算の実習 (Fedorov、北浦)
 5. 質疑・応答 (Fedorov、北浦)

以上

配布先 関係各位	報告書55	作成日 2013年11月7日	
	第9回 CMSI 神戸ハンズオン:ALPS チュー トリアル	No. CMSI-13-32	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年11月6日(水) 13:00-17:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 10名 (講師3名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

ALPS ライブラリを使った並列プログラムの開発に興味をお持ちの方を対象として、特に ALPS ライブラリの概要や ALPS スケジューラを用いた並列アプリケーションの開発に重点をおいて講義と実習を行った。

【プログラム】

13:00-13:15 はじめに
 13:15-13:45 ALPS の概要
 13:45-14:45 ALPS Python と ALPS アプリケーションの実行(講義 & 実習)
 15:00-17:00 ALPS ライブラリを用いた並列アプリケーション開発(講義 & 実習)

以上

配布先 関係各位	報告書56		作成日 2013年11月15日	
	第10回CMSI神戸ハンズオン:feramチュートリアル		No. CMSI-13-35	
			作成	
			CMSI 神戸 山下	

【開催要項】

日時: 2013年11月14日(木) 13:00-17:00

会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

参加費: 無料

参加者: 9名 (講師1名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

強誘電体のシミュレーションに興味をお持ちの方を対象として、簡単な座学の後、feramの実行方法や結果の解析方法の実習を行った。

【プログラム】

13:00-13:15 はじめに

13:15-13:45 ALPS の概要

13:45-14:45 ALPS Python と ALPS アプリケーションの実行(講義 & 実習)

15:00-17:00 ALPS ライブラリを用いた並列アプリケーション開発(講義 & 実習)

以上

配布先 関係各位	報告書57	作成日 2013年12月18日	
	第11回CMSI神戸ハンズオン:FMOチュートリアル	No. CMSI-13-39	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2013年12月17日(火) 13:00-17:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 6名 (講師2名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

「タンパク質の電子状態計算に興味があるが FMO 計算の経験が無い方」を対象に、プログラム(GAMESS に組み込まれている FMO)の機能と使い方を解説した。その後、基本的な FMO 計算と計算結果のグラフ化の実習を行った。実習では、新規開発の FMO 計算支援プログラム(名称・FU)を使用し、構造モデルの作成、入力データの作成、FMO 計算の実行と計算結果の可視化の一連の操作をこのソフトウェアで行った。

【プログラム】

13:00-14:00 GAMESS で可能な FMO 計算 (Fedorov)
 14:00-14:30 入力データの作り方 (Fedorov)
 (休憩/コーヒープレーク)
 14:40-15:30 FMO 計算支援プログラム"FU"の使い方 (北浦)
 15:30-16:30 FMO 計算の実習 (Fedorov、北浦)
 16:30-17:00 質疑・応答 (Fedorov、北浦)

以上

配布先 関係各位	報告書58	作成日 2014年1月21日	
	第12回CMSI神戸ハンズオン: MODYLAS講習会	No. CMSI-13-47	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2014年1月20日(月) 13:00-16:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 27名 (講師1名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

本講習会では、Nano-Ignition と MODYLAS を用いて入力ファイルの生成から MD 計算結果の解析までを実際に FOCUS スパコン上において体験していただいた。

【プログラム】

13:00- 分子動力学法概要説明、研究事例の紹介
 Nano-Ignition 概要説明
 MODYLAS 概要説明
 (休憩)
 14:00- 端末セットアップ
 Nano-Ignition 実習
 MODYLAS 実習
 結果の解析(エネルギー・温度・圧力のグラフ化、軌跡の可視化)
 16:00 終了予定

以上

配布先 関係各位	報告書59	作成日 2014年1月22日	
	平成25年度 第3回「京」物性セミナー	No. CMSI-13-48	
			作成
			CMSI事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2014年1月21日(火) 16:00-17:30

場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-1 会議室

講師: 福島孝治 Koji Hukushima (東大 Univ.Tokyo)

タイトル: 有限次元スピングラス模型のレプリカ対称性の破れ

(Replica symmetry breaking in finite-dimensional spin glasses)

【開催主旨】

ランダムな磁性体のモデルであるスピングラスは平均場理論を中心に理論が発展し、レプリカ対称性の破れに基づく平均場描像が低温のスピングラス相を記述する重要な概念であった。ゆらぎが本質的になる有限次元模型において、平均場描像が生き残るかどうかは長い間の議論されてきたが、決着はついていない。我々は最近、平均場極限で一段階レプリカ対称性の破れる模型の有限次元版をモンテカルロ法により調べることで、レプリカ対称性の破れを示唆する結果を得た。セミナーではこれまでの論点との相違点を詳しく議論した。

