

「H P C I 戦略プログラム」
成果報告書（平成 26 年度）
分野 2 新物質・エネルギー創成
添付資料 1
平成 26 年度イベント報告書
（報告書 1～60）

平成 2 7 年 5 月 2 9 日

東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター



計算物質科学イニシアティブ 統括責任者

常行真司

平成26年度CMSIイベント報告書一覧

- 報告書 1 【配信講義】CMSI計算科学技術特論B
- 報告書 2 【配信講義】第18回分子シミュレーション夏の学校
- 報告書 3 第25回CMDワークショップ
- 報告書 4 【配信セミナー】”金属の計算材料物性”・マルチスケールのアプローチ
- 報告書 5 「第8回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」「TCCIウインターカレッジー分子シミュレーションー」
- 報告書 6 第4回 量子化学ウインタースクール ～大規模系を目指した基礎理論～
- 報告書 7 【配信】第3回CMSI人材育成シンポジウム「応用数理と計算科学の連携Ⅱ」
- 報告書 8 CMRI「MPIプログラミング講習会」
- 報告書 9 第26回CMDワークショップ
- 報告書 10 OCTA講習会&トレーニング
- 報告書 11 CMSI 第1部会「新物質・新量子相の基礎科学」夏の学校 2014
- 報告書 12 ポスト「京」物質科学関連課題検討会
- 報告書 13 第5回CMSI研究会
- 報告書 14 「京」からポスト「京」に向けた 分野融合型基礎研究検討会 基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦
- 報告書 15 CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science
第4回超並列化技術国際ワークショップ
- 報告書 16 4th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward post-K computers
- 報告書 17 International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations
ー Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems
- 報告書 18 xTAPP Developers Meeting 2014
- 報告書 19 ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会（第1回）
- 報告書 20 物性研究所計算物質科学研究センター 第4回シンポジウム 物性研スーパーコンピュータ共同利用報告会
- 報告書 21 第5回CCMS (柏) ハンズオン: AkaiKKRチュートリアル
- 報告書 22 CMSIハンズオン(本郷): OpenACC 2.0によるGPGPUコンピューティング
- 報告書 23 第6回 CCMS(柏)ハンズオン: ALPSチュートリアル
- 報告書 24 第7回CCMS (柏) ハンズオン: feramチュートリアル
- 報告書 25 第8回CCMS (柏) ハンズオン: OpenMXチュートリアル
- 報告書 26 第8回CCMS (柏) ハンズオン: OpenMXチュートリアル
- 報告書 27 第1回TCCI インフォーマルミーティング
- 報告書 28 ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会（第2回）
- 報告書 29 第2回 TCCIインフォーマルミーティング
第3回TCCIインフォーマルミーティング
- 報告書 30 ・ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発プロジェクトに向けて・
- 報告書 31 第5回TCCI研究会
- 報告書 32 計算分子科学研究拠点(TCCI) 第4回産学連携シンポジウム
産応協「第31回スーパーコンピューティング・セミナー」「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」
- 報告書 33 CMSI第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第1回研究会

- 報告書 34 CMRIポスト京に関する研究会
- 報告書 35 CMSI第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第2回研究会
- 報告書 36 CMRI研究会
- 報告書 37 The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design
ACCMS-VO9
- 報告書 38 (The 9th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science
- Virtual Organization)
- 報告書 39 第9回 CMSI産官学連続研究会 「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」
- 報告書 40 第10回 CMSI産官学連続研究会 「構造用金属(鉄鋼)材料における計算材料科学」
- 報告書 41 第11回 CMSI産官学連続研究会 「ソフトマテリアル開発における大規模計算」
- 報告書 42 “「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会 ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合成～
- 報告書 43 第4回 TUT-CMSI計算物質科学見える化シンポジウム ～物質と社会をつなぐ～
- 報告書 44 コンピューティクス勉強会(配信講義)
- 報告書 45 第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム
- 報告書 46 第14回 「京」物性セミナー
- 報告書 47 第14回CMSI神戸ハンズオン: FUチュートリアル
- 報告書 48 第15回CMSI神戸ハンズオン: バージョン管理チュートリアル
- 報告書 49 第16回CMSI神戸ハンズオン: ALPSチュートリアル
- 報告書 50 第3回CMSI「京」・HPCIスパコン利用情報交換会
- 報告書 51 CMSIアプリ高度化合宿 “TOKKUN!4 (アプリ高度化・利用方法習得)”
- 報告書 52 第10回 若手技術交流会
- 報告書 53 CMSIアプリ高度化合宿 “TOKKUN!5 (アプリ高度化・利用方法習得)”
- 報告書 54 第17回CMSI神戸ハンズオン: FUチュートリアル
- 報告書 55 第18回CMSI神戸ハンズオン: Rokkoチュートリアル
- 報告書 56 第19回CMSI神戸ハンズオン: OpenMXチュートリアル
- 報告書 57 第20回ハンズオン: xTAPPチュートリアル
- 報告書 58 第21回ハンズオン: MODYLASチュートリアル
- 報告書 59 第11回 若手技術交流会
- 報告書 60 第22回ハンズオン: SMASHチュートリアル

配布先 関係各位	報告書1	作成日 2014 年 7 月 30 日	
	【配信講義】CMSI 計算科学技術特論B	No. CMSI-14-01	
			作成
			CMSI 三浦

【開催要項】

日時: 2014 年 4 月 10 日(木)～7 月 24 日(木)13:00-14:30

会場: CMSI 教育拠点 15 ヶ所

参加者:180名 (実質)

【概要】

本講義は、物性物理、分子科学、材料科学などに関連する科学技術計算ソフトウェアの開発ができる人材の育成を目的としています。講義は、開発に必要な要素 技術、ソフトウェア性能の最適化手法を実施した後、フーリエ変換、オーダーN法、MD、量子科学計算の高度な並列化手法をとり上げ、GPU や MIC を利用した並列化手法の講義も実施した。

【シラバス】

4 月 10 日 スーパーコンピュータとアプリケーションの性能 南一生(理研)
4 月 17 日 アプリケーションの性能最適化1(高並列性能性能最適化) 南一生(理研)
4 月 24 日 アプリケーションの性能最適化2(高並列性能性能最適化) 南一生(理研)
5 月 8 日 アプリケーションの性能最適化の実例1 南一生(理研)
5 月 15 日 アプリケーションの性能最適化の実例2 南一生(理研)
5 月 22 日 大規模系での高速フーリエ変換1 高橋大介(筑波大)
5 月 29 日 大規模系での高速フーリエ変換2 高橋大介(筑波大)
6 月 5 日 オーダーN 法1 尾崎泰助(東大)
6 月 12 日 オーダーN 法2 尾崎泰助(東大)
6 月 19 日 大規模 MD 並列化の技術1 安藤嘉倫(名古屋大)
6 月 26 日 大規模 MD 並列化の技術2 安藤嘉倫(名古屋大)
7 月 3 日 大規模量子化学計算1 小林正人(北大)
7 月 10 日 大規模量子化学計算2 小林正人(北大)
7 月 17 日 OpenACC・CUDA による GPU コンピューティング 成瀬彰(NVIDIA)
7 月 24 日 インテル Xeon Phi コプロセッサ向け最適化、並列化概要
池井満(インテル)、黒澤一平(エクセルソフト)

【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(金属材料研究所)
産業技術総合研究所(つくば)
東京大学物性研究所(柏キャンパス)
東京大学(本郷キャンパス)
東京大学(駒場キャンパス)
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
大阪大学(豊中キャンパス)※配信元

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)

配布先 関係各位	報告書2	作成日 平成 26 年 9 月 5 日	
	【配信講義】第 18 回分子シミュレーション 夏の学校	No. CMSI-14-02	
			作成
			CMSI 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)
会期： 平成 26 年 9 月 1 日(月)～ 3 日(水)
会場： 大原温泉 湯元のお宿 民宿大原山荘
参加者： 27名

【概要】

今年度は、先述のノーベル化学賞を背景とし、大まかな対象を QM(量子化学計算)、MM(古典力学計算)、QM/MM(両者の組み合わせ)とした。これらについて、初学の方やブラックボックスとして計算を行ってしまっている方にとって必ず有用となる基礎理論に加え、研究としての全体像を見失わない、より実践的な知識について、実際に研究を行っておられる先生方からご指導をして頂いた。また、若手同士議論を交わす場も設けており、掛け替えの無い人脈が形成できた。

【プログラム】

1 日目

15 : 00 ～ 開会挨拶
15 : 15 ～ 16 : 45 基礎講義 (蒲池先生)
17 : 00 ～ 17 : 45 夕食
18 : 00 ～ 19 : 30 基礎講義 (蒲池先生)
19 : 30 ～ 21 : 00 フリータイム
21 : 00 ～ 23 : 00 ポスターセッション

2 日目

9 : 00 ～ 11 : 00 基礎講義 (蒲池先生)
11 : 30 ～ 12 : 15 昼食
12 : 30 ～ 13 : 30 基礎講義 (蒲池先生)
13 : 30 ～ 13 : 45 小休憩
14 : 00 ～ 16 : 00 分科講義 (石田先生・森先生)
16 : 15 ～ 17 : 45 フリータイム
17 : 45 ～ 18 : 30 夕食
18 : 45 ～ 20 : 45 分科講義 (石田先生・森先生)
21 : 00 ～ 23 : 00 フリーディスカッション・懇親会

3 日目

9 : 30 ～ 11 : 30 分科講義 (石田先生・森先生)
11 : 45 ～ 12 : 00 閉会の言葉

以上

配布先 関係各位	報告書3	作成日 平成 26 年 9 月 10 日	
	第 25 回 CMD ワークショップ	No. CMSI-14-03	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】

2014年9月1日(月)－ 9月5日(金)

【場所】

公益財団法人 国際高等研究所

【参加者】

37名

【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
 大阪大学未来研究イニシアティブ・グループ支援事業

【趣旨】

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。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ー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し、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・デザインを体験し、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開催した。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いました。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が、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。そのため、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。

【内容】

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。

- | | |
|-------------------------|---------------------|
| 1. 第一原理計算の基礎 | 7. HiLAPW 実習 |
| 2. マテリアルデザインの基礎と応用 | 8. NANIWA-Series 実習 |
| 3. MACHIKANEYAMA2002 実習 | 9. ES-OPT 実習 |
| 4. STATE-Senri 実習 | 10. RSPACE 実習 |
| 5. Osaka2k 実習 | 11. ecalj 実習 |
| 6. ABCAP 実習 | その他 |

配布先 関係各位	報告書 4	作成日 平成 26 年 11 月 10 日	
	【配信セミナー】”金属の計算材料物性” － マルチスケールのアプローチ	No. CMSI-14-04	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】

平成 26 年 10 月 07 日 から 11 月 07 日

【場所】

第 1 回～第 6 回は、東北大学理学合同 B 棟 7 階 743 室

第 7 回・第 8 回は配信セミナーのため東北大学理学合同 B 棟 7 階 721 室(配信元)

CMSI 教育拠点 12 ヲ所(配信先)

【参加者】

61 名（実質）

【開催趣旨】

近年の計算材料科学の進展により、ミ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た研究を行うことが可能となりつつある。そこで、大学院生以上を対象に、全 8 回のセミナーで、第一原理計算や統計物理学などを基に、ミクロな領域からマクロな領域に関する問題、特に、本年度は、金属物性に関わるマルチスケール計算材料科学の現状と今後について講義と議論を行った。

金属や合金などの材料において、相図や延性や脆性などの材料物性に関わる問題は重要な課題である。これらはミクロな電子状態や原子間力のみならず、よりマクロな様々な内部組織も考慮すべき問題である。そこで、理論やコンピュータのハード面・ソフト面の進展とともに、ミクロからマクロにわたるコンピュータシミュレーションを用いたより高精度の材料設計が期待されている。しかし、金属材料の結晶構造や合金の組成・転位・欠陥などや、よりマクロな結晶粒界・界面などの様々な内部組織を考慮した計算は、第一原理計算のみでもよりマクロな連続体モデル計算のみでも、現在の理論や最新のスーパーコンピュータによる計算では定量的な議論が非常に難しい問題である。

本セミナーシリーズでは、第 1 回にマルチスケール計算材料科学の概要と現在の課題を明らかにし、第 2 回目以降は様々なスケールにおける理論と計算手法、そこから得られる材料物性の最新の成果や今後の課題などを議論した。また、最終日 11 月 7 日の第 7, 8 回は、テレビ配信システムを利用し、東北大学から CMSI 12 拠点に配信した。

【内容】

10 月 7 日(火)

14:50-16:20 【第 1 回セミナー】

マルチスケール計算材料科学と金属物性 寺田 弥生(東北大)

16:30-18:00 【第 2 回セミナー】

第一原理計算基礎 陳迎（東北大）

10 月 14 日(火)

14:50-16:20 【第 3 回セミナー】

材料の粒界・界面の計算科学 香山正憲（産総研）

16:30-18:00 【第 4 回セミナー】

強誘電体のマルチスケール計算 西松毅（東北大）

10月21日(火)

14:50-16:20 【第5回セミナー】

離散系から連続系へ 毛利哲夫（東北大）

16:30-18:00 【第6回セミナー】

鉄鋼材料の組織形成と変形 山中晃徳（東京農工大）

11月7日(金)

15:20-16:50 ◆第7回 配信セミナー◆

CALPHAD(計算状態図)の基礎と応用 大沼郁雄（東北大）

17:00-18:30 ◆第8回 配信セミナー◆

鉄鋼材料の魅力と計算材料科学への期待 潮田浩作（新日鐵住金）

【配信先】

東北大学 青葉山キャンパス（配信元）

東北大学 片平キャンパス(金属材料研究所)

産業技術総合研究所(つくば)

東京大学物性研究所(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

大阪大学(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5	作成日 平成 26 年 10 月 20 日	
	「第 8 回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」 「TCCI ウィンターカレッジー分子シミュレーションー」	No. CMSI-14-05	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】

平成 26 年 10 月 14 日(火)～10 月 17 日(金)

【場所】

岡崎コンファレンスセンター

【参加者】

68名

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)

【開催趣旨】

2014 年 10 月 14 日から 17 日までの日程で自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにおいて、分子科学研究所、計算分子科学研究拠点(TCCI)の主催、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)の共催で「分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」「TCCI ウィンターカレッジー分子シミュレーションー」を開催しました。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はせず、これから分子シミュレーションを始めようとしている学部学生や大学院生、実験家や企業の研究者など、計算科学に興味がある方々が多数参加しました。

【内容】

第 1 日目:2014 年 10 月 14 日(火)

13:15-13:45 受 付
13:45-14:00 開会式 挨拶:分子科学研究所 大峯巖所長
14:00-15:00 樋渡保秋先生(金沢大学名誉教授)
「計算科学の新規性(先進性)と脆弱性「これまで」から「これから」を予測する」
15:10-16:40 松本充弘先生(京都大学)「シミュレーションの全体像・概論」
16:50-18:20 松林伸幸先生(大阪大学)「統計熱力学の概要」

第 2 日目:2014 年 10 月 15 日(水)

9:00-10:30 吉井範行先生(名古屋大学)「力学、解析力学、数値解法、拘束力学」
10:40-12:10 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」
12:10-13:30 昼 食
13:30-15:00 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」
15:10-16:40 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」
16:50-18:20 篠田渉先生(名古屋大学)
「階層的分子モデルによるMDー全原子モデルを元にした粗視化分子モデルの構築」

第 3 日目:2014 年 10 月 16 日(木)

9:00-10:30 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」
10:40-12:10 志賀基之先生(日本原子力研究開発機構)「レアイベント関連」
12:10-13:30 昼 食

13:30-15:00 岡本祐幸先生(名古屋大学)「分子シミュレーションにおける拡張アンサンブル法」
15:10-16:40 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」
16:50-18:20 安藤嘉倫先生(名古屋大学)「分子シミュレーションの高速・並列化」
18:30-20:00 懇親会 挨拶:上田顕先生(京都大学名誉教授)

第4日目:2014年10月17日(金)

9:00-10:30 三浦伸一先生(金沢大学)「経路積分分子動力学法」
10:40-12:10 高橋英明先生(東北大学)「QM/MM-ER法」
12:15-12:30 閉会式・修了書授与 挨拶:分子シミュレーションスクール校長 樋渡保秋先生

以上

配布先 関係各位	報告書6	作成日 2014 年 12 月 19 日	
	第4回 量子化学ウインタースクール ～大規模系を目指した基礎理論～	No. CMSI-14-06	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】

2014 年 12 月 15 日(月)、16 日(火)

【場所】

岡崎コンファレンスセンター2階

【参加者】

49名

主 催:分子科学研究所

共 催:TCCI、CMSI、計算科学研究機構、計算科学研究センター

【開催趣旨】

現在、電子状態理論は大規模系や複雑系への適用が可能になっています。その背景には、大規模系を目指した理論開発や高並列化など、様々な取り組みがあります。今回のスクールでは電子状態理論の基礎からはじめて、これらの大規模系の理論までをカバーする講義を行いました。具体的には、分子軌道法の基礎、有効ポテンシャル、第二量子化、分子系の磁氣的性質、大規模系の理論への展開について。講義では簡単な演習も行いました。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、また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幅広い分野からご参加いただきました。

【内容】

12 月 15 日(月)

- 13:30 - 13:40 はじめに
司会:大西裕也(神戸大学)
- 13:40 - 15:30 森 寛敏先生(お茶の水大学)
「分子軌道法の基礎と相対論的有効ポテンシャル法」
- 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 16 日(火)

- 司会:今村 穰(計算科学研究機構)
- 9:00 - 10:50 Stephan Irle 先生(名古屋大学)
「Density-Functional Tight-Binding Method for Complex Systems in Ground and Excited States」
- 11:00 - 12:00 受講者の研究発表 (poster)
- 司会:大塚勇起(神戸大学)
- 13:30 - 15:20 青木百合子先生(九州大学)
「Elongation 法の原理と機能設計への展開」
- 15:30 - 17:20 波田雅彦先生(首都大学東京)
「分子の磁氣的性質」
- 17:20 - 17:30 おわりに

配布先 関係各位	報告書7	作成日 2015 年 1 月 20 日	
	【配信】 第3回 CMSI 人材育成シンポジウム 「応用数理と計算科学の連携Ⅱ」	No. CMSI-14-07	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】

2015 年 1 月 15 日(木)13:30-16:20

【場所】

大阪大学豊中キャンパス文理融合棟 305 セミナー室(配信元)

【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) (文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」)

【参加者】 31名

【開催趣旨】

近年新学術領域研究や様々なプロジェクトで、数値解析分野と物理や化学などのアプリ側との連携が増えてきています。最近の計算機が超並列やメニーコアの構成になって、アプリ側が取り組める範囲を超える技術が必要になっています。アプリ側からの数値解析分野への要望というものもあり、そのような要望に応える形で数値解析分野として新しい展開も出てきています。数値解析分野は、アプリ側からするとシーズの宝庫であって、優れたアルゴリズムやソフトがたくさん開発されていると思われますが、まだまだそれらをアプリ側が知る機会は少ないと思います。今回のミニシンポジウムでは、アプリ側と数値解析分野の連携の成功事例の紹介とシーズの紹介という観点で企画しました。ぜひともご参加ください。

【内容】

- 13:30-13:40 「趣旨説明」 下司雅章(阪大ナノセンター)
- 13:40-14:30 「京」での 1 億原子電子状態計算 ～物質科学と数理科学の接点として～
星健夫 (鳥取大工)
- 14:30-15:20 固有値計算のニーズとアルゴリズムについて
宮田考史、張紹良 (名大工)
- 15:30-16:20 確率的手法を用いた状態密度の並列計算法
Parallel Stochastic Estimation Method for Computing Density of States
櫻井鉄也 (筑波大システム情報)

【配信先】

東北大学 片平キャンパス(金属材料研究所)
産業技術総合研究所(つくば)
東京大学物性研究所(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
大阪大学(豊中キャンパス)※配信元
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8	作成日 2015 年 2 月 6 日	
	平成 26 年 CMRI「MPI プログラミング講習会」	No. CMSI-14-08	
			作成
			CMSI 三浦

【開催要項】

日 時:2015 年 2 月 5 日(木) 9:30～17:30

会 場:東北大学東京分室

(〒100-0005 東京都千代田区丸の内 1-7-12 サピアタワー10F)

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

参加費:無料

参加者:9名

【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】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 平成 26 年 3 月 1 日	
	第 26 回 CMD ワークショップ	No. CMSI-14-09	
			作成
			CMSI 三浦

【開催期間】 平成 26 年 2 月 23 日（月）－ 2 月 27 日（金）

【場所】 大阪大学産業科学研究所および工学研究科(吹田キャンパス)

【参加者】 37名

【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
大阪大学産業科学研究科、大阪大学大学院工学研究科
大阪大学大学院基礎工学研究科、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
大阪大学未来研究イニシアティブグループ支援事業、新学術領域研究「3D 活性サイト科学」

【趣旨】

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。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。コンピュータシヨナル・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ー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タシヨナル・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コースを設置し、スーパーコンピュータ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が、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。

【内容】

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タシヨナル・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。

- | | |
|-------------------------|---------------------|
| 1. 第一原理計算の基礎 | 7. HiLAPW 実習 |
| 2. マテリアルデザインの基礎と応用 | 8. NANIWA-Series 実習 |
| 3. MACHIKANEYAMA2002 実習 | 9. ES-OPT 実習 |
| 4. STATE-Senri 実習 | 10. RSPACE 実習 |
| 5. Osaka2k 実習 | 11. ecalj 実習 |
| 6. ABCAP 実習 | その他 |

以上

配布先 関係各位	報告書 10	作成日 平成 27 年 3 月 10 日	
	OCTA 講習会&トレーニング	No. CMSI-14-10	
			作成
			CMSI 三浦

【開催要項】

日程： 平成 27 年 3 月 4 日(水)10:00～17:00

場所： 産業技術総合研究所 臨海副都心センター本館 第 1 会議室

参加費： 無料

主催： (独)産業技術総合研究所、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

参加者： 56 名

【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、2014 年 2 月には最新版の OCTA2013SE がリリースされ、また 2015 年 2 月には次のバージョンである“OCTA8”のリリースも予定されています。

また、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ーOCTA 活用事例集」(化学工業日報社)も発行されました。

このたび、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、講習会とトレーニングを開催しました。

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 を使って操作法を学びました。また、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の場を設けました。

【内容】

10:00-10:05 挨拶 (東北大 川勝 年洋)

10:05-10:35 OCTA の概要 (産総研 森田裕史)

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)

13:00-15:00 OCTAトレーニング 1 (JSOL 大畠 広介)

15:00-15:15 休憩

15:15-16:30 OCTAトレーニング 2 (JSOL 大畠 広介)

16:30-17:00 総合質疑応答

以上

配布先 関係各位	報告書11	作成日 2014 年 8 月 30 日	
	CMSI 第1部会「新物質・新量子相の基礎科学」 夏の学校 2014	No. CMSI-14-11	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

主 催： CMSI 第1 部会
日 程： 2014 年 8 月 18 日(月)～22 日(金)
場 所： 滋賀県高島市安曇川町近江白浜
参加人数： 33 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ている。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、光合成系を始めとする励起状態を介したエネルギー変換やそれと関連する光励起ダイナミクスを中心課題とし、光・熱制御をめぐる抽出される基礎科学の意義を議論した。部会の枠を越えて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。

【プログラム】

8 月 18 日 午後 講師：金光義彦（京都大学）
講師：長谷川淳也（北海道大学）
夜 ショートトーク、フリーディスカッション

8 月 19 日 午前 講師：長谷川淳也（北海道大学）
講師：大槻純也（東北大学）
午後 講師：大槻純也（東北大学）
講師：石坂香子（東京大学）
夜 ショートトーク、フリーディスカッション

8 月 20 日 午前 講師：石坂香子（東京大学）
講師：村上修一（東京工業大学）
午後 講師：村上修一（東京工業大学）
講師：三野広幸（名古屋大学）
フリーディスカッション
夜 フリーディスカッション

8 月 21 日 午前 講師：三野広幸（名古屋大学）
講師：倉重佑輝（分子科学研究所）
午後 フリーディスカッション
夜 ショートトーク、フリーディスカッション

8 月 22 日 午前 講師：倉重佑輝（分子科学研究所）

以上

配布先 関係各位	報告書12	作成日 2014 年 9 月 30 日	
	ポスト「京」物質科学関連課題検討会	No. CMSI-14-12	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 平成 26 年 9 月 28 日(日) 10:00～17:30
 場所： ステーションコンファレンス東京（東京駅直結）6 階 605BC 号室
 主催： 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター(CCMS)
 東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)
 協賛： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 参加者： 64 名

【開催主旨】

文科省より示された、ポスト「京」で取り組むべき9つの重点課題と4つの萌芽的課題について、9 月下旬に公募が開始され、今年度から FS が開始される予定です。これに対し公募に対する準備を進めていく必要があります。
 そこで、物質科学に関連する(7)と(10)の課題を皆様と共に推進するため、具体的な研究内容の提案を募集。
 本課題検討会で発表いただき、参加者間で議論した。

【プログラム】

10:00～10:05 ポスト「京」「アプリケーション開発プロジェクト」に向けて 今田正俊(東京大)

ポスト「京」重点課題⑦ 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

◆サブ課題 A：新機能電子デバイス(7A)

(座長 大野かおる(横浜大))

1) 次世代高機能半導体デバイス

- 10:05～10:20 半導体デバイスにおける乱れの理解と制御
 ○岩田潤一・内田和之・押山淳(東京大)、重田育照(筑波大)、Mauro Boero (IPCMS)
 10:20～10:30 新奇ナノデバイスの欠陥・不純物の拡散、熱力学特性を解明する自由エネルギー計算
 斎藤峯尾・○小田竜樹(金沢大)
 10:30～10:40 最先端デバイス用界面原子構造の評価とデザイン
 ○小野倫也(大阪大)、宮崎剛(NIMS)
 10:40～10:50 内殻電子励起スペクトルの全電子第一原理計算手法の開発
 野口良史(東京大)、○杉野修(東京大)
 10:50～11:00 有機デバイス材料の 100 ナノ量子シミュレーション
 ○星建夫(鳥取大)、多田朋史(東工大)、山本貴博(東京理大)、山本有作(電通大)

(座長 小口多美夫(大阪大))

2) 新奇超伝導体、新機能スピン電荷デバイス材料

- 11:00～11:15 新奇超伝導体、機能スピン電荷デバイス材料の開発
 ○今田正俊・○山地洋平・川島直輝・藤堂眞治・三澤貴宏・求幸年(東京大)、
 有田亮太郎・酒井志朗(理研)、中村和磨(九工大)

3) 電子デバイスを代替・補完する光・電子デバイス

- 11:15～11:25 密度行列繰り込み群法による強相関物質の励起ダイナミクスの研究
 遠山貴巳(東京理大)、○曾田繁利(理研)
 11:25～11:40 電子デバイスを代替・補完する光・電子デバイス
 信定克幸(分子所)、矢花一浩・朴泰祐(筑波大)

◆サブ課題 B: 高性能永久磁石・磁性材料 (7B)

- 11:40～11:55 磁性材料における組織形成のマルチスケールモデリングと高性能磁性材料のデザイン
(双極子-双極子相互作用のある系のマルチスケールシミュレーション)
○佐藤和則(大阪大)、○西松毅(東北大)、福島鉄也(大阪大)

(座長 押山淳(東京大))

- 13:00～13:10 全電子フルポテンシャル線形化補強平面波法によるスピン軌道相互作用が絡むノンコリニア磁性の大規模計算
○中村浩次(三重大)、獅子堂達也(広島大)、小口多美夫(大阪大)
- 13:10～13:25 希少金属を代替する永久磁石・磁性材料の開発
○三宅隆・石橋章司(産総研)、合田義弘(東工大)、土浦宏紀・白井正文(東北大)、
吉本芳英・宮下精二・尾崎泰助(東京大)、西野正理・大久保忠勝・阿部太一・宮崎剛(NIMS)、
前園涼(北陸先端大)、(アドバイザー)寺倉清之(産総研・NIMS)

◆サブ課題 C: 高信頼性構造材料 (7C)

- 13:25～13:4 大規模第一原理計算とメゾ手法の連携による構造材料の微細組織の解明と設計
○香山正憲・田中真悟・石橋章司(産総研)、澤田英明・川上和人(新日鐵住金)、
譚田真人・尾方成信・君塚肇(大阪大)、大野宗一(北海道大)、澁田靖・尾崎泰助(東京大)、
高木知弘(京工繊大)、板倉充洋・山口正剛(原研)
- 13:40～13:50 材料製造プロセスにおける組織形成過程の大規模数値計算
大野宗一(北海道大)、澁田靖(東京大)、○高木知弘(京都工繊大)

(座長 信定克幸(分子研))

◆サブ課題 D: 次世代機能性化学品の分子設計 (7D)

- 13:50～14:00 次世代機能性化学品の分子設計
○尾形修司(名古屋大)
- 14:00～14:15 複合分子集合系の大規模計算に基づくソフト材料の評価と探索
○松林伸幸(大阪大)、茂本勇(東レ)

◆サブ課題 E: データ駆動型物質科学 (7E)

- 14:15～14:30 データ駆動型科学の物質科学への展開
○福島孝治・岡田真人(東京大)

◆特別講演

- 14:30～14:40 産業界からポスト「京」重点課題プロジェクトへの期待
○茂本勇(東レ)

ポスト「京」萌芽的課題⑩ 「基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦」

◆サブ課題 A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで (10A)

- 14:40～15:00 破壊とカタストロフィ、材料、人工物から地球まで
○山口正剛(JAEA)、大野かおる(横浜国大)、○久保百司・陳迎・尾澤伸樹・樋口祐次(東北大)
- 15:00～15:30 休息

(座長 三宅隆(産総研))

◆サブ課題 B: 相転移と流体が織り成す大変動: ナノバブルから火山噴火まで

- 15:30～15:45 複雑流体における物性予測・制御及び機能創発
野口博司・小屋口剛博・○渡辺宙志・芝隼人(東京大)、高木周(東大工)

15:45～16:00 ミクロからマクロに渡る複雑流動のマルチスケールシミュレーション手法の開発
○川勝年洋・村島隆浩(東北大)山本量一・谷口貴志(京都大)、
Giuseppe Milano (Univ. Salerno, Italy)、野口博司(東京大)

◆サブ課題 C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ(10C)

16:00～16:10 基礎科学の極限のための確率論的手法に基づく量子多成分系手法の高度化
○立川仁典・北幸海・河津励(横浜市大)、
16:10～16:20 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ
○土屋卓久(愛媛大)、常行真司(東京大)
16:20～16:35 地球惑星物質科学
○飯高敏晃(理研)、梅本幸一郎(東工大)、土屋旬(愛媛大)、池田隆司(JAEA)、
宮崎剛(NIMS)、石河孝洋(大阪大)、前園涼・本郷研太(北陸先端大)、吉本芳英(東京大)、
高木成幸・西松毅(東北大)、A.K. Singh (IIS)

(座長 香山正憲(産総研))

◆サブ課題 D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦

16:35～16:50 量子ダイナミクスとテンソルネットワーク
○川島直輝・藤堂眞治・宮下精二・今田正俊(東京大)、飯高敏晃(理研)、原田健自(京都大)、
鈴木隆史(兵庫県立大)
16:50～17:05 量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーシミュレーション
○小坂英男・大野かおる・堀切智之(横浜国大)、志田和人(東北大)
17:05～17:15 ノンコンベンショナル基底表現による厳密量子計算
○関野秀男・濱田信次(豊橋技科大)、Robert J. Harrison (SBU & BNL)
17:15～17:25 スピン・フラストレーション系における量子スピン液体の数値対角化による研究
○中野博生(兵庫県立大)、坂井徹(JAEA)

◆ポスト「京」で取り組む計算物質科学に向けて

17:25～17:30 常行真司(東京大 CCMS センター長)
毛利哲夫(東北大 CMRI 拠点代表)

以上

配布先 関係各位	報告書13	作成日 2014 年 12 月 12 日	
	第 5 回 CMSI 研究会	No. CMSI-14-13	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 時: 2014 年 12 月 8 日(月)～10 日(水)
 会 場: 東北大学 片平キャンパス さくらホール
 参加費: 無料
 参加者: 130 名 (実質)

【プログラム】

※別紙1参照

【ポスター発表】

※別紙2参照

以上

【別紙 1】

12 月 8 日 (月)

(† は若手奨励賞対象者)

12:15 受付開始
13:00-13:05 開会あいさつ

(座長：石村和也／分子科学研究所)

◎戦略課題 1 「新量子相・新物質の基礎科学」

13:05-13:15 第 1 部会レビュー
今田正俊 (東京大学), 天能精一郎 (神戸大学)
13:15-13:35 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造とダイナミクス：
結晶性分子ジャイロスコープと分子ベアリング
河野裕彦 (東北大学) ----- A-1
13:35-13:55 相対論的量子化学を基礎にした化学現象の精密解析
波田雅彦 (首都大学東京) ----- A-2
13:55-14:15 有機電子デバイス材料分子のための露わに 관련된 電子状態理論
大西裕也 (神戸大学) † ----- A-3

(座長：小西優祐／産業技術総合研究所)

14:15-14:35 スピン軌道作用物質の第一原理的研究と理論物質設計
山地洋平 (東京大学) † ----- A-4
14:35-14:55 2 次元 SU(N) 一般化 Heisenberg 模型の相転移現象
鈴木隆史 (兵庫県立大学) † ----- A-5
14:55-15:15 拡張したキタエフ・ハイゼンベルク模型の密度行列繰り込み群法による研究
遠山貴己 (東京理科大学) ----- A-6
15:15-15:30 コーヒーブレイク

15:30-16:00 招待講演：結晶性材料の塑性変形と破壊靱性
東田賢二 (九州大学)

(座長：尾崎泰助／東京大学)

16:00-16:20 エネルギーの効率的な創出、変換・貯蔵、利用の新奇基盤技術の開発
岡崎進 (名古屋大学)
16:20-16:40 次世代の産業を支える新機能デバイス・高機能材料の創成
常行真司 (東京大学)
16:40-17:00 基礎科学のフロンティア-極限への挑戦
毛利哲夫 (東北大学)

12月9日(火)

(†は若手奨励賞対象者)

8:30 受付開始

(座長：西澤宏晃／分子科学研究所)

◎戦略課題2 「次世代先端デバイス科学」

9:00-9:05 第2部会レビュー

押山淳 (東京大学)

9:05-9:25 実空間第一原理計算プログラム RSDFT の応用と CPMD のチューニング

岩田潤一 (東京大学) ----- B-1

9:25-9:45 オーダーN法 DFT プログラム CONQUEST の最近の発展：

分子動力学と電子状態解析

宮崎剛 (物質・材料研究機構) ----- B-2

9:45-10:05 有機無機界面での化学反応・熱輸送解析シミュレーション

田中宏一 (株式会社デンソー) † ----- B-3

10:05-10:25 光近接場を利用した高機能デバイスの理論設計

信定克幸 (分子科学研究所) ----- B-4

10:25-10:40 コーヒーブレイク

(座長：五十嵐亮／東京大学)

10:40-11:00 OpenFFT: An Open-Source Package for 3-D FFTs with Minimal Volume of Communication

Truong Vinh Truong Duy (東京大学) † ----- B-5

11:00-11:20 新規高性能磁石の探索：NdFe₁₁TiN と周辺物質の第一原理計算

三宅隆 (産業技術総合研究所) ----- B-6

◎支援課題

11:20-11:40 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

－テンソルネットワーク法による量子スピンモデルの基底状態計算－

大久保毅 (東京大学) † ----- F-1

11:40-12:00 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と公開－

石村和也 (分子科学研究所) † ----- F-2

12:00-12:20 昼休み

(座長：大久保毅 (東京大学))

◎戦略課題3 「分子機能と物質変換」

13:20-13:25 第3部会レビュー

岡崎進 (名古屋大学)

13:25-13:45 新しい並列シミュレーションによる大規模生体分子系の構造機能研究

北尾彰朗 (東京大学) ----- C-1

13:45-14:05 第一原理シミュレーションの階層的並列化

志賀基之 (日本原子力研究開発機構) ----- C-2

14:05-14:25 PCM SAC-CI の開発と応用

江原正博 (分子科学研究所) ----- C-3

14:25-14:45 ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス

西村好史 (早稲田大学) † ----- C-4

14:45-15:00 コーヒーブレイク

(座長：西原泰孝 / 東京大学)

15:00-15:20 フラグメント分子軌道法の開発と創薬への応用

北浦和夫 (神戸大学) ----- C-5

15:20-15:40 ポリオウィルスの全原子分子動力学シミュレーション：

水溶液中でのカプシド安定性およびレセプターCD155 との相互作用

安藤嘉倫 (名古屋大学) † ----- C-6

◎支援課題

15:40-16:00 フラストレート磁性体の計算科学的研究

---カゴメ格子反強磁性体の磁場中異常量子現象---

中野博生 (兵庫県立大学) ----- F-3

16:00-18:10 ポスターセッション

18:30-20:30 懇親会

12月10日(水)

(†は若手奨励賞対象者)

8:30 受付開始

(座長：吉澤香奈子／東京大学)

◎戦略課題4 「エネルギー変換」

9:00-9:05 第4部会レビュー

杉野修 (東京大学), 山下晃一 (東京大学)