以上

配布先 関係各位	報告書60		作成日 2013年7月5日	
	CMSI 若手技術交流会(合宿) [第8回] 「アプリケーションの開発と展開のための情報共有」		No. CMSI-13-49	
				作成
			CMSI 事務局 三浦	

【開催要項】

日時: 2013年7月1日(月)13:00 ~ 3日(水)15:00
 会場: 東レ総合研修センター(静岡県三島市)
 参加者数: 36名
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 参加費: 無料
 幹事: 大久保毅(東大)、水口朋子(京大)、榮慶丈(名大)、チュオンビンチュオンズイ(北陸先端大)

【概要】

第8回 CMSI 若手技術交流会では、各自のアプリケーション、研究を様々な価値観で眺めてみる機会を提供するために、東大知的財産部から講師をお呼びして、知的財産の一般的知識やソフトウェアの特許についての講義のほか、東レの研究者の方による、企業での研究に関する講演を行った。また、アプリケーション公開に対する意識向上を目指して、MateriApps 等で公開されているアプリケーションを実際に使ってみて、公開方法、使用感、バグ、等のレポートを行う実習を行った。

【プログラム】

[第1日:7月1日]

13:00-16:00 講義「計算科学を知的資産につなげる」 時田 稔 (東大知的財産部)
 16:00-16:30 休憩
 16:30-18:00 公開アプリの普及 (その1:使ってみる)
 18:00-19:00 夕食
 19:00-21:00 座談会「チューニング苦労話大賞」
 「第7回 CMSI 若手技術交流会で得られたチューニングノウハウ集」(石村和也・分子研)
 「非平衡 MD コードのチューニング」(小西優祐・産総研)
 「私をとりまく環境とプログラム性能向上の関係」(野田真史・分子研)
 (高並列化や実効性能のチューニングの際に遭遇した 思いがけない発見、失敗、個人的な経験則、等の体験談を紹介し、知識を共有すると共に、失敗を繰り返さない秘訣を参加者で共有した。)

[第2日:7月2日]

09:00-12:00 公開アプリの普及 (その2:使ってみる)
 12:00-13:00 昼食
 13:00-15:00 公開アプリの普及 (その3:使ってみる)
 15:00-15:30 休憩
 15:30-16:30 東レショールーム見学
 16:30-18:00 講義「計算物質科学を素材産業につなげる」 茂本 勇 (東レ株式会社)
 18:00-19:00 懇親会(夕食)
 19:00-21:00 座談会「結果を魅せるには」～結果の可視化・動画化の例と今後～
 「A poor man's way to show up scientific results in solid state physics」(山地洋平・東大)
 「自作可視化ソフトの紹介と可視化の例」(河野貴久・東大物性研/名工大)

「結果を魅せるための、可視化研究の軽〜い連携の紹介」（萩田克美・防衛大）
（研究の成果を分かりやすく伝える技術の共有を目指して、「結果の可視化」の成功例
失敗例を紹介し、合宿の参加者でより良い表現方法を語り合った。）

[第3日:7月3日]

09:00-12:00 公開アプリの普及（その4:意見交換と課題抽出）

12:00-13:00 昼食

13:00-14:30 研究紹介（その1）

「ワーム更新による並列化量子モンテカルロアルゴリズム」（正木晶子・物性研）

「Metallic Interface Emerging at Magnetic Domain Wall of Antiferromagnetic Insulator
--- Fate of Extinct Weyl Electrons」（山地洋平・東大）

「HPC Summer School 2013 参加報告」（笠松秀輔・物性研）

（京の一般利用開始からおよそ一年経ち、これまでに得られた最新の研究成果、
共有可能な技術の発展を紹介することで、計算科学によるサイエンス、技術の広がりを共有し、
新しい共同研究の可能性も目指す企画です。）

14:30-15:00 総合議論

以上

配布先 関係各位	報告書61	作成日 2014年2月26日	
	第13回CMSI神戸ハンズオン:ALPSチュートリアル	No. CMSI-13-53	
			作成
			CMSI 神戸 山下

【開催要項】

日時: 2014年2月25日(火) 13:00-17:00
 会場: CMSI 神戸拠点 (理化学研究所・計算科学研究機構・5階 R501)
 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26
 参加費: 無料
 参加者: 7名 (講師3名含む)
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

量子スピン/格子ボゾン系の厳密対角化によるシミュレーションに興味をお持ちの方を対象として、ALPS の概要と基本的な使い方についての講義、CMSI 神戸拠点のワークステーションクラスタを用いた ALPS 厳密対角化アプリケーションの実行、結果の可視化に関する実習を行った。

【プログラム】

13:00-13:15 はじめに
 13:15-14:00 ALPS の概要
 14:00-14:30 ALPS の実行 (実習)
 (休憩/コーヒープレーク)
 14:50-15:30 Python, pyalps, matplotlib 入門
 15:30-17:00 ALPS アプリケーションを用いた実習

以上