9:05-9:25 第一原理分子動力学シミュレーションによる ClO_4 分子と Pt(322) ステップ表面
が水の解離に与える影響及び STATE 開発状況

木崎栄年 (大阪大学) † ----- D-1

9:25-9:45 第一原理分子動力学法を用いた高濃度リチウムイオン電池電解液の
還元反応解析

袖山慶太郎 (京都大学) † ----- D-2

9:45-10:05 燃料電池正極での酸素還元反応のシミュレーション

杉野修 (東京大学) ----- D-3

(座長：西村好史／早稲田大学)

10:05-10:25 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

山下晃一 (東京大学) ----- D-4

10:25-10:40 コーヒーブレイク

10:40-11:00 励起状態寿命の計算による DSSC の改良に向けて

安田耕二 (名古屋大学) ----- D-5

11:00-11:20 塩水中のメタンハイドレートの分解機構

矢ヶ崎琢磨 (岡山大学) † ----- D-6

◎招待講演2

11:20-12:00 Spatiotemporal Dynamics at Frictional Interfaces: From Constitutive Laws to
Global Frictional Resistance

Yohai Bar Sinai (Weizmann Institute of Science)

12:00-13:20 昼休み

(座長：河津励／横浜国立大学)

◎戦略課題5 「マルチスケール材料科学」

13:20-13:25	第5部会レビュー 香山正憲（産業技術総合研究所）	
13:25-13:45	鋼中析出物界面の第一原理計算 澤田英明（新日鐵住金株式会社）	----- E-1
13:45-14:05	第一原理計算に基づく Fe-Si 合金の固溶強化予測 譯田真人（大阪大学） †	----- E-2
14:05-14:25	The first-principles mapping onto the phase field crystal model Swastibrata Bhattacharyya（横浜国立大学） †	----- E-3
14:25-14:45	強誘電体の弾性熱量効果の分子動力学計算 西松毅（東北大学）	----- E-4
14:45-15:05	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 澁田靖（東京大学） †	----- E-5

(座長：野田真史／分子科学研究所)

◎支援課題

15:05-15:25	物質デザインのための確率論的手法に基づく量子多成分系手法の高度化 立川仁典（横浜市立大学）	----- F-4
-------------	--	-----------

15:25-15:40 コーヒーブレイク

◎小委員会活動報告

15:40-15:50	スパコン連携小委員会活動
15:50-16:00	産学官連携小委員会活動
16:00-16:10	人材育成・教育小委員会活動
16:10-16:20	広報小委員会活動
16:20-16:25	閉会のご挨拶

◎戦略課題 1 「新量子相・新物質の基礎科学」

- P-1 高擬縮重励起状態における非断熱電子動力学と化学反応
米原丈博（東京大学）†
- P-2 電子-格子相互作用を含む強相関電子系のための多変数変分モンテカルロ法
大越孝洋（東京大学）†
- P-3 アクトミオシンモーター動作を駆動する自由エネルギーランドスケープ
笹井理生（名古屋大学）
- P-4 並列固有値ソルバの統一的インターフェースを用いた厳密対角化パッケージの開発
坂下達哉（東京大学）†
- P-5 フラグメント分子軌道法を用いた光システム II の全電子計算
上島基之（神戸大学）
- P-6 動的密度行列繰り込み群法の改良と非線形光学応答の研究
曾田繁利（理化学研究所）
- P-7 第一原理ダウンフォールディング法を用いた鉄系超伝導体の超伝導機構の解析
三澤貴宏（東京大学）†
- P-8 多変数変分モンテカルロ法による正方格子 J_1 - J_2 Heisenberg 模型の解析
森田悟史（東京大学）†
- P-9 モデル空間量子モンテカルロ法の基底・励起状態のポテンシャル曲線への応用
大塚勇起（神戸大学）
- P-10 On the structure and dynamics of crystalline molecular gyroscopes: a semiclassical molecular dynamics simulation
Wilfredo Credo Chung（東北大学）
- P-11 MPS における特異値分解へのランダムネスの効果
五十嵐亮（東京大学）†
- P-12 Negatively curved cubic carbon crystals with octahedral symmetry
Yunye Liang（東北大学）†
- P-13 カーネル法を用いた臨界現象の有限サイズスケーリング法とその応用
原田健自（京都大学）

◎戦略課題 2 「次世代先端デバイス科学」

- P-14 RSPACE を用いた電子構造・輸送特性シミュレーション
小野倫也（筑波大学）†
- P-15 Effect of SiC stacking on the electronic properties of the SiC/SiO₂ interface

Christopher Kirkham (筑波大学) †

- P-16 伝導計算で現れる一般化固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法の適用
岩瀬滋 (大阪大学) †
- P-17 Excitons and Biexcitons in symmetric electron-hole bilayers
前園涼 (北陸先端科学技術大学院大学)
- P-18 Casida ansatz に基づいた励起状態間の行列要素の計算手法：
平面波・擬ポテンシャル枠組みでの精度評価
胡春平 (東京理科大学) †
- P-19 xTAPP のユーザビリティの向上
吉澤香奈子 (東京大学) †
- P-20 GCEED プログラムの計算精度及び計算効率の考察
野田真史 (分子科学研究所) †
- P-21 最局在ワニエ軌道を用いた有機強誘電体の分極発現機構の解明
石橋章司 (産業技術総合研究所)
- P-22 シリカガラス中の水分子による結合破壊反応の
ハイブリッド量子古典シミュレーション
河野貴久 (東京大学) †
- P-23 二層シリセンの積層構造と電子物性
酒井佑規 (東京大学) †
- P-24 Recursive approach for the NEGF method combined with the RSDFT code
Moshiour Rahaman (東京大学) †

◎戦略課題3 「分子機能と物質変換」

- P-25 Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics と Markov State Model を用いた
タンパク質構造変化の自由エネルギー計算
西原泰孝 (東京大学) †
- P-26 B 型肝炎ウイルスの全原子分子動力学シミュレーション
水口朋子 (名古屋大学) †
- P-27 Photophysics of fulvene under the non-resonant Stark effect.
Shaping the conical intersection seam
Sergi Ruiz-Barragan (分子科学研究所) †
- P-28 釣り合い条件の違いによるレプリカ置換分子動力学法の検証と生体分子への応用
西澤宏晃 (分子科学研究所) †

◎戦略課題4 「エネルギー変換」

- P-29 Toward Improvement of DSSC through Calculation of Lifetime
David Sulzer (分子科学研究所) †
- P-30 経路積分分子動力学法による階層的並列化と分子内振動解析への応用

- 河津励（東京大学）
- P-31 蓄電デバイスの界面ダイナミクス制御技術確立に向けた理論的研究
大脇創（株式会社日産アーク）
- P-32 Ca^{2+} 依存セルロース結合モジュールの選択的糖鎖結合の解析
吉田紀生（九州大学）
- P-33 CuNi 合金系における熱電効率に関する数値シミュレーション
小西優祐（産業技術総合研究所）†

◎戦略課題5 「マルチスケール材料科学」

- P-34 局所エネルギー・局所応力の第一原理計算法開発と材料界面への適用
香山正憲（産業技術総合研究所）
- P-35 Cluster Variable Method を応用した振動の自由エネルギーの計算
山田泰徳（東北大学）†
- P-36 第一原理計算によるチタン合金の電子状態解析と相安定性
佐原亮二（物質・材料研究機構）
- P-37 移流集積法を用いたコロイド凝固過程の数値実験モデル
寺田弥生（東北大学）
- E-4 強誘電体の弾性熱量効果の分子動力学計算
西松毅（東北大学）

◎支援課題

- P-38 大規模スーパーセルを対象とした Screened KKR 法に基づく
第一原理電子状態計算コードの開発
土居抄太郎（東京大学）†

◎一般

- P-39 CMSI の人材育成 ～ポスト「京」及びその先を見据えて～
下司雅章（大阪大学）
- P-40 数値対角化によるスピンナノチューブの量子相転移の研究
坂井徹（日本原子力研究開発機構）
- P-41 虚時間長制御による量子臨界系の動的臨界指数測定
安田真也（東京大学）†
- P-42 対称テンソル分解による配置間相互作用法とその発展
植村渉（東京大学）†
- P-43 Ni 原子ドッピングに及ぼす希薄 Fe-Si 合金の力学特性の第一原理解析
陳迎（東北大学）
- P-44 SiC(0001)表面上に形成されたナノファセットにおける局在スピン状態

澤田啓介（東京大学）

P-45 Investigation of Electronic Properties of Hydrated Task Specific Ionic Liquids using Density Functional Theory

Surya V.J. Yuvaraj（東北大学）

P-46 2014 年度 東北大学計算材料学研究拠点（CMRI）人材育成・教育活動報告

寺田弥生（東北大学）

P-47 CMSI 計算科学技術特論Cのシラバス検討

岩田潤一（東京大学）

◎ポスト「京」に向けた CMSI の取り組み（予稿なし）

P-48 エネルギーの効率的な創出、変換・貯蔵、利用の新奇基盤技術の開発

岡崎進（名古屋大学）

P-49 次世代の産業を支える新機能デバイス・高機能材料の創成

常行真司（東京大学）

P-50 基礎科学のフロンティア-極限への挑戦

1) 鉄鋼材料の粒界破壊におけるマルチスケール解析：第一原理計算と破壊力学試験

山口正剛（JAEA）

2) 相転移と流体が織り成す大変動

川勝年洋（東北大学）

3) 極限環境での状態変化：物質の理解から惑星深部へ

飯高敏晃（理化学研究所）

4) 量子力学の基礎と情報：計算限界への調整

川島直輝（東京大学）

配布先 関係各位	報告書14	作成日 平成 27 年 1 月 20 日	
	「京」からポスト「京」に向けた 分野融合型基礎研究検討会 基礎科学のフロンティア 極限への挑戦	No. CMSI-14-14	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 平成 27 年 1 月 16 日(金) 10:00-17:00
場所： TKP 東京駅前カンファレンスセンター9階 ホール 9A
参加者： 44 名

【開催趣旨】

「京」で拓いた基礎科学をポスト「京」で発展・新展開させるため、掲題検討会を開催した。ポスト「京」萌芽的課題への提案を視野に入れ、参加者全員で議論し、課題を創出した。

【プログラム】

進行 毛利哲夫(東北大学)

10:00～10:10 「趣旨説明」今田正俊(東京大学)

10:10～11:10 「破壊とカタストロフィ:材料、人工物から地球まで」
山口正剛(日本原子力研究開発機構)

11:10～12:10 「相転移と流体が織り成す大変動:ナノバブルから火山噴火まで」
川勝年洋(東北大学)

12:10～13:30 <昼休み>

13:30～14:30 「極限環境での状態変化:物質の理解から惑星深部へ」
飯高敏晃(理化学研究所)

14:30～15:30 「量子力学の基礎と情報:計算限界への挑戦」
川島直輝(東京大学)

15:30～15:45 <休憩>

15: 45～16:25 「近似的ベイズ計算(ABC):ナノから地球まで」
岡田真人(東京大学)

16:25～17:00 「全体討議・総括」
毛利哲夫(東北大学)

【主催】

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター(CCMS)
東北大学金属材料研究所計算材料科学拠点(CMRI)

【協賛】

計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

以上

配布先 関係各位	報告書15	作成日 平成 26 年 10 月 24 日	
	CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science	No. CMSI-14-15	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時： 平成 26 年 10 月 20 日(月)～22 日(水)

場所： 理化学研究所計算科学研究機構 6F 講堂

参加者： 41 名

【概要】

本ワークショップは、物性物理や量子化学等の分野で近年注目を集めている「テンソルネットワーク」をテーマとして、海外から 7 名、国内から 30 名以上の研究者が集まり開催された。ワークショップでは、多体量子系の基底状態におけるエンタングルメント、行列積状態、密度行列繰り込み群、PEPS (Projected Entangled Pair State) など、テンソルネットワークの基礎理論から、量子化学計算、強相関量子系、相転移と臨界現象、不純物問題、格子ゲージ理論にいたるまで幅広い分野への応用が紹介された。さらには、シミュレーションにおける演算量の最適化、計算精度のテンソルネットワーク依存性、汎用的テンソル計算や並列 SVD ソルバーのライブラリ開発といった、計算科学的な観点からの興味深い講演も数多くなされ、若手を中心に活発な議論が展開された。

【プログラム】

Day-1: Oct. 20th (Mon)

- 10:00 – Opening
- 10:10 – Edward F. Valeev (Department of Chemistry, Virginia Tech, USA)
TiledArray: Scalable C++ Toolkit for Block-Sparse Tensor Computing
- 11:40 – Lunch at FOCUS
- 13:00 – Kouichi Okunishi (Department of Physics, Niigata University, Japan)
"Fixed point structure of the tensor renormalization group in 1+1 dimension"
- 13:45 – Hana Saito (NIC Research Group Elementary Particles at DESY, Zeuthen, Germany)
"Hamiltonian approach to Lattice Gauge Theory: Temperature dependence of the chiral condensate in the Schwinger model with Matrix Product State"
- 14:30 – Coffee break and discussion time
- 15:30– Tao Xiang (Institute of Physics Chinese Academy of Science, China)
"Tensor renormalization of quantum lattice models"
- 16:50 - Syngae Todo (Department of Physics, University of Tokyo)
"MateriApps: a Portal Site for Materials Science Simulation"
- 17:10 – Poster Session
- 18:30 – Banquet at AICS lounge

Day-2: Oct. 21st (Tue)

- 9:30 – Didier Poilblanc (Laboratoire de Physique Theorique, CNRS-UMR5152, Universite de Toulouse III, France)
"Simulating correlated electronic and spin systems with PEPS"
- 11:00 – K computer tour & group photo
- 12:00 – Lunch at FOCUS
- 13:30 – Robert Peters (AICS Advanced Science Institution, Japan)
"Quantum impurity models within the Density Matrix Renormalization Group"
- 14:15 – Hiroyuki Ishigami (Graduate School of Informatics, Kyoto University, Japan)
"Development of Parallel SVD Solver for Large-scale Sparse Matrix"
- 15:00 – Coffee break and discussion time
- 16:00 – Takeshi Yanai (National Institutes of Natural Sciences Institute for Molecular Science, Japan)
"Ab initio quantum chemistry with density matrix renormalization group"

Day-3: Oct. 22nd (Wed)

- 9:30 – Norbert Schuch (Institute for Quantum Information RWTH Aachen University, Germany)
"Identifying quantum order from the transfer operator"
- 11:00 – Tsuyoshi Okubo (The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Japan)
"Ground state calculation of the generalized Kitaev-Heisenberg model using PEPS tensor network method"
- 11:45 – Lunch at FOCUS
- 13:30 – Naoki Nakatani (Catalysis Research Center, Hokkaido University, Japan)
"Tensor Network Perspectives in Quantum Chemistry"
- 14:15 – Philippe Corboz (Institute for Theoretical Physics, University of Amsterdam, Netherlands)
"Recent progress in simulating strongly correlated systems with iPEPS"
- 15:45 – Closing

【ポスターセッション】

Shinji Hamada (Toyohashi University of Technology)

"DMET (Density Matrix Embedding Theory) calculation applied to the Hubbard model on the honeycomb lattice"

Kenji Harada (Kyoto University)

"Tensor network calculation on large scale parallel computer"

Takahiro Ohgoe (The University of Tokyo)

"Multi-variable variational Monte Carlo method for electron-phonon coupled systems"

Akira SaiToh (Toyohashi University of Technology)

"Numerical estimation of quantum errors using multiprecision MPS"

Tatsuya Sakashita (ISSP)

"Exact diagonalization package using integrated interface for parallel eigensolvers"

Hideo Sekino (Toyohashi University of Technology)

"An application of Density Matrix Embedding Theory on 6 membered ring systems"

Shigetoshi Sota (RIKEN AICS)

"Massively parallel DMRG method and its application"

Takafumi Suzuki (University of Hyogo)

"Dynamical properties of the Heisenberg-Kitaev model on the honeycomb lattice"

Kazuhiko Tanimoto (Kyoto University)

"Topological phase of SU(N) Heisenberg chain with iTEBD algorithm"

Koichi Yanagisawa (The University of Tokyo)

"Corner Transfer Matrix Renormalization for $S=1/2$ J1-J2 Heisenberg Model on Square Lattice"

Hui-Hai Zhao (The University of Tokyo)

"PEPS on finite periodic lattice"

【Organizers】

Hidemaro Suwa (Univ. Tokyo, Chair)

Naoki Nakatani (Hokkaido Univ.)

Synge Todo (Univ. Tokyo)

Naoki Kawashima (ISSP)

Kazuo Kitaura (Kobe University)

Tatsuya Sakashita (ISSP)

以上

配布先	報告書16	作成日 平成 26 年 11 月 29 日	
関係各位	第4回超並列化技術国際ワークショップ 4 th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward post-K computers	No. CMSI-14-16	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2014 年 11 月 23 日 (日) ~24 日 (月)

場所: 東京大学 本郷キャンパス 工学部 6 号館 2 階 64 号講義室

参加者: 38 名

【概要】

国内外から、量子物理や化学の分野で超並列プログラム開発に携わる研究者を招き、本ワークショップを開催した。

参加者は、さまざまなプログラミング技術やノウハウを学ぶことができた。

【プログラム】

Day1: Sunday, November 23rd, 2014

<Session1>

- 11:00—11:05 Opening remarks
Prof. Hideo Sekino(TUT)
- 11:05—11:10 Welcome speech
Prof. Kazuo Takatsuka(Univ. of Tokyo)
- 11:10—12:10 A critical perspective of challenges and future directions in electronic structure calculations in many-core parallel computers.
Dr. Alvaro Vazquez-Mayagoitia(ALCF)
- 12:10—13:40 lunch break

<Session2>

- 13:40—14:10 Parallel implementation of divide-and-conquer quantum chemistry
Dr. Masato Kobayashi(Hokkaido Univ.)
- 14:10—14:40 Development and applications of a linear-scaling DFT code CONQUEST
Dr. Tsuyoshi Miyazaki(NIMS)
- 14:40—15:10 Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Program SMASH
Dr. Kazuya Ishimura(IMS)
- 15:10—15:40 Real-Space grid DFT code for Massively-Parallel computers
Dr. Junichi Iwata(Univ. of Tokyo)
- 15:40—16:00 coffee break
- 16:00—18:00 Poster session
- 18:00—20:00 Banquet

<Session4>

- 9:00—10:00 Accelerating multiconfigurational quantum chemistry with graphical processing units
Dr. Edward Hohenstein(City College New York)
- 10:00—10:30 Development and application of planewave based first-principles electronic structure calculation code "xTAPP"
Dr. Yoshihide Yoshimoto(Univ. of Tokyo)
- 10:30—10:50 coffee break

<Session5:Panel discussion>

10:50—12:00 Panel discussion

12:00—13:30 lunch break

<Session6>

13:30—14:30 Accurate linear scaling DFT calculations for very large systems

Dr. Stephan Mohr(Institut Nanosciences et Cryogénie, CEA)

14:30—15:00 OpenFFT: An Open-Source Package for 3-D FFTs with Minimal Volume of Communication

Dr. Truong Vinh Truong Duy(Univ. of Tokyo)

15:00—15:30 Development of the program package of photoinduced electrodynamics: GCEED

(Grid-based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics)

Dr. Masashi Noda(IMS)

15:30—15:50 coffee break

<Session7>

15:50—16:20 Development of a 3rd Gen DFT program: ProteinDF

Dr. Toshiyuki Hirano(Univ. of Tokyo)

16:20—16:50 Algorithm and implementation of Møller -Plesset perturbation theory for petaflops
supercomputers.

Dr. Michio Katouda(Riken AICS)

16:50—17:00 Closing comments

Prof. Hideo Sekino(TUT)

【Organizers】

Prof. Hideo Sekino, Toyohashi University of Technology (TUT),

Dr. Jun'ichi Iwata, Univ. of Tokyo

Dr. Kazuya Ishimura, IMS.

【Sponsor】

The Computational Materials Science Initiative (CMSI)

The Strategic Programs for Innovative Research (SPIRE), MEXT Japan.

以上

配布先	報告書17	作成日 平成 27 年 2 月 25 日	
関係各位	International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations – Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems	No. CMSI-14-17	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 平成 27 年 2 月 18 日 (水) ~21 日 (土)

場所: 東京大学大本郷キャンパス (2 月 18 日 工学部講義室、2 月 19-21 日 小柴ホール)

参加者: 107 名

【開催概要】

強く相互作用する多体フェルミ粒子系は物性物理学、量子化学、原子核物理に共通する中心的課題であり、その未解明の性質に迫ることは数値計算科学のグランドチャレンジの一つとなっている。本ワークショップでは、このグランドチャレンジに挑む研究者が国と分野を横断して集い、物性物理学、量子化学、原子核物理の3分野に共通する多体問題の数値解法について活発な議論を行い今後への展望を話し合った。

ワークショップは4日間にわたり、21の招待講演に加え、18の一般講演、40のポスター発表が行われた。以下に招待講演者リスト及びプログラムを示す。

招待講演者 (21 名):

Paul Ayers (Department of Chemistry, McMaster University, Canada)

Silke Biermann (Ecole Polytechnique, France)

George Booth (King's College London / University of Cambridge, UK)

Garnet Kin-Lic Chan (Department of Chemistry, Princeton University, USA)

George Fann (Oak Ridge National Laboratory, USA)

Stefano Gandolfi (Theoretical Division, T-2, Los Alamos National Laboratory, USA)

Emanuel Gull (Department of Physics, University of Michigan, USA)

Hiroshi Nakatsuji (Quantum Chemistry Research Institute, Japan)

Takashi Nakatsukasa (Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Japan)

Hidekatsu Nemura (Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, Japan)

Tomotoshi Nishino (Department of Physics, Kobe University, Japan)

Takashi Oka (Department of Applied Physics, University of Tokyo, Japan)

Roman Orus (Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität, Germany)

Junya Otsuki (Department of Physics, Tohoku University, Japan)

Noritaka Shimizu (CNS, University of Tokyo, Japan)

Toru Shiozaki (Department of Chemistry, Northwestern University, USA)

Gustavo E. Scuseria (Department of Chemistry & Department of Physics and Astronomy, Rice University, USA)

Sandro Sorella (SISSA, Trieste, Italy)

Naofumi Tsunoda (Department of Physics, University of Tokyo, Japan)

James P. Vary (Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, USA)

Takeshi Yanai (Institute for Molecular Science, Japan)

プログラム:

Eng. Bldg.2		Sc. Bldg.1			
Room #212	Feb. 18	Koshiba Hall	Feb. 19	Feb. 20	Feb. 21
	9:00 Registration				
	9:45 Opening		9:30 Invited	Invited	9:30 Invited
	10:00 Invited		Nemura	Nishino	Vary
	Nakatsuji		10:10 Invited	Invited	10:10 Invited
	10:40 Invited		Fann	Yanai	N. Tsunoda
	Ten-no		10:50 Break	Break	10:50 Break
	11:20 Ochi		11:20 Anderson	Invited	11:20 Y.Tsunoda
	Nomura		11:40 Invited	Shiozaki	Kim
	12:00 Lunch		12:00 Otsuki	Okubo	12:00 Yamaji
			12:20 Lunch	Lunch	12:20 Lunch
	13:30 Invited				
	Scuseria		13:50 Invited	Invited	13:50 Invited
	14:10 Invited		Sorella	Gull	Nakatsukasa
	Ayers		14:30 Morita	Invited	14:30 Yonehara
	14:50 Mizusaki		14:50 Nasu	Orus	14:50 Yamada
	15:10 Break		15:10 Break	Break	15:10 Invited
	15:40 Invited		15:40 Invited	Invited	Oka
	Gandolfi		16:00 Chan	Biermann	15:50 Maezono
	16:20 Invited		16:20 Invited	Nakamura	16:10 Closing
	Shimizu		16:40 Booth	Shinaoka	
	17:00 Togashi		17:00 Sakai		
	17:20 Harada		17:20		
				Poster session	
			18:00		
			Banquet		
			20:00		

【組織委員】

今田正俊（東京大学）、大塚孝治（東京大学）、天能精一郎（神戸大学）、川島直輝（東京大学物性研究所）、山地洋平（東京大学）、藤堂眞治（東京大学）、大西裕也（神戸大学）、大越孝洋（東京大学）

以上

配布先 関係各位	報告書18	作成日 平成 26 年 8 月 28 日	
	xTAPP Developers Meeting 2014	No. CMSI-14-18	
			作成

【開催要項】

日時: 2014 年 8 月 27 日(水)13:00-17:00
場所: 東京大学(本郷キャンパス)理学部 4 号館 3 階 1320 号室
主催: TAPP コンソーシアム、
新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン:
複合相関と非平衡ダイナミクス」 A02-5 班
共催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
世話人: 常行真司(東大)、山内 淳(慶応大)
参加者: 34 名

【プログラム】

13:00-14:00	吉本芳英(東大)	開発者のための xTAPP 入門
14:00-14:20	吉澤加奈子(東大)	xTAPP の GUI (コード名"TAPIOCA")
14:20-14:50	中村和磨(九工大)	TAPP-GW コード開発の進捗
14:50-15:10	Break	
15:10-15:40	河村光晶(東大)	応答関数計算にも使える改良テトラヘドロン法
15:40-16:10	山内 淳(慶応大)	xTAPP による格子欠陥系の XPS 計算
16:10-16:40	只野央将(東大)	フォノンと熱伝導率計算(コード名"ALAMODE")
16:40-17:00	山本良幸(東大)	TC 法、拡散量子モンテカルロ法への接続

以上

配布先 関係各位	報告書19	作成日 平成 26 年 9 月 10 日	
	ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会 (第 1 回)	No. CMSI-14-19	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

開催日： 平成 26 年 8 月 30 日(土) 13:00～15:30

開催場所： ステーションコンファレンス東京 5 階 503CD 会議室

参加者： 50 名

【開催概要】

7 月 24 日に実施された文科省主催の「第4回ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」において、9つの重点課題と4つの萌芽的課題*が示され、8 月 20 日の最終回で決定されました。このポスト「京」プロジェクトは平成 26 年 9 月中に実施可能性調査研究の公募が開始され、今年度中に実施され、その後、平成 27 年度の準備研究を経て平成 28 年度から 5 年間の委託研究が開始される予定です。各課題にひとつの代表機関が選定され、研究開発体制を構築して課題を推進するという計画が示されています。

HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」の戦略機関である東大物性研・分子研・東北大金研は、物質科学が関連する課題⑤、⑦、⑩の代表機関や主たる協力機関として本プロジェクトに申請する準備を開始しています。本会議では、8 月 20 日に決定された課題の説明を行い、課題を解決していくための研究開発内容を検討しました。また、各課題の成果の出口を明確に示す必要があるため、企業の方も多数参加しました。

【プログラム】

13:00～13:20: ポスト「京」プロジェクトの概要(東大理 常行真司)

13:20～13:50: 課題⑤説明 「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」
(分子研 高塚和夫)

13:50～14:20: 課題⑦説明 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
(東大物性研 川島直輝、東北大金研 毛利哲夫)

14:20～14:50: 課題⑩説明 「基礎科学のフロンティア ― 極限への挑戦」
(東大工 今田正俊、東北大金研 毛利哲夫、東大理 常行真司、東大物性研 川島直輝)

14:50～15:30: 質疑応答・意見交換(東大理 常行真司)

【主催・協力】

主催： 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター(CCMS)

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)

東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)

協力： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

以上

配布先 関係各位	報告書20	作成日 平成 26 年 11 月 19 日	
	物性研究所計算物質科学研究センター 第 4 回シンポジウム 物性研スーパーコンピュータ共同利用報告会	No. CMSI-14-20	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 2014 年 11 月 12 日(水) - 14 日(金)

会場: 東京大学物性研究所 6 階 大講義室

参加者: 70 名

【開催概要】

本年度は、物性研スパコン共同利用スパコンの現システム A, B の最終年度にあたり、この2システムを用いた5年間の研究の総括をする時期となっている。また、京コンピュータと高い互換性を有するシステム C の供用開始から1年半がたち、数々の成果が上がっている。

本年度はスパコン共同利用の成果報告会と計算物質科学センター(CCMS)シンポジウムを合同で開催した。本研究会では、物性研スパコンの共同利用ユーザに加えて、他の計算機物質科学や物性実験の研究者を交え、最新の研究成果の情報交換し、また大規模計算の研究の産業応用、今後のさらなる物質科学の研究の発展の方向について議論した。

また、ポスト「京」のフラッグシップ計算機の検討が進み、そこで取り組むべき計算課題が発表されており、計算物質科学の分野でこれらの課題にどのように取り組んでいくのかについても議論した。

【プログラム】

11/12(水)	13:00	挨拶／瀧川所長(物性研)
	13:10	Computing Materials: past, present, future／Stefan Bluegel(Juelich)
	13:50	秩序構造ペロブスカト酸化物における磁気相互作用／島川祐一(京大)
	14:30	第一原理低次スケーリング電子状態計算手法の開発と実問題への応用／尾崎泰助(物性研)
	15:10	BREAK
	15:40	計算材料科学の鉄鋼応用／澤田英明(新日鉄住金)
	16:20	物質科学計算アプリ紹介／尾崎泰助、赤井久純、藤堂眞治、吉本芳英(物性研/東大)
	17:00	ポスト「京」に対する物性コミュニティからの提案の状況／常行真司(東大)
	17:40	軟 X 線分光によるリチウムイオン電池電極材料のオペランド解析／朝倉大輔(産総研)
	18:30	懇親会
11/13(木)	10:00	< 巻頭論文講演 > 銅酸化物の高温超伝導機構 - 隠れたフェルミオンの存在の数値計算による実証／酒井志郎(理研)
	10:40	2 次元一般化 Heisenberg 模型の有限温度転移／鈴木隆史(兵庫県立大)
	11:05	BREAK
	11:30	層状ペロブスカイト構造を持つ 5d 遷移金属イリジウム酸化物における新奇的な絶縁体と超伝導 柚木清司(理研)
	12:10	拡張したキタエフ・ハイゼンベルク模型の密度行列繰り込み群法による研究 新城一矢(京大)
	12:35	LUNCH
	13:40	< 特別講演 > 全固体電池表面界面の第一原理計算解析／館山佳尚(NIMS)

14:20 MTO+APW を用いた 混合基底 法にもとづく 準粒子 自己無撞着 GW 法とその応用
小谷岳生(鳥取大)

14:45 Poster Session

16:10 <巻頭論文講演>
「京」での 100 ナノ電子状態計算とその展望 星健夫(鳥取大)

16:50 グラフェンおよび六方晶窒化ホウ素原子膜からなる系の幾何構造と電子物性
斎藤晋(東工大)

17:15 時間依存密度汎関数法のナノスケール電子放射と電子回折への応用
渡辺一之(東京理科大)

17:40 終了

11/14(金) 10:00 多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析／渡辺宙志(物性研)

10:25 変形 Lennard-Jones 系の基準化に向けて／淵崎員弘(愛媛大)

10:50 BREAK

11:15 <巻頭論文講演>
構造ガラスのダイナミクスの大規模数値計算 - 動的不均一性を視点として -
芝隼人(物性研)

11:55 モデル微生物系における流体力学的相互作用の効果／古川亮(東大)

12:20 ガラス転移におけるフラジリティと動的不均一性／金鋼(新潟大)

12:45 Closing

【主催・協力】

主催： 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター(CCMS)
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)
東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)

協力： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

以上

配布先 関係各位	報告書21	作成日 平成 26 年 11 月 18 日	
	第 5 回 CCMS (柏) ハンズオン: AkaiKKR チュートリアル 【The 5th CCMS Kashiwa Hands-on: AkaiKKR】	No. CMSI-14-21	
			作成

【開催要項】

日時: 平成 26 年 11 月 12 日(水) - 14 日(金)

会場: 東京大学物性研究所 6 階 大講義室

参加者: 6 名

【開催概要】

AkaiKKR(旧 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、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、物性研に設置した PC クラスター psi 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う。

以上

配布先 関係各位	報告書22	作成日 2014 年 9 月 1 日	
	CMSI ハンズオン(本郷): OpenACC 2.0 による GPGPU コンピューティング	No. CMSI-14-22	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程: 平成 26 年 8 月 28 日(木) 10:00～17:30
 会場: 東京大学理学部 1 号館 447 号室
 講師: Michael Wolfe (The Portland Group)
 受講料: 無料
 主催: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI), NVIDIA Corporation
 受講人数: 21 名

【開催概要】

CMSI では、「京」だけでなく、今後のスーパーコンピュータの活用に向け、GPGPU やアクセラレータを利用するアプリケーションの開発も支援していきたいと考えており、その一環として、2014 年度の CMSI 配信講義「CMSI 科学技術特論 B」でも、NVIDIA 社の協力をいただき、OpenACC の講義を開催しました。このたび、PGI コンパイラの開発責任者である Michael Wolfe 氏をお招きして、配信講義等で GPGPU の概要を理解した方に向けて、GPGPU に向けて PGI コンパイラが生成するコードに関する講演および、CMSI のテスト用 GPGPU クラスタを用いた実習を開催しました。

◆本講習会の対象者◆

- * OpenACC 2.0 を用いた GPGPU コンピューティングに興味のある方
- * 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

【時間割】

10:00 - 12:00 Michael Wolfe 氏の講演を中心とした講義
 13:00 - 14:00 実習の準備(アカウント発行等含む)
 14:30 - 17:30 計算機を利用した実習

以上

配布先 関係各位	報告書23	作成日 2014 年 10 月 17 日	
	第 6 回 CCMS(柏)ハンズオン: ALPS チュートリアル	No. CMSI-14-23	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程: 平成 26 年 10 月 16 日(木) 13:00~17:00
 会場: 東京大学物性研究所 A614 号室
 講師: 藤堂眞治(東大院理/物性研)、松尾春彦(RIST)、諏訪秀麿(東大院理)
 受講料: 無料
 主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
 共催: 高度情報科学技術研究機構 (RIST)
 受講人数: 10 名

【開催概要】

ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations)プロジェクトは、量子スピン系、格子ボゾン系、強相関フェルミオン系など強相関量子格子模型のシミュレーションのためのオープンソースソフトウェアの開発をすすめている国際共同プロジェクトです。本プロジェクトでは XML や HDF5 に基づく共通入出力ファイル形式の提案、ソフトウェア開発の基盤となるライブラリ、解析や可視化のためのツール、シミュレーションプログラムなどの開発などを行っています。ALPS では、古典/量子モンテカルロ法、厳密対角化、DMRG、動的平均場近似のための QMC ソルバなど、基本的かつ重要なアルゴリズムに基づくシミュレーションプログラムが用意されており、計算物理の専門家でなくとも手軽にシミュレーションを始めることができます。また、ALPS では並列シミュレーションのための多重並列スケジューラも整備されており、ユーザプログラムと組み合わせて使うことで、ノートPCからスーパーコンピュータ「京」のような超並列環境までシームレスに並列シミュレーションを実行することが可能となっています。

今回の講習会では、量子スピン/格子ボゾン系の厳密対角化/量子モンテカルロ法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、物性研のワークステーションクラスタを用いた ALPS 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いました。また、参加者がシミュレーションしたいと考えている模型に関しての個別コンサルティングも行いました。

◆本講習会の対象者◆

- ・ALPS アプリケーションを用いた量子スピン系/格子ボゾン系の厳密対角化/量子モンテカルロに興味のある方
- ・UNIX でのファイル操作、編集、コマンドの実行等に慣れている方

【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)
 14:30-15:00 休憩
 15:00-16:00 Python, pyalps, matplotlib 入門
 16:00-17:00 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 24	作成日 平成 26 年 12 月 18 日	
	第 7 回 CCMS (柏) ハンズオン: feram チュートリアル	No. CMSI-14-24	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成 26 年 12 月 17 日 (水) 13:00～17:00

会場： 東京大学物性研究所 A614 号室

講師： 西松毅 (東北大金研)

受講料： 無料

主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

共催： 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

受講者： 2 名

【開催概要】

feram は強誘電体に特化した高速な分子動力学シミュレーションプログラムです。フリーソフトウェアとして <http://loto.sourceforge.net/feram/> から配布しています。バルク強誘電体および強誘電体薄膜キャパシタの様々な物性をシミュレートすることができ、特に強誘電体ドメイン構造やヒステリシスループ、電気熱量効果などのシミュレーションが得意です。パソコンからスパコンまでさまざまなプラットフォームで動作可能。

今回のチュートリアルでは、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いました。

MateriAppsLive <http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>が入った USB メモリを無料配布した。

【対象者】

- * feram を用いた強誘電体のシミュレーション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

以上

配布先 関係各位	報告書25	作成日 平成 27 年 3 月 12 日	
	第 8 回 CCMS (柏) ハンズオン: OpenMX チュートリアル	No. CMSI-14-25	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程: 平成 27 年 3 月 11 日(水)13:00～17:30

会場: 東京大学物性研究所 6F A612 号室

講師: 尾崎泰助(東大物性研)

Truong Vinh Truong Duy(東大物性研)

受講料: 無料

主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

受講者: 15 名

【開催概要】

密度汎関数理論、数値局在基底法、擬ポテンシャル法に基づく汎用第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の ユーザー向けのハンズオンワークショップを開催いたします。日本のグループが中心となって開発を進めている OpenMX は GNU-GPL の規約で無償公開されており、どなたでも自由に使用できます。OpenMX を用いた応用計算として、シリセン、グラフェン、磁石材料、鉄鋼材料、トポロジカル絶縁体などの幅広い物質群への適用研究がこれまでに進んでいます。

本コースではこれから OpenMX を用いた第一原理計算を始めてみたい方を対象として、計算原理、インストール方法、使用方法を議論し、簡単な実習計算を体験していただいた。またすでに計算を始めておられる方からは、疑問に感じる点を直接、開発者に質問する機会となった。

(本ハンズオンコースは 2014 年 10 月 10 日、CMSI 神戸拠点にて行われた第 19 回 CMSI 神戸ハンズオンの柏版です)

【対象者】

* OpenMX を用いた第一原理電子状態計算に興味のある方。

【プログラム】

13:00-13:30 OpenMX の概要

13:30-13:45 インストール方法

13:45-14:00 実習内容(1)の説明

14:00-14:40 各自実習(1)

14:40-14:50 休憩／コーヒープレーク

14:50-15:50 計算の実際と実習内容(2)の説明

15:50-17:00 各自実習(2)

17:00-17:30 質疑・応答

以上

配布先 関係各位	報告書26	作成日 平成 26 年 4 月 18 日	
	第 8 回 CCMS (柏) ハンズオン: OpenMX チュートリアル	No. CMSI-14-26	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程: 平成 26 年 4 月 17 日 (木) 13:30～17:00

会場: 分子科学研究所 研究棟 301 会議室

講師: 佐藤 三久 (筑波大)

「演算加速機構を持つ将来の HPCI システムに関する調査研究」

梅田 宏明 (筑波大)

「Development of FMO program for recent HPC systems:K-computer and GPGPU cluster」

受講者: 20 名

【主な内容】

ポスト京向けアクセラレータについてアーキテクチャからプログラミングの留意点ほか。

システム FS での分子科学アプリの評価結果 MODYLAS、OpenFMO、GAMESS など。

全体質疑

以上

配布先 関係各位	報告書27	作成日 平成 26 年 5 月 22 日	
	第 1 回 TCCI インフォーマルミーティング	No. CMSI-14-27	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成 26 年 5 月 21 日(水) 10:00～18:25 頃
 会場： 名古屋大学(東山キャンパス)ES 総合館 ES ホール
 主催 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 受講者： 81 名

【開催趣旨】

平成26年度の予算としてポスト京(エクサスケール・コンピュータ)の開発の予算が付き、理研 AICS が中心となり開発が始まっております。ポスト京についてもアプリケーションが重要なため、ハードの開発開始と併せて、取り組むべき社会的・科学的課題の選定が始まります。昨今この流れが急速に進んでおり、化学・分子科学の将来においてもきわめて大きな影響を与えると考えられる動きが、国のレベルで進んでいます。

TCCI では、次世代の研究環境を高いレベルで整備しておくことも一つの役割ではないかと認識しており、組織としての残り2年間にはそれに関わる作業のお手伝いをしていく責任を感じています。それは、次世代の研究者の研究課題やあり方に直接方向性を出す、あるいは、TCCI が調整して研究課題の応募に当たる、などというものでは全くありません(研究課題への応募は各研究者個人あるいはグループで為される方向になるだろうと思われます、それに対して TCCI が何かする、と言うことはありません)。先生方と「学生」の研究環境を含めて、研究の「場」は自ら高めていくものであると同時に、TCCI としては、次世代によってなされるであろう自発的な研究環境の構築のきっかけが提供できればと考えています。

【プログラム】

座長:岡崎 進(名大院工/分子研)

セッション 1:展望と多体系方法論

- 10:00－10:25 開会の辞およびポスト京について
高塚 和夫(東大院総合文化／分子研)
- 10:25－10:30 ご挨拶
中辻 博(量子化学研究協会研究所)
- 10:30－11:00 課題提案1
「次世代コンピューターによる Ingenio 計算物質科学の実現を目指して」
杉本 学(熊本大院自然科学)
- 11:00－11:30 課題提案2
「科学できるプログラマーとプログラミング環境、プログラムできる科学者」
関野 秀男(豊橋技科大院情報・知能工学系)
- 11:30－12:00 課題提案3
「物質デザインのための確率論的手法に基づく量子多成分系手法の高度化」
立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)

- 12:00－12:30 課題提案4
「マルチスケールシミュレーションを展開して進むマクロ化学現象の計算分子科学」
長岡 正隆(名大院情報科学)
- 12:30－13:50 昼食・休憩

座長: 榊 茂好(京大福井センター)

セッション 2: 環境と触媒

- 13:50－14:20 課題提案5
「分離のゼロエネルギー化を目指す計算分子科学」
松林 伸幸(阪大院基礎工)
- 14:20－14:50 課題提案6
「水資源の高度利用への計算化学の取り組み」
森田 明弘(東北大院理)
- 14:50－15:20 課題提案7
「エネルギー・環境問題解決に資する大規模理論計算先導型革新的触媒開発への挑戦」
○武次 徹也(北大院理)
長谷川 淳也(北大触媒セ)
中井 浩巳(早大先進理工)
- 15:20－15:50 課題提案8
「グリーンケミストリーに向けた省資源高効率触媒の開発」
奥村 光隆(阪大院理)
- 15:50－16:10 休憩

座長: 高塚 和夫(東大院総合文化/分子研)

セッション 3: バイオと病理

- 16:10－16:40 課題提案9 「ナノバイオ分子デザイン」
林 重彦(京大院理)
○望月 祐志(立教大理)
- 16:40－17:10 課題提案10 「感染症」
篠田 渉(名大院工)
- 17:10－17:40 課題提案11 「相転移」
松本 正和(岡山大院自然科学)
- 17:40－18:10 全体討議
- 18:10－18:25 本日のまとめ
榊 茂好(京大福井センター)

以上

配布先 関係各位	報告書28	作成日 平成 26 年 9 月 10 日	
	ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会 (第 2 回)	No. CMSI-14-28	
			作成

【開催要項】

開催日： 平成 26 年 8 月 31 日(日) 13:00～15:30

開催場所： 自然科学研究機構 分子科学研究所 職員会館2階大会議室

参加者： 50 名

【開催概要】

7 月 24 日に実施された文科省主催の「第4回ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」において、9つの重点課題と4つの萌芽的課題*が示され、8 月 20 日の最終回で決定されました。このポスト「京」プロジェクトは平成 26 年 9 月中に実施可能性調査研究の公募が開始され、今年度中に実施され、その後、平成 27 年度の準備研究を経て平成 28 年度から 5 年間の委託研究が開始される予定です。各課題にひとつの代表機関が選定され、研究開発体制を構築して課題を推進するという計画が示されています。

HPCI 戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」の戦略機関である東大物性研・分子研・東北大金研は、物質科学が関連する課題⑤、⑦、⑩の代表機関や主たる協力機関として本プロジェクトに申請する準備を開始しています。本会議では、8 月 20 日に決定された課題の説明を行い、課題を解決していくための研究開発内容を検討しました。また、各課題の成果の出口を明確に示す必要があるため、企業の方も多数参加しました。

【プログラム】

13:00～13:20: ポスト「京」プロジェクトの概要(東大理 常行真司)

13:20～13:50: 課題⑤説明 「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」
(分子研 高塚和夫)

13:50～14:20: 課題⑦説明 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
(東大物性研 川島直輝、東北大金研 毛利哲夫)

14:20～14:50: 課題⑩説明 「基礎科学のフロンティア ― 極限への挑戦」
(東大工 今田正俊、東北大金研 毛利哲夫、東大理 常行真司、東大物性研 川島直輝)

14:50～15:30: 質疑応答・意見交換(東大理 常行真司)

【主催・協力】

主催： 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター(CCMS)

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)

東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)

協力： 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

以上

配布先 関係各位	報告書29	作成日 平成 26 年 9 月 30 日	
	第 2 回 TCCI インフォーマルミーティング	No. CMSI-14-29	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 2014 年 9 月 27 日(土) 13:00～
 会場： 名古屋大学(東山キャンパス)ES 総合館 ES ホール
 主催 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 協賛 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
 受講者： 37 名

【プログラム】

セッション 1: 会の趣旨、サブ課題5A

13:00－13:20 会の趣旨
 FS 立ち上げ WG
 13:20－13:40 課題提案1
 「高精度電子状態手法による高効率光エネルギー変換の理論的研究」
 天能 精一郎(神戸大院システム情報)
 13:40－14:00 課題提案2
 「有機系太陽電池・天然光合成の機構解明と新規エネルギー材料設計のためのシミュレーション」
 中嶋 隆人(理研AICS)
 14:00－14:20 課題提案3
 「有機系高効率太陽電池の理論設計」
 山下 晃一(東大院工)

セッション 2: サブ課題5B

14:20－14:40 課題提案4
 「二次電池、燃料電池の第一原理シミュレーションと高効率・高耐久性材料の提案」
 杉野 修(東大物性研)
 14:40－15:00 課題提案5
 「二次電池の全系シミュレーション - 複合化学反応機構の解明とマクロ化学現象シミュレータの開発-」
 長岡 正隆(名大院情報)
 15:00－15:20 課題提案6
 「燃料電池、二次電池用電解質膜、セパレータの材料設計技術の確立と MODYLAS-POSTK の開発」
 岡崎 進(名大院工)
 15:20－15:35 休憩

セッション 3:産応協、サブ課題7D

- 15:35－15:45 「産業界からポスト「京」重点課題プロジェクトへの期待」
茂本 勇(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会/東レ)
- 15:45－16:05 課題提案7
「複合分子集合系の大規模計算に基づくソフト材料の評価と探索」
松林 伸幸(阪大院基礎工)

セッション 4:サブ課題5C

- 16:05－16:25 課題提案8
「エネルギー資源および貯蔵としてのメタン・水素ハイドレートの利用」
田中 秀樹(岡山大院自然科学)
- 16:25－16:45 課題提案9
「大規模理論計算先導による革新的触媒開発への挑戦」
武次 徹也(北大院理)
- 16:45－17:05 課題提案10
「理論計算先導による CO₂ の分離回収再生システムの構築」
中井 浩巳(早大理工)
- 17:05－17:20 休憩

セッション 5:全体討議、まとめ

- 17:20－17:50 全体討議
- 17:50－18:00 本日のまとめ

以上

配布先	報告書30	作成日 平成 26 年 10 月 14 日	
関係各位	第3回 TCCI インフォーマルミーティング -ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発プロジェクトに向けて-	No. CMSI-14-30	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成 26 年 10 月 12 日(日) 13:00～17:20
会場： イオンコンパス名古屋駅前会議室5F ROOM A
主催 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点 FS 立ち上げ WG
協賛 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
受講者： 24 名

【プログラム】

セッション 1: 会の趣旨、WG提案

13:00－13:20 開会の辞: 榊茂好(京大福井センター)
13:20－13:40 会の趣旨: 岡崎進(FS 立ち上げ WG/名大院工/分子研)
13:40－14:10 サブ課題5A
「新エネルギー源の創出・確保」(発表 15 分、質疑 15 分)
天能 精一郎(神戸大院システム情報)
14:10－14:40 サブ課題5B
「エネルギーの変換と貯蔵」(発表 15 分、質疑 15 分)
杉野 修(東大物性研)
14:40－15:10 サブ課題5C
「エネルギー資源の高度利用」(発表 15 分、質疑 15 分)
田中 秀樹(岡山大院自然科学)
15:10－15:40 サブ課題7D
「次世代機能性化学品の分子設計」(発表 15 分、質疑 15 分)
松林 伸幸(阪大院基礎工)
15:40－15:55 休憩

セッション 2: ご提案

15:55－16:15 課題提案1
「次世代二次電池システムの理論計算設計」(発表 15 分、質疑 15 分)
館山 佳尚(物材機構)
16:15－16:35 課題提案2
「超大規模並列量子化学計算アルゴリズム及びプログラム開発」(発表 15 分、質疑 15 分)
石村 和也(分子研)

セッション 3: 全体討議、まとめ

16:35－17:05 全体討議
17:05－17:20 本日のまとめ

以上

配布先 関係各位	報告書31	作成日 平成 26 年 10 月 22 日	
	第5回 TCCI 研究会	No. CMSI-14-31	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日程： 平成 26 年 10 月 17 日(金) 13:30-18:30 ～18 日(土) 9:00-16:15
 会場： 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
 主催 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 受講者： 73 名

【プログラム】

第 1 日目:10 月 17 日(金) 13:30～18:30

座長:佐藤 啓文(京大院工)

セッション 1:

- 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)
- 13:40－13:45 ご挨拶
川口 悦生(文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室長)
- 13:45－14:15 TCCI 報告1
「CMSI 第一部会分子科学重点課題の進捗状況」
天能 精一郎(神戸大院シス情報)
- 14:15－14:45 TCCI 報告2
「拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明」
岡本 祐幸(名大院理)
- 14:45－15:30 招待講演1
「X 線自由電子レーザーSACLA の現状と展望」
矢橋 牧名(理研)
- 15:30－15:45 休憩

座長:天能 精一郎(神戸大院シス情報)

セッション 2:

- 15:45－16:00 TCCI 報告3
「ポスト「京」時代の効率的なソフトウェア開発と整備」
石村 和也(分子研)
- 16:00－16:15 TCCI 報告4
「ポスト「京」への MODYLAS 対応の展望と課題」
安藤 嘉倫(名大院工)
- 16:15－17:00 招待講演2
「ポスト京コンピュータ開発概要」
石川 裕(理研 AICS)
- 17:00－17:30 TCCI 報告5
「複合化学反応シミュレーションに向けて～マルチスケールシミュレーションから分子技術へ」
長岡 正隆(名大院情報)

セッション 3:ポスターセッション

17:30－18:30 ポスターセッション
18:30－20:00 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:10月18日(土) 9:00～16:15

座長:山下 晃一(東大院工)

セッション 4:

9:00－9:45 招待講演3
「二酸化炭素分離回収技術の現状」
中尾 真一(RITE)
9:45－10:15 TCCI 報告6
「ナノスケール反応系のダイナミクスと制御の計算化学基盤の確立」
中井 浩巳(早大先進理工)
10:15－10:30 休憩

座長:中井 浩巳(早大先進理工)

セッション 5:

10:30－11:15 招待講演4
「太陽光水素製造を目指した可視光応答型光触媒系の開発」
阿部 竜(京大院工)
11:15－11:45 TCCI 報告7
「太陽光エネルギー変換過程の理解と予測に向けた理論計算化学」
山下 晃一(東大院工)
11:45－13:30 昼食・休憩

座長:柳井 毅(分子研)

セッション 6:

13:30－14:15 招待講演5
「金属錯体を利用した多電子酸化還元触媒の開発」
正岡 重行(分子研)
14:15－14:45 TCCI 報告8
「原子分割エネルギーによる反応動力学解析 ―電場応答系への応用―」
河野 裕彦(東北大院理)
14:45－15:00 休憩

座長:斉藤 真司(分子研)

セッション 7:

15:00－15:45 招待講演6
「生体分子モーターダイナミクスの1分子計測:構造解析と理論予測との協奏を目指して」
飯野 亮太(分子研)
15:45－16:15 TCCI 報告9
「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」
岡崎 進(名大院工/分子研)

以上

配布先	報告書32	作成日 平成 26 年 1 月 26 日	
関係各位	計算分子科学研究拠点(TCCI) 第4回産学連携シンポジウム 産応協「第31回スーパーコンピューティング・セミナー」 「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」	No. CMSI-14-32	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時 平成 26 年 1 月 23 日(金) 13:00～17:00 及び 懇親会
 場所 東大 弥生講堂 一条ホール
 主催 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)
 協賛 京都大学触媒・電池元素戦略研究拠点(ESICB)
 公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)
 参加者: 85 名

【開催趣旨】

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ございます。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おります。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ため産学連携シンポジウムを開催しました。

【プログラム】

13:00－13:05 開会の辞 高塚 和夫(東大院総合文化／分子研)
 13:05－13:10 ご挨拶 伊藤 宏幸(産応協／ダイキン工業)
 13:10－13:15 セミナー概要に関する挨拶 (産応協)
 13:15－13:40 「スーパーコンピュータ開発・利用の取り組みについて」
 川口 悦生(文部科学省 研究振興局参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室長)
 13:40－14:25 「触媒・電池元素戦略研究拠点における実験と理論の協力強化に向けて」
 江原 正博(分子研)
 14:25－15:10 「元素戦略に基づく触媒設計における理論計算の役割」
 武次 徹也(北大院理)
 15:10－15:25 休憩
 15:25－16:10 「超並列量子化学計算プログラム SMASH の開発・公開及び応用計算」
 石村 和也(分子研)
 16:10－16:55 「三井化学における触媒反応解析」
 中野 隆志(三井化学)
 16:55－17:00 閉会の挨拶 (産応協)

以上

配布先 関係各位	報告書33	作成日 平成 26 年 5 月 29 日	
	CMSI 第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第 1 回研究会	No. CMSI-14-33	
			作成
			CMRI 門脇

【開催要項】

日程： 平成 26 年 5 月 28 日(水)
 場所： 産業技術総合研究所 関西センター 人間棟会議室
 参加費： 無料
 主催： 計算材料科学研究拠点 (CMRI)
 参加者： 10 名

【概要】

重点課題「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」の本年度第一回の研究会を開催した。参加者数は 10 名(産 2、官 5、学 3)で 5 件の研究報告があった。

【内容】

- 始めに：香山：プロジェクトの概要、経緯、本年度の計画について概説
- ①澤田(新日鉄住金)：TiC/Fe 界面の整合界面、部分整合界面のオーダーN 第一原理計算と歪エネルギーの見積もりによる遷移サイズの見積もり、実験との比較、今後の計画等について紹介
 - ②譚田(阪大)：Fe 中のらせん転位芯、および Si との相互作用の第一原理計算について、VASP の結果との比較やポテンシャル基底・初期構造設定や緩和方法、セルなど、状況と問題点の紹介・議論
 - ③尾崎(北陸先端大)：OpenMX の概要、京での最適化、Fe 用の擬ポテンシャルと局在基底の最適化についての紹介と報告
 - ④板倉(原研)：転位芯の第一原理計算の方法論、Fe 中の転位芯理解の現状、課題についての詳細な報告
 - ⑤香山、Sharma(産総研グループ)：局所エネルギー、局所応力法開発の現状、TiC/Fe の整合界面への適用結果の報告
- 最後に平成 26 年度の各種研究会の予定、計画、「京」の具体的な使用の打ち合わせ等を行った。

以上

配布先 関係各位	報告書34	作成日 平成 26 年 6 月 27 日	
	CMRI ポスト京に関する研究会	No. CMSI-14-34	
			作成
			CMRI 門脇

【開催要項】

日程： 平成 26 年 6 月 26 日(木)
場所： 東北大学東京分室
参加費： 無料
主催： 計算材料科学研究拠点 (CMRI)
参加者： 15 名

【概要】

CMSI 事務局の古宇田氏と拠点長の毛利より、ポスト京に関するこれまでの経緯と進展状況に関して説明と報告があった。現「京」プロジェクトの研究成果をポスト京へスムーズに展開する為には、「京」プロジェクトの完遂が重要であることを確認し、現時点での「京」プロジェクトの遂行状況と今後の展開に対する発表・報告を行った。参加者は 15 名で、特に若手研究者中心の発表・自由討論を 10 件行い極めて盛会であった。

【内容】

14:00 ポスト京に関する経緯と進展状況の説明と報告（毛利、古宇田、寺田）
「京」プロジェクトの進捗状況と今後への展開
発表・報告者は以下の通り
澤田(新日鉄住金)、譚田(阪大)、西松(東北大)、大野(宗)(北大)、澁田(東大)、
高木(京工繊大)、小野(横浜国大)、君塚(阪大)、田中(関西産総研)、吉矢(阪大)
17:00 終了

以上

配布先 関係各位	報告書 35	作成日 平成 26 年 10 月 7 日	
	CMSI 第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第2回研究会	No. CMSI-14-35	
			作成
			CMRI 門脇

【開催要項】

日程： 平成 26 年 10 月 6 日(月)
 場所： 産業技術総合研究所 関西センター 人間棟会議室
 参加費： 無料
 主催： 計算材料科学研究拠点 (CMRI)
 参加者： 8 名

【概要】

重点課題「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」の本年度第二回の研究会を開催した。参加者数は 8 名(産 1、官 4、学 3)で研究報告が 5 件、勉強会の発表が 2 件あった。

【内容】

- ①研究の進行状況や今後の計画、下期の「京」での研究計画等
 澤田(新日鉄住金)、譚田(阪大)、板倉(原研)、Sharma(関西産総研)
- ②ポスト「京」での構造材料等のプロジェクト提案等についての議論
 香山より状況報告。
- ③勉強会
 山田泰徳(東北大)及び 佐原亮二(物材機構)

以上

配布先 関係各位	報告書36	作成日 平成 26 年 11 月 12 日	
	CMRI 研究会	No. CMSI-14-36	
			作成
			CMRI 門脇

【開催要項】

日程： 平成 26 年 11 月 10 日(月)～11 日(火)

場所： 東北大学金属材料研究所 講堂

参加費： 無料

主催： 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

参加者： 53 名

【概要】

東北大学金属材料研究所にて CMRI の年会を開催した。この内、初日から 2 日目のお昼までを International Workshop on Multiscale Computational Materials Science (上の (2)国際会議② に記載)とし、第 2 日目の午後からを CMRI 研究会とした。参加者は 53 名を数え、特別講演 1 件、一般講演 3 件を行った。

”「研究」と「社会の課題」との間”なる特別講演は、講演者の VCAD 開発の経緯・経験を中心に講演がなされたが、本 CMRI のプロジェクト遂行の困難さと軌を一にするとところも多く、大変有用であった。又、シミュレーターの開発に対する産業界からの要請やコンソーシアムの結成などは、計算材料科学の背後での産との連携の重要性に通じるものであり、今後の連携に対して多くの示唆を得ることができた。

【内容】

CMRI 研究会セッション

セッション 1

座長：毛利 哲夫

13:30 － 14:30

[特別講演] 「研究」と「社会の課題」との間

牧野内 昭武

理化学研究所

セッション 2

座長：香山 正憲

14:40 － 15:30

A-USC プロジェクトの概要

福田 雅文

(一般社団法人)高効率発電システム研究所

15:30 － 16:20

A-USC 材料の非破壊評価における材料計算科学への期待

西井 俊明, 森安 勝浩

電源開発(株)

16:20 － 17:10

金属材料における拡散と変形の原子論的解析

尾方 成信

大阪大学

以上

配布先 関係各位	報告書37	作成日 平成 26 年 12 月 5 日	
	The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design	No. CMSI-14-37	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 平成 26 年 12 月 1 日(月)～3 日(水)

場所: 小柴ホール(東大本郷キャンパス内)

参加者: 136 名

【Invited Speakers】

- Zhaojun Bai (University of California, Davis, USA)
- Silke Bierman (Ecole Polytechnique, University Paris-Saclay, Palaiseau, France)
- Roberto Car (Princeton University, Princeton, USA)
- Eberhard Gross (Max Planck Institute, Halle, Germany)
- Kei Hiraki (University of Tokyo, Tokyo, Japan)
- Takeo Hoshi (Tottori University, Tottori, Japan)
- Manabu Kiguchi (Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan)
- Steven Louie (University of California, Berkeley, USA)
- Talat S. Rahman (University of Central Florida, USA)
- Ersoy Sasioglu (Forschungszentrum, Jülich, Germany)
- Yoshitaka Tateyama (National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japan)

【Organizing Committee】

Masatoshi Imada, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Mary Inaba, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Hiroshi Nakanishi, Osaka Univ., Osaka, Japan
Atsushi Oshiyama, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan, Chair
Kazunori Sato, Osaka Univ., Osaka, Japan
Yasutami Takada, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Daisuke Takahashi, Univ. of Tsukuba, Tsukuba, Japan
Shinji Tsuneyuki, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Satoshi Watanabe, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Takahisa Yamato, Nagoya Univ., Nagoya, Japan
Shao-Lian Zhang, Nagoya Univ., Nagoya, Japan

【Advisory Board】

Takeo Fujiwara, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Sumio Iijima, Meijo Univ., Nagoya, Japan
Yoshio Oyanagi, Kobe Univ., Japan
Kiyoyuki Terakura, JAIST, Ishikawa, Japan
Masaru Tsukada, WPI-AIMR, Sendai, Japan

【Local Committee】

Masatoshi Imada, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Mary Inaba, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Atsushi Oshiyama, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Shinji Tsuneyuki, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan
Satoshi Watanabe, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan

以上

配布先 関係各位	報告書38	作成日 平成 26 年 12 月 26 日	
	ACCMS-VO9 (The 9th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization)	No. CMSI-14-38	
			作成
			CMRI 門脇

【開催要項】

日程： 平成 26 年 12 月 20 日(土)~22 日(月)

場所： 沖縄科学技術大学院大学

参加者： 106 名

【概要】

ACCMS は CMRI の運営委員の一人である川添名誉教授の研究室が中心となって開催をしているものであり、この分野に活躍する外国人研究者、特にアジア地域の研究者との交流に実をあげてきた。CMRI では、メンバーの主催する関連会議を通じて国際連携の推進を図るべく、今年度もこれまでに引き続いて ACCMS の年会を支援した。参加人数は 106 名を数え、基調講演 2 件、招待講演 11 件、一般講演 34 件、ポスター発表 34 件と、極めて盛会であった。アジアの計算材料科学の振興に対して着実に大きな貢献をしている。

【内容】

Opening Remarks and a Special Talk (9:00 – 9:30)

Y. Kawazoe

“50 years of DFT and its Applications from Molecules to Bulk Materials”

Session 1 (9:30 – 10:10) Keynote Talk 1

Chair: G. P. Das

“Theory and Computer Simulations for Discovery of Materials”

Umesh V Waghmare

Theoretical Sciences Unit, J Nehru Centre for Advanced Scientific Research, Jakkur PO, Bangalore 560 064 INDIA

Session 2 (10:10 – 11:35) Gas Production and Storage Materials

Chair: H. Mizuseki

1. (Invited) “Clathrate hydrates as medium for hydrogen storage and self-preservation phenomena”

V. R. Belosludov, Yu.Yu. Bozhko, R.K. Zhdanov, O. S. Subbotin, R.V. Belosludov, and Y. Kawazoe

Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS, Novosibirsk, Russia

2. (Oral) “Diffusivity of small gas molecules through porous graphene”

Sirichok Jungthawan, Pakpoom Reunchan, and Sukit Limpijumnong

School of Physics and NANOTEC-SUT Center of Excellence on Advanced Functional Nanomaterials, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima 30000, Thailand

3. (Oral) “Theoretical Study on Gas Separation in MOF Structures”

Rodion Belosludov and Y. Kawazoe

Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai, 980-8577, Japan

4. (Oral) “Theoretical study on Hydrogen Production and Storage”

Jyh-Chiang Jiang

Department of Chemical Engineering, National Taiwan University of Science and Technology, Taipei, 106, Taiwan, R.O.C.

5. (Oral) “Hydrogen adsorption on carbon-based materials: Application in magnetism and energy storage”

Ahmad Ranjbar

Computational Materials Science Research Team, RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS), Kobe, Hyogo 650-0047, Japan

11:35 – 12:45 Lunch

Session 3 (12:45– 14:40) Nanomaterials

Chair: T. Inerbaev

1. (Invited) “Photodissociation dynamics of ClOOCl at wavelength longer than 300 nm”

Julien Fremont, Kaito Takahashi

Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei, 10617 Taiwan

2. (Invited) “Ferromagnetism in Mg-doped AlN Surfaces and Nanowires”

Sandhya Chintalapati, Lei Shen, and Yuan Ping Feng

Department of Physics, National University of Singapore, Singapore

3. (Invited) “The emerging new family of two dimensional nanosheets”

G. P. Das

Department of Materials Science, Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Kolkata - 700032, INDIA

4. (Invited) “Strong Electronic Interactions in Simple Cubic Calcium under Pressure”

Udomsilp Pinsook, Teerachote Pakornchote, Prutthipong Tsuppayakorn-aek, Thiti Bovornratanaraks, Sornthep Vannarat

Department of Physics, Faculty of Science, Chulalongkorn University, Bangkok 10330, Thailand

5. (Oral) “Production of Multi-Element Clusters by Cluster-Cluster-Collisions”

Hideho Odaka and Masahiko Ichihashi

Cluster Research Laboratory, Toyota Technological Institute: in East

Tokyo Laboratory, Genesis Research Institute, Inc., 717-86 Futamata, Ichikawa, Chiba 272-0001, Japan

14:40 - 14:55 Coffee Break

Session 4 (14:55 - 16:45) Carbon-related Materials

Chair: R. Sahara

1. (Invited) “Topological Node-Line Semimetal in Three Dimensional Graphene Networks”

Hongming Weng, Yunye Liang, Qiunan Xu, Rui Yu, Zhong Fang, Xi Dai, and Yoshiyuki Kawazoe

Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, and Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2. (Invited) “Electronic and magnetic properties of antidot patterned graphene superlattices”

G. Chen, Y. Y. Liang, and Y. Kawazoe

Department of Physics, University of Jinan, Jinan, Shandong 250022, P. R. China

3. (Oral) “Magnetic properties and quantum phase of boron-carbon nanostructures”

Jun Ni

Department of Physics and State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, People's Republic of China

4. (Oral) “Challenges of graphene towards applications”

V. Nam Do, H. Anh Le, S. Ta Ho, D. Chien Nguyen and T. Le

Advanced Institute for Science and Technology (AIST), Hanoi University of Science and Technology (HUST), No. 01 Dai Co Viet road, Hanoi, Vietnam

5. (Oral) “High CO₂ capture capacity in stable metal-doped graphene systems: a theoretical trend study”

Sherif A. Tawfik, X. Y. Cui, S. P. Ringer, and C. Stampfl

School of Physics, The University of Sydney, Sydney, New South Wales, 2006, Australia

6. (Oral) “Decorating Graphene with Aromatic Structures via Coordination Bonds with Metal Atoms: Density Functional Theory Investigations”

Hung M. Le, Yoshiyuki Kawazoe, Duc Nguyen-Manh

Faculty of Materials Science, University of Science, Vietnam National University, Ho Chi Minh City, Vietnam

Session 5 (16:45 - 18:55) Crystal Properties and its Growth

Chair: G. Chen

1. (Invited) “Toward Accurate Calculation of Electronic and Structural Properties of Materials from First Principles”

Shinji Tsuneyuki

Department of Physics, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

2. (Invited) “Stable three-dimensional metallic carbon and boron nitride” Qian Wang
Center for Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China
 3. (Invited) “Electron Transport Characteristics of Low-dimensional Carbon Allotropes”
Eunyoung Choi and Sang Uck Lee
Department of Applied Chemistry, Hanyang University, Ansan, Korea 426-791
 4. (Invited) “Optical Properties of Graphene Derivatives”
Haibin Su
Nanyang Technological University, Singapore
 5. (Oral) “Modified Micro-Pulling Down Crystal Growth Method to Improve the Radial Distribution of Dopant”
Zhong Zeng, Long Qiao, Yaping Liu, Yuui Yokota, Yoshi Kawazoe, Akira Yoshikawa
Department of Engineering Mechanics, College of Aerospace Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China
 6. (Oral) “First-principles derivation of nonlinear elastic constants of single crystals”
Hajime Kimizuka, Takahiro Nishino, and Shigenobu Ogata
Department of Mechanical Science and Bioengineering, Osaka University, Osaka 560-8531, Japan
- Poster Session with Food and Drink (19:00 – 21:00) – 34 posters –
21st December, 2014 (Sunday)
Breakfast (7:00 – 8:15) in Sunmarina Hotel
Moving to OIST by Bus (starting time = 8:15)
Session 6 (9:00 – 9:40) Keynote Talk 2
Chair: B. J. Huang
“Three-dimensional Three-connected Carbene with 3,4,6-Fold Helical Chains in all-sp² Bonding Networks”
Jian-Tao Wang
Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
- Session 7 (9:40 – 12:10) Chemical Reactions
Chair: J. L. Kuo
1. (Invited) “Non-Equilibrium Charge Dynamics in Functionalized Semiconductor Nanostructures”
T. Inerbaev, D. Kilin
Physical and Technical Department, Gumilyov Eurasian National University, Mirzoyan str., 2, Astana, 010008, Kazakhstan
 2. (Invited) “DFT Calculations on Catalysts for Hydrogen Evolution Reaction”
Bing-Joe Hwang and Men-Che Tsai
Nanoelectrochemistry Laboratory, Department of Chemical Engineering, National Taiwan University of Science and Technology, Taipei 106, Taiwan, R. O. C.
 3. (Invited) “Strain induced tuning of electronic and thermoelectric properties of TMDs”
Atanu Samanta, Tribhuvan Pandey, Swastibrata Bhattacharyya, and Abhishek K. Singh
Materials Research Center, Indian Institute of Science, Bangalore 560012, India
 4. (Oral) “First Principles Studies of Water Splitting Mechanism on GaN Surfaces”
Yun-Wen Chen and Jer-Lai Kuo
Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, No. 1, Roosevelt Rd., Sec. 4, Taipei, 10617, Taiwan
 5. (Oral) “Organic solar cells based on capped-carbon nanotubes:
End-cap geometry dependence of the power-conversion efficiency”
Shota Ono, Kousei Tanikawa, Riichi Kuwahara, and Kaoru Ohno
Department of Physics, Graduate School of Engineering, Yokohama National Univ., Yokohama 240-8501, Japan
 6. (Oral) “Theoretical DFT Study on Structure and Chemical Activity of Complex Modified Structures”
Nurbosyn U. Zhanpeisov
Institute for Excellence in Higher Education, Tohoku University, Sendai, Japan
 7. (Oral) “Size Dependent Catalytic CO Oxidation Driven by Sub-Nano Platinum Clusters Directly Bound to Silicon Substrate”
Hisato Yasumatsu and Nobuyuki Fukui

Cluster Research Laboratory, Toyota Technological Institute: In East Tokyo Laboratory, Genesis Research Institute, Inc.
717-86 Futamata, Ichikawa, Chiba 272-0001, Japan

8. (Oral) “Real-Space Real-Time Calculations tuned for K-computer”

Yasunari. Zempo, Nobuhiko Akino, Masaya. Ishida, Eiji Tomiyama, and Hideki Yamamoto

Computer and Information Sciences, Hosei University, 3-7-2 Kajino Koganei, Tokyo 184-8584, Japan

12:10 – 13:30 Lunch and Group Photo

Session 8 (13:30 – 14:55) Defects, Surface, and Interface 1

Chair: Q. Sun

1. (Invited) “Adaptive-boost molecular dynamics simulation of thermally activated motions of crystal imperfections”

Shigenobu Ogata, Akio Ishii, Jun-Ping Du

Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Osaka 560-8531, Japan

2. (Oral) “Combined Density Function Theory and Photoluminescence Investigation into the Surface Modification of CdSe Quantum Dots and Ligands”

Hung-lung Chou

Graduate Institute of Applied Science and Technology, National Taiwan University of Science and Technology, Taipei 106, Taiwan R.O.C.

3. (Oral) “Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations of Gallium Nitride Chemical Mechanical Polishing Processes”

Kentaro Kawaguchi, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momiji Kubo

Fracture and Reliability Research Institute (FRRI), Graduate School of Engineering, Tohoku University, 6-6-11-703 Aoba, Aramaki, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan

4. (Oral) “First-Principles Study of $\text{Li}_4\text{xTi}_5\text{O}_{12}$ Surfaces and Phase Boundaries”

Shingo Tanaka, Mitsunori Kitta, Tomoyuki Tamura, Tomoki Akita, Yasushi Maeda, and Masanori Kohyama

Research Institute for Ubiquitous Energy Devices (UBIQEN), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Osaka 563-8577, Japan

5. (Oral) “High activity and low CO poisoning using noble metal-free catalysts: first principles study”

S. Sinthika, E. Mathan Kumar, K. Iyakutti, Ranjit Thapa

SRM Research Institute, SRM University, Kattankulathur-603203, Tamil Nadu, India

Coffee Break (14:55 – 15:10)

Session 9 (15:10 – 16:45) Defects, Surface, and Interface 2

Chair: R. Belosludov

1. (Invited) “Ferromagnetism of Mn-Containing Monolayers”

Qiang Sun

Department of Materials Science and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

2. (Invited) “Geometric and Electronic Structures of Mono- and Di-vacancies in Phosphorene”

Ting Hu and Jinming Dong

Group of Computational Condensed Matter Physics, National Laboratory of Solid State Microstructures and Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, P. R. China

3. (Oral) “Prediction of the trends on native defect properties in few-layer phosphorene”

Wei Wang, and Yoshiyuki Kawazoe

Department of Applied Physics, Xi'an University of Technology, Xi'an 710054, China

4. (Oral) “Effect of Trace Impurity on the Crystal Structure of Beta-Form Belite”

Ryoji Sakurada, Masami Uzawa, Yoshifumi Hosokawa, Yoshiyuki Kawazoe, and Abhishek Kumar Singh

Dept. of Civil Engineering, Akita National College of Technology, JAPAN

5. (Oral) “Spin spitting in centrosymmetric solids”

Mohammad Saeed Bahramy

Quantum-Phase Electronics Center and Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Tokyo 113-8655, Japan

Session 10 (16:45 – 18:10) Theories

Chair: Q. Wang

1. (Invited) “Multiscale Materials Design for Novel Physical and Chemical Properties of Energy-related Materials”

Hiroshi Mizuseki

Center for Computational Science, Korea Institute of Science and Technology (KIST), Hwarangno 14-gil 5, Seongbuk-gu, Seoul, 136-791, Republic of Korea

2. (Oral) “Multi-scale model of AFM using MD/continuum coupling method”

Yasuhiro Senda, Shuji Shimamura, Janne Blomqvist, Risto Nieminen

Department of Applied Science, Yamaguchi University, Yamaguchi, 755-8611, Japan

3. (Oral) “Modern ab-initio calculations based on Tomas-Fermi-Dirac theory with quantum, correlation and multi-shells corrections”

Sergey Seriy

Alekseev Nizhny Novgorod state technical university. Russia, 681013, Komsomolsk-on-Amur, Lenina 23-25

4. (Oral) “Multi-Physics Simulations on Semiconductor Processes by Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method”

Momoji Kubo

Fracture and Reliability Research Institute, Graduate School of Engineering, Tohoku University, 6-6-11-701 Aoba Aramaki, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan

5. (Oral) “Atomistic Observation of the Lithiation and Delithiation Behaviors of Silicon Nanowires using Reactive Molecular Dynamics Simulations”

hyun Jung, minho Lee, byung chul Yeo, kwang-ryeol Lee, and sang soo Han

Center for Computational Science, Korea Institute of Science and Technology (KIST), Hwarangno 14-gil 5, Seongbuk-gu, Seoul 136-791, Republic of Korea

18:10 – 19:00 Move to Sunmarina Hotel by Bus

19:00 – 21:00 Banquet with Sponsors Presentation

Celebration for the 50th Anniversary of DFT

Chair: Y. Kawazoe

1. ONR Global: Yoko Furukawa

2. CHAM Japan: Zuwei Kong

3. Network Dynamics: Yuki Sakamoto

22nd December, 2014 (Monday)

Breakfast (7:00 – 8:15) in Sunmarina Hotel

Moving to OIST by Bus (starting time = 8:15)

Session 11 (9:00 – 10:35) Bulk Materials 1

Chair: Y. P. Feng

1. (Invited) “Exceptionally Long-ranged Lattice Relaxation in Oxygen-deficient Ta₂O₅”

Yong Yang, O. Sugino, and Y. Kawazoe

Key Laboratory of Materials Physics, Institute of Solid State Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

2. (Invited) “Theory of Charge Compensation Phenomena for Polarization Discontinuities in Ferroelectric Superlattices”

Khian-Hooi Chew

Department of Physics, University of Malaya, 50603 Kuala Lumpur, Malaysia

3. (Oral) “Ab Initio Local-Energy and Local-Stress Calculations in Materials”

Masanori Kohyama, Somesh Kr. Bhattacharya, Hao Wang, Vikas Sharma, Shingo Tanaka, and Yoshinori Shiihara

UBIQEN, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Osaka, Japan

4. (Oral) “Robust interface states in two-dimensional photonic crystals”

Xueqin Huang, Meng Xiao, Z. Q. Zhang and C. T. Chan

Department of Physics and Institute for Advanced Study, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong, China

5. (Oral) “The Accurate Computation of the Negative Curie Temperature of PbTe”

Yue Chen and C. A. Marianetti

Department of Mechanical Engineering, The University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong

Session 12 (10:35 - 12:00) : Bulk Materials 2

Chair: N. U. Zhanpeisov

1. (Invited) “WEB 2.0 Based Nano Materials Design Platform”

Min-Ho Lee, Seungchul Kim, Sang-Soo Han, Kwang-Ryeol Lee

Center for Computational Science, Institute of Multidisciplinary Convergence of Matter, KIST, 39-1 Hawolgok-dong, Seongbuk-gu, Seoul, Korea

2. (Oral) “Anomalous Hall effect in Co-based Heusler compounds: an ab initio theoretical study”

Jen-Chuan Tung and Guang-Yu Guo

Center for General Education, China Medical University, Taichung 40402, Taiwan

3. (Oral) “First principle study of interaction between solute Si and screw dislocation in Fe-Si alloy”

Masato Wakeda and Shigenobu Ogata

Osaka University, Machikaneyama, Toyonaka 560-8531, Japan

4. (Oral) “First principles study of electronic structures and stability in structural materials”

Ryoji Sahara

National Institute for Materials Science, 1-2-1 Sengen, Tsukuba, JAPAN

5. (Oral) “Solvation mechanism of task specific ionic liquids in water: A combined investigation using classical molecular dynamics and density functional theory”

Surya V.J. Yuvaraj, Ravil Zhdanov, Rodion V. Belosludov, Vladimir R. Belosludov, Oleg S. Subbotin, Kiyoshi Kanie, Kenji Funaki, Atsushi Muramatsu, Takashi Nakamura, Hiroshi Mizuseki, and Yoshiyuki Kawazoe

Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai - 980-8577, Japan.

Closing Remarks (12:00 - 12:10) Y. Kawazoe

12:20 - 13:30 Bus Trip to Okinawa Churaumi Aquarium (with Lunch Box)

13:30 - 15:30 Okinawa Churaumi Aquarium

15:30 - 18:00 Bus to Naha City

【Sponsor】

Office of Naval Research Global (ONR Global)

Asian Office of Aerospace Research and Development (AOARD)

Okinawa Convention & Visitors Bureau

Okinawa Institute of Science and Technology (OIST)

Computational Materials Science Initiative

Computational Materials Research Initiative

THE KAJIMA FOUNDATION

CHAM-Japan

Network Dynamics Corporation

VISUAL TECHNOLOGY

Hitachi Solutions East Japan, Ltd.

SangyoTimes, Inc.

Asian Consortium on Computational Materials Science

Society of Nano Science and Technology

Center for Computational Materials Science

以上

配布先 関係各位	報告書39	作成日 平成 26 年 11 月 21 日	
	第9回 CMSI 産官学連続研究会 「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」	No. CMSI-14-39	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程: 平成 26 年 11 月 20 日 (木)
 会 場: 秋葉原ダイビル 5 階カンファレンスフロア 5B)
 参加費: 無料
 受講者: 40 名

【開催趣旨】

今回の研究会は、炭素繊維複合材料(CFRP)に焦点を当て、最先端の計算科学とエクサ時代に向けた期待について発表と議論を行いました。CFRP の設計には、ミクロな炭素繊維またはマトリックス樹脂そのものの構造や基礎物性から、界面強度、積層構成、そしてマクロな特性に至るマルチスケールでの検討が要求されます。しかし、マクロな領域のシミュレーションが基礎的にも実用的にも長足の進歩を遂げているのに対して、ミクロな原子・分子スケールのシミュレーションは、モデリングの困難や計算負荷の問題から、緒に就いたばかりというのが実情です。そこで本研究会では、CFRP のミクロなシミュレーションを指向して研究されている産学の先生方をお招きし、話題提供していただいた上で、来るエクサスケールコンピューティング時代に期待される CFRP の計算科学についても議論しました。

【プログラム】

- 13:00-13:05 開催にあたって
浅井美博(産総研)
- 13:05-13:55 繊維強化複合材に関する力学モデリングの現状と今後の展開
岡部朋永(東北大学)
- 13:55-14:45 粗視化分子シミュレーションを用いた高分子複合材料の粘弾性特性評価の研究
西川雅章(京都大学)
・・・Coffee break ・・・
- 15:00-15:30 炭素繊維の利用技術例(高圧複合容器の開発)および炭素繊維のナノ構造解析の重要性
岡本伸吾(愛媛大学)
- 15:30-16:00 分子動力学法を用いた炭素繊維の原子モデリングと引張・圧縮強度計算
伊藤明彦(東レ㈱)
・・・会場準備 ・・・
- 16:10-17:00 総合討論:エクサ時代の分子シミュレーションと炭素繊維複合材料
茂本勇(東レ㈱・コーディネータ)、岡崎進(名古屋大学)
岡部朋永、西川雅章、岡本伸吾、伊藤明彦

以上

配布先 関係各位	報告書40	作成日 平成26年 12 月 26 日	
	第 10 回 CMSI 産官学連続研究会 「構造用金属(鉄鋼)材料における計算材料科学」	No. CMSI-14-40	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程: 平成 26 年 12 月 19 日(金)

会 場: 秋葉原ダイビル 5 階カンファレンスフロア 5B

参加費: 無料

受講者: 37 名

【開催趣旨】

今回の研究会は、構造用金属材料に焦点を当て、最先端の計算材料科学とその期待について発表と議論を行いました。計算材料科学においては、原子オーダーの現象から、メゾ領域の金属組織の形成、そしてマクロな特性に至るマルチスケールでの研究が進んでいます。一方では、解析技術の進歩も著しく、従来見えないものが可視化できるようになり、実験と計算との対応も可能となってきました。本分野の重要な学術基盤として位置づけられるこのマルチスケールアプローチは、CMRI の人材育成・教育セミナーにおいても取り上げられています(H25FY, H26FY)。そこで、今回の連続研究会を CMSI の産官学連携と CMRI の人材育成・教育の共同開催とし、両者の有機的な連携とシナジー効果の発揮も目指し、最先端のマルチスケールアプローチや解析技術の現状と課題・期待について産と学から話題を提供していただき、今後の進め方についても議論しました。

【プログラム】

13:00-13:05	開催にあたって 浅井美博(産総研)
13:05-13:20	産業界から見た鉄鋼材料における計算材料科学への期待 潮田浩作(新日鐵住金㈱)
13:20-14:00	鉄鋼材料における先端材料解析技術の現状と計算科学との連携 佐藤馨, 山下孝子(JFE スチール㈱)
14:00-14:40	原子論に基づく Fe-Si 合金におけるらせん転位と Si の相互作用 譯田真人(大阪大学)
	Coffee Break.....
15:00-15:40	鉄鋼材料における第一原理計算の現状と課題 澤田英明(新日鐵住金㈱)
15:40-16:20	鉄鉄鋼材料の組織形成と変形挙動のマルチスケールシミュレーション 山中晃徳(東京農工大)
16:20-17:00	CMRI 教育セミナーと金属材料のマルチスケールアプローチについて 毛利哲夫(東北大学)
17:00-17:20	討論とまとめ 潮田浩作(新日鐵住金㈱)

以上

配布先 関係各位	報告書41	作成日 平成 27 年 2 月 17 日	
	第 11 回 CMSI 産官学連続研究会 「ソフトマテリアル開発における大規模計算」	No. CMSI-14-41	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程： 平成 27 年 2 月 13 日(金) 13:00-16:45

会 場： 秋葉原ダイビル 5 階カンファレンスフロア

参加費： 無料

受講者： 30 名

【開催趣旨】

今回の研究会は、ソフトマテリアル分野における大規模計算の取り組みに関して取り上げました。ソフトマテリアルは分子構造のみでなく、分子集合体が発現する多階層な構造が、材料の機能に大きく関与します。さらに化学反応をはじめとした構造変化のダイナミクスも重要で、時間スケールの多階層性をも考慮する必要があります。そのため、従来の分子シミュレーション手法では、現在の「京」をはじめとしたスーパーコンピュータを持ってしてもダイレクトな課題解決は困難で、新たな計算手法との組み合わせが必要になります。

今回は、これらの課題に対して最新のハードウェアと計算手法を駆使し大規模系の計算に取り組んでおられる方々に講演をいただき、ソフトマテリアル分野における大規模計算の現状と今後の期待に関して紹介していただきました。

【プログラム】

13:00-13:05	開催にあたって 浅井美博(産総研)
13:05-13:50	産業用高分子設計における大規模分子シミュレーションへの期待 島津彰(日東電工㈱)
13:50-14:35	マルチスケーリングを導入した熱可塑性エラストマーの大規模シミュレーション 本田隆(日本ゼオン㈱)
14:35-14:55	・・・・Coffee Break・・・・
14:55-15:40	フィルター充填系シミュレーションにおける多階層化と大規模化の接点に向けて 森田裕史(産総研)
15:40-16:25	第一原理分子動力学計算を利用した、Liイオン電池 SEI 形成に果たす添加剤の機能解析 奥野幸洋(富士フイルム㈱)
16:25-16:45	討論とまとめ

以上

配布先 関係各位	報告書42	作成日 平成 26 年 10 月 17 日	
	“「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会 ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合 成～	No. CMSI-14-42	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 26 年 10 月 15 日（水） 14:00-16:30

会場： 理化学研究所 計算科学研究機構 1F セミナールーム
兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

参加者：25 名（うち、プレス関係者：8 名）

主催： 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構(AICS)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

これまで「京」で得られた成果に加え、最前線で進めている研究をわかりやすく紹介した。そして、「京」が私たちの生活に必要なエネルギーの課題にどの ように寄与するのかを示した。また、開発がスタートしたポスト「京」スーパーコンピュータでは、どのようなことが新たに可能になるのかについても紹介した。

一般社会に対して「京」やポスト「京」の役割をプレスから伝える際役立つと思われる内容を盛り込んだ。

【プログラム】

13:30 受付開始

14:00-14:10 「京」で飛躍する新物質開発とエネルギーの創成

計算物質科学イニシアティブ 統括責任者 東京大学 常行真司

14:10-14:20 ビデオ上映 「「リチウムイオン電池」 ～分子の宇宙から未来の電池へ～」

理化学研究所 計算科学研究機構 広報国際室

14:20-14:40 「リチウムイオン電池」 ～高性能化と高安全性の両立に向けた取り組み～

物質・材料研究機構 館山佳尚

14:40-15:00 「燃料電池」～白金電極がなぜ電気エネルギーへの変換効率向上に有効なのかの謎を解明～

東京大学 杉野修

15:00-15:10 休憩

15:10-15:30 「太陽電池」～変換効率競争は、シリコン・有機薄膜からペロブスカイト型材料に新展開～

東京大学 山下晃一

15:30-15:50 「光合成」 ～エネルギーを生み出す化学反応の仕組みを解明へ～

神戸大学 天能精一郎

15:50-16:00 ポスト「京」で目指すこと ～エネルギーの未来を拓く～

理化学研究所 計算科学研究機構 機構長 平尾公彦

16:00-16:30 交流会

以上

配布先 関係各位	報告書43	作成日 平成 27 年 2 月 17 日	
	第 4 回 TUT-CMS 計算物質科学見える化シンポジウム	No. CMSI-14-43	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程： 平成 27 年 2 月 13 日(金) 13:00-16:45

会 場： 秋葉原ダイビル 5 階カンファレンスフロア

参加費： 無料

受講者： 30 名

【開催趣旨】

今回の研究会は、ソフトマテリアル分野における大規模計算の取り組みに関して取り上げました。ソフトマテリアルは分子構造のみでなく、分子集合体が発現する多階層な構造が、材料の機能に大きく関与します。さらに化学反応をはじめとした構造変化のダイナミクスも重要で、時間スケールの多階層性をも考慮する必要があります。そのため、従来の分子シミュレーション手法では、現在の「京」をはじめとしたスーパーコンピュータを持ってしてもダイレクトな課題解決は困難で、新たな計算手法との組み合わせが必要になります。

今回は、これらの課題に対して最新のハードウェアと計算手法を駆使し大規模系の計算に取り組んでおられる方々に講演をいただき、ソフトマテリアル分野における大規模計算の現状と今後の期待に関して紹介していただきました。

【プログラム】

13:00-13:05	開催にあたって 浅井美博(産総研)
13:05-13:50	産業用高分子設計における大規模分子シミュレーションへの期待 島津彰(日東電工㈱)
13:50-14:35	マルチスケーリングを導入した熱可塑性エラストマーの大規模シミュレーション 本田隆(日本ゼオン㈱)
14:35-14:55	・・・・Coffee Break・・・・
14:55-15:40	フィルター充填系シミュレーションにおける多階層化と大規模化の接点に向けて 森田裕史(産総研)
15:40-16:25	第一原理分子動力学計算を利用した、Liイオン電池 SEI 形成に果たす添加剤の機能解析 奥野幸洋(富士フイルム㈱)
16:25-16:45	討論とまとめ

以上

配布先 関係各位	報告書44	作成日 平成 26 年 7 月 22 日	
	コンピューティクス勉強会(配信講義)	No. CMSI-14-44	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時 : 平成26年7月9日(水)16:30～19:00

会場(受信拠点) : 理化学研究所 計算科学研究機構

(理化学研究所・計算科学研究機構・6階講堂)

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)

配信元:東京大学情報基盤センター

【概要】

異分野交流を目的として、東京大学で行われている勉強会をテレビ会議により大阪大学、計算科学研究機構にて受信し、質疑応答を行った。

講演内容は、中間固有値問題(数理)、第一原理伝導計算(物理)である。

【講演内容】

物理:小野 倫也(大阪大学 工学研究科):

量子電気伝導計算(非平衡グリーン関数理論)に現れる行列問題

数理:宮田 考史(名古屋大学 工学研究科):中間固有値問題

以上

配布先 関係各位	報告書45	作成日 平成 26 年 9 月 4 日	
	第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム	No. CMSI-14-45	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日 程: 2014 年 9 月 2 日 (火) 9:50～18:00

会 場: 東京・秋葉原 UDX (4 階、NEXT-1)

参加費: 無料

受講者: 60 名

主催: (一財)高度情報科学技術研究機構(RIST)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

協賛: (公財)高輝度光科学研究センター(JASRI)、(一財)総合科学研究機構 東海事業センター(CROSS 東海)、
J-PARC センター、物質構造科学研究所(IMSS)、元素戦略プロジェクト<拠点形成型>、理化学研究所

後援: 文部科学省、兵庫県、茨城県

【開催趣旨】

「京」とSPRING-8、J-PARC/MLF、KEK/IMSS/PF 等の大型実験施設との連携利用は、数値シミュレーション手法と実験的手法の特性を相互に補い合う形での研究成果の創出につながり、その推進は多方面から期待されています。本シンポジウムでは、この連携利用促進のため、すでに実施されている連携利用の研究課題、連携の際に利用可能な物質科学関連の計算プログラムを紹介しました。また、実験側から計算との連携に対する課題や要望を頂戴し、実験と計算の施設関係者間、研究者間での情報共有と成果共創を促す機会となりました。

【プログラム】

09:50～10:00	開会のご挨拶 平山俊雄(RIST)
10:00～12:00	第 1 セッション ― 連携利用事例紹介 座長:塩原紀行(RIST)
10:00～10:30	磁石材料微細構造最適化に向けて 合田義弘 (東京工業大学)
10:30～11:00	SACLA と「京」の連携による生体ナノ物質の構造解析プラットフォームの整備 城地保昌 (JASRI/理研)
11:00～11:30	密度汎関数理論と SPRING-8 による 61Ni メスバウアー分光を用いた Li イオン二次電池正極材の劣化解析 世木隆 (コベルコ科研)
11:30～12:00	タイヤ用ゴム材料の大規模分子動力学シミュレーション 内藤正登 (住友ゴム)
12:00～13:00	昼食
13:00～15:00	第 2 セッション ― 連携利用を促進する計算機・計算科学の支援と計算プログラム紹介 座長:川島直輝(東京大学)
13:00～13:15	<RIST による研究支援> 「京」の利用支援について 小久保達信 (RIST)
13:15～13:40	<CMSI による研究支援と計算プログラム紹介> 物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」 強相関電子系・スピン系の汎用シミュレーションソフトウェア「ALPS」 藤堂眞治(東京大学)
13:40～14:00	汎用第一原理計算ソフトウェア「OpenMX」 尾崎泰助(東京大学)

14:00～14:20	汎用分子動力学ソフトウェア「MODYLAS」 安藤嘉倫(名古屋大学)
14:20～14:40	大規模並列量子化学計算ソフトウェア「SMASH」「FMO」 石村和也(分子科学研究所) 北浦和夫(神戸大学)
14:40～15:00	数値計算による材料組織設計「Phase-Field Method」 高木知弘(京都工芸繊維大学)
15:00～15:20	コーヒープレーク
15:20～16:55	第3セッションー実験サイドからの計算科学、プログラムに関する要望 座長:加藤岳生(東京大学)
15:20～15:50	日本の大型施設のハイスループット化への期待ー測定から解析技術までー 庄司哲也(文部科学省・トヨタ自動車)
15:50～16:05	KEK-PFにおける機能性材料評価と計算科学への要望 組頭広志(KEK)
16:05～16:20	JASRI/SPring-8における支援体制と計算科学への要望 木下豊彦(JASRI)
16:20～16:35	JASRI/SPring-8における支援体制と計算科学への要望 木下豊彦(JASRI)
16:35～16:55	全体討論
16:55～17:00	閉会の辞ー今後の連携強化に向けて 常行真司(東京大学)
17:00～17:30	休憩&情報交換(個別)
17:30～18:00	平成27年度HPCI課題募集説明(希望者のみ) 事務局(RIST)

以上

配布先 関係各位	報告書46	作成日 平成 26 年 4 月 25 日	
	第 14 回「京」物性セミナー	No. CMSI-14-46	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時: 平成 26 年 4 月 23 日(水) 16:00-17:30
場所: 理化学研究所 計算科学研究機構 1F R104-2 会議室
講師: 佐藤正寛 Masahiro Sato (青学大 Aoyama Gakuin Univ.)
参加人数: 10 名

【タイトル】

相関量子多体系におけるレーザー誘起非平衡現象についての理論
-レーザーによる磁化とカイラリティの制御とキタエフ・ハニカム格子模型におけるレーザー誘起トポロジカルマヨラナ液体相-

【概要】

近年、量子多体系における非平衡定常状態の理論研究が進展している。この活性化の主要な要因として、フロケの定理を用いることで非平衡定常の問題がお馴染みの平衡系の問題に帰着することが広く認識されるようになった、ということが挙げられる。実験においては、レーザーを物質に照射することで非平衡状態が実現可能になりつつある。例えば、円偏光レーザーを Dirac 分散を持つ 2 次元格子電子系に照射するとトポロジカル絶縁相が現れることが理論的に予言され、さらにそれを示唆する実験結果もごく最近報告され、レーザーが誘起する新現象が注目を集めている。

ところで、相互作用のない電子系以外の量子多体系においても、レーザーが誘起する非自明な現象は期待できるだろう。そこで我々は、単純で現実的な強相関系である量子磁性体やマルチフェロイック物質にレーザーを照射した系を理論的に考察した。その結果、以下の 3 つの予言を得ている。(1)一般の量子磁性体(量子スピン系)に振動数が徐々に増加する(チャージングされた)円偏光レーザーを照射すると、静磁場なしで、平衡系磁化過程とほぼ同じ磁化曲線を再現できる。(2)スピнкаイラリティと電気分極が結合するマルチフェロイック物質に適当な方向から(楕)円偏光レーザーを照射すると、有効的に新しいジャロシンスキー守谷相互作用を系に誘導することができる。(3)ハニカム格子キタエフ模型において、交換相互作用と電気分極が結合する電気磁気結合が存在するとき、(楕)円偏光レーザーを照射すると、gapless マヨラナエッジ状態をもつトポロジカルスピン液体相が誘導される。以上の理論結果について詳しく紹介した。

以上

配布先 関係各位	報告書47	作成日 平成 26 年 5 月 1 日	
	第 14 回 CMSI 神戸ハンズオン: FU チュートリアル	No. CMSI-14-47	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 平成 26 年 4 月 28 日(月) 13:00-17:30

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

講師: Dmitri G. Fedorov(産業技術総合研究所)、北浦和夫(神戸大学)

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】

巨大分子計算のプリ・ポスト処理 GUI プログラムである FU を用いて、光合成反応 中心タンパク質複合体(PSII)の X 線構造データをもとに、分子計算に用いるための構造モデルの作成実習を行った。

【プログラム】

1. 13:00-13:30 FU の機能と操作法の説明
2. 13:30-14:00 PSII の構造モデリングについて
3. 14:00-17:00 モデリングの実習
 - 1) モデリングのお膳立て
 - 2) 実験構造の欠落部分の検査と修復
 - 3) 水素原子の付加と部分構造最適化(TINKER および GAMESS を利用)
 - 4) 全系および縮小モデルの作成
 - 6) 別途求めた OEC クラスターのタンパク質への埋め込み
(随時、休憩／コーヒブレークをはさみます)
4. 17:00-17:30 質疑・応答

以上

配布先 関係各位	報告書48	作成日 平成 26 年 6 月 3 日	
	第 15 回 CMSI 神戸ハンズオン: バージョン管理チュートリアル	No. CMSI-14-48	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 平成 26 年 5 月 30 日(金) 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

講師: 松尾春彦 (RIST)、坂下達哉 (東大物性研)

参加費: 無料

参加者: 8 名 (講師 2 名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

共催: 高度情報科学技術研究機構 (RIST)

【概要】

複数の人がソフトウェア開発を行う際に必須のツールとなっているバージョン管理システムの講習会を行った。具体的には、バージョン管理システムとして Git をとりあげ、ファイルの履歴管理の方法を解説し、各自のノートパソコンおよび神戸に設置しているクラスタを用いて実習を行った。

【プログラム】

- ・ 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49	作成日 平成 26 年 6 月 17 日	
	第 16 回 CMSI 神戸ハンズオン: ALPS チュートリアル	No. CMSI-14-49	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 平成 26 年 6 月 16 日(月) 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

講師: 藤堂眞治 (東大院理/物性研)、松尾春彦 (RIST)

参加費: 無料

参加者: 11 名 (講師 2 名含む)

主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

共催: 高度情報科学技術研究機構 (RIST)

【概要】

量子スピン/格子ボゾン系の厳密対角化/量子モンテカルロ法によるシミュレーションに興味を持つ大学院生、研究員、計 5 名を対象として、ALPS の概要と基本的な使い方についての講義、ALPS 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)

14:30-15:00 休憩/コーヒーブレイク

15:00-16:00 Python, pyalps, matplotlib 入門

16:00-17:00 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50	作成日 平成 26 年 7 月 15 日	
	第 3 回 CMSI「京」・HPCI スパコン利用 情報交換会	No. CMSI-14-50	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 26 年 6 月 30 日(月)13:00 – 7 月 2 日(水)16:00

会場： 講堂（理化学研究所・計算科学研究機構・6 階）

兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

参加費：無料

参加者：77 名（延べ数）

主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

共催： 高度情報科学技術研究機構 (RIST)

【概要】

CMSI で実施しているアプリ高度化支援によるプログラムの高速化の成果について講演した。また、CMSI のフリーのソフトウェアの開発者およびユーザによる紹介を行った。さらに、研究成果の「見える化」の実例、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps に関する活動状況について報告した。

【プログラム】

<6 月 30 日(月)>

13:00-13:10 趣旨説明（幹事）

13:10-13:40 峯尾真一、小久保達信（RIST）

「「京」の課題募集ならびに利用支援について」

13:40-14:10 泰地真弘人（理化学研究所 AICS）

「将来のアーキテクチャ、専用機等の可能性」

14:10-14:50 ……特別講演「成果の見える化」……

袖山慶太郎（京都大学、NIMS）

「「京」で見たリチウムイオン電池の電解液反応：「京」における最適化サンプリングから、実験と連携した本質的問題の追及、社会 への情報発信まで」

14:50-15:10 coffee break

15:10-15:40 安藤嘉倫（名古屋大学）

「汎用分子動力学計算ソフトウェア MODYLAS の紹介」

15:40-16:10 北浦和夫（神戸大学）

「FMO 計算支援 GUI ソフトウェアの開発」

16:10-16:40 高木知弘（京都工芸繊維大学）

「TSUBAME2.5 によるデンドライト成長の phase-field 計算」

16:40-17:00 coffee break

17:00-17:30 藤堂真治（東京大学）

「CMSI のアプリ高度化支援、MateriApps」

17:30-18:00 石村和也（分子科学研究所）

『これまでのアプリ高度化支援の紹介』と『量子化学大規模並列計算プログラム SMASH の紹介』

18:20-20:00 懇親会 (FOCUS)

<7月1日(火)>

09:00-10:30OpenMX 特集(3件).....

09:00-09:30 尾崎泰助(東京大学)

「第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の高度化と今後の展開」

09:30-10:00 大脇創(日産アーク)

「リチウムイオン電池系の大規模第一原理シミュレーション」

10:00-10:30 合田義弘(東京工業大学)

「磁性材料と OpenMX」

10:30-11:00 coffee break

11:00-11:30 野田真史(分子科学研究所)

「CMSI 高度化支援で得た技術紹介」

11:30-12:00 西澤宏晃(分子科学研究所)

「京一般利用枠採択までの道のり」

12:00-12:10 情報交換会まとめ(幹事)

以上

配布先 関係各位	報告書51	作成日 平成 26 年 7 月 15 日	
	CMSI アプリ高度化合宿 “TOKKUN!4 (アプリ高度化・利用方法習得)”	No. CMSI-14-51	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 26 年 7 月 1 日(火)13:30 – 7 月 2 日(水)16:00

会場： 講堂（理化学研究所・計算科学研究機構・6 階）

兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

参加費：無料

参加者：34 名（延べ数）

主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

共催： 高度情報科学技術研究機構 (RIST)

【概要】

RIST サポートチームによる FX10 を用いたアプリの解析と問題解決方法の提案、主要な CMSI アプリ(FMO、MODYLAS、OpenMX)の開発者による利用方法の支援によって、参加者は各自のアプリの高度化もしくは CMSI アプリの効率的な利用方法の習得を行った。

【プログラム】

<7 月 1 日(火)>

13:30-14:00 TOKKUN!4 内容説明（幹事）

14:00-18:00 実習（アプリ高度化、アプリ利用相談）

アプリ高度化： 高度化支援チームによる FX10 を用いたアプリの解析と問題点の特定、解決方法の提案

アプリ利用相談： MODYLAS、FMO、OpenMX 開発者への個別利用相談

<7 月 2 日(水)>

09:00-12:00 実習

※内容は 7 月 1 日午後と同様（アプリ利用相談は FMO と OpenMX のみ）

12:00-13:00 昼食

13:00-15:45 実習

※内容は 7 月 1 日午後と同様（アプリ利用相談は FMO と OpenMX のみ）

15:45-16:00 TOKKUN !4 まとめ（幹事）

以上

配布先 関係各位	報告書52	作成日 平成 26 年 7 月 11 日	
	第 10 回 若手技術交流会	No. CMSI-14-52	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時 : 平成 26 年 7 月 7 日(月)13:00～ 9 日(水)16:15 (終了予定)

会場 : 理化学研究所 計算科学研究機構 6 階講堂

参加者: 34 名

主催 : 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

【概要】

第 10 回 CMSI 若手技術交流会では、計算科学分野における研究成果の社会還元に対する社会的要求に対応する人材を育成するため、計算結果の可視化技術に重点を置いた講習および実習の機会を提供しました。可視化の並列化技術に関する講演、およびフリーの汎用可視化プログラムである **ParaView** を使用する実習を行いました。また、人材育成と企業連携に関連し、未来ものづくり研究所の宮野氏および、フューチャラボラトリの橋本氏に講演していただきました。

【プログラム】

<第 1 日目>

- 13:00-13:10 今回の若手技術交流会プログラムについて (若手幹事)
- 13:10-13:30 ParaView に関する解説 (若手幹事)
- 13:30-15:30 ParaView 可視化実習
- 15:30-15:50 コーヒーブレイク
- 15:50-17:00 ParaView 可視化実習
- 16:00-16:30 「京」コンピュータ見学(希望者)
- 17:00-18:00 講演:
「次世代の計算物質科学推進体制構築に向けた人材開発」
宮野孝広 氏 (未来モノづくり研究所 代表)
橋本昌隆 氏 (株式会社フューチャラボラトリ 代表取締役)
- 18:00-19:00 夕食 (FOUCS)
- 19:00-21:00 討論会(宮野氏・橋本氏の講演に関して)

<第 2 日目>

- 09:00-10:00 講演:
「ポストペタスケール時代のシミュレーションと大規模並列可視化」
中島研吾 教授(東京大学情報基盤センター、工学部)
- 10:00-10:40 ParaView 可視化実習
- 10:40-11:00 コーヒーブレイク(coffee break)
- 11:00-12:00 ParaView 可視化実習
- 12:00-13:00 昼食 (FOCUS restaurant)
- 13:00-14:55 ParaView 可視化実習
- 14:55-15:10 拠点研究員紹介 西村好史 氏
- 15:10-15:25 拠点研究員紹介 Moshour Rahman 氏
- 15:25-15:45 コーヒーブレイク
- 15:45-16:00 可視化ソフト FU の紹介 北浦和夫 教授

16:00-16:30 分野 5 講演:
「シミュレーションデータから一般向け可視化映像を作る
～折角のデータを安っぽく見せないために～」
武田隆顕 氏 (ヴェイサエンターテインメント株式会社)
16:30-16:45 拠点研究員紹介 岡安竜馬ダヴィッド 氏
16:45-17:00 拠点研究員紹介 西原泰孝 氏
17:00-18:00 MatteriApps LIVE! 体験 (起動 USB 作成と使用体験)
18:00-19:00 夕食 (FOCUS)
19:00-21:00 座談会 (MateriApps & MateriApps LIVE!について)

<第 3 日目>

09:00-10:40 ParaView 可視化実習
10:40-11:00 コーヒーブレイク
11:00-12:00 wiki 作成と成果発表準備
12:00-13:00 昼食 (Focus)
13:00-15:30 可視化成果発表
15:30-16:15 まとめと今後について

以上

配布先 関係各位	報告書53	作成日 平成 26 年 8 月 11 日	
	CMSI アプリ高度化合宿 “TOKKUN!5 (実行・並列性能向上)”	No. CMSI-14-53	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時：平成 26 年 8 月 4 日(月)13:00 - 8 月 6 日(水)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 501 号室)

参加費：無 料

参加者：38 名（延べ数）

主催：計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

共催：高度情報科学技術研究機構(RIST)

【概要】

RIST サポートチーム及び京を利用している CMSI メンバーによる支援によって、学生を含めた参加者は FX10 を用いてアプリの高速化と並列化を行い、大幅な性能向上を達成した。毎日全員で議論する時間を設けて、情報共有も行った。

【プログラム】

<8 月 4 日(月)>

13:00-13:30 高度化支援に関する説明
13:30-15:30 高度化作業
15:30-16:00 休憩
16:00-17:30 高度化作業
17:30-18:00 情報共有

<8 月 5 日(火)>

9:15-10:30 高度化作業
10:30-10:45 休憩
10:45-12:00 高度化作業
12:00-13:30 昼食
13:30-15:30 高度化作業
15:30-16:00 休憩
16:00-17:30 高度化作業
17:30-18:00 情報共有

<8 月 6 日(水)>

9:15-10:30 高度化作業
10:30-10:45 休憩
10:45-12:00 高度化作業
12:00-13:30 昼食
13:30-15:00 高度化作業
15:00-16:00 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 平成 26 年 8 月 26 日	
	第 17 回 CMSI 神戸ハンズオン: FU チュートリアル	No. CMSI-14-54	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 平成 26 年 8 月 18 日(月) 13:00 - 17:30

会場: CMSI 神戸拠点(理化学研究所 計算科学研究機構 5 階 501 号室)

講師: 北浦和夫(神戸大学)

参加費: 無 料

参加者: 7 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】

分子計算のプリ・ポスト処理を行うための GUI ソフトの実践的なプログラミング 実習を行った。FU の分子
模型描画ルーチンを利用して、各自が独自のソフトを開発する際に利用できるプロトタイプを作成し
た。

【プログラム】

13:00-13:30 FU の概要

13:30-16:30 wxPython プログラミング実習

1) ウィンドウの作成

2) 構造データファイルの読み込み

3) OpenGL による分子模型の描画

4) マウス event の取得と分子模型の回転

(休憩／コーヒブレーク)

16:30-17:00 FU プログラムの改変・機能追加

17:00-17:30 質疑・応答

以上

配布先 関係各位	報告書55	作成日 平成26年 9 月 19 日	
	第 18 回 CMSI 神戸ハンズオン: Rokko チュートリアル	No. CMSI-14-55	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 2014 年 9 月 18 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

講師: 坂下達哉 (東大物性研)、藤堂眞治 (東大院理/物性研)

参加者: 8 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】

我々が開発している固有値ソルバの統一的インターフェースRokkoの講習会を開催した。具体的には、密行列向け逐次・並列版ソルバ、疎行列向け並列版ソルバの仕組みとそれらを統一的に取り扱える Rokko の仕様を説明した。また、神戸拠点に設置しているクラスタを用いてサンプルプログラムの実行を行った。

【プログラム】

- ・Rokko の概要の紹介

- ・サンプルの実行

(休憩／コーヒープレーク)

- ・TITPACK2 (統計物理の厳密対角化パッケージ) への Rokko の組み込み実習

- ・ユーザプログラムへの Rokko の組み込み実習

以上

配布先 関係各位	報告書56	作成日 平成 26 年 10 月 14 日	
	第 19 回 CMSI 神戸ハンズオン: OpenMX チュートリアル	No. CMSI-14-56	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時: 平成 26 年 10 月 10 日(金) 13:00-17:30

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

講師: 尾崎泰助 (東大物性研)、Truong Vinh Truong Duy (東大物性研)、坂下達哉 (東大物性研) 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】

2014年10月10日午後(13:00-17:30)、CMSI神戸拠点にて第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXのハンズオンコースを開催した。尾崎泰助、Truong Vinh Truong Duy、坂下達哉 (共に東大物性研)が講師を務めた。OpenMXの概要、インストール方法、実際の計算で留意すべきこと等に関して講義を行った後に実習計算を行った。実習内容はメタン分子の構造最適化、ダイヤモンドの状態密度計算、NEB法による反応障壁の計算である。企業から3名、大学・国立研究機関より8名の参加者があり、活発な質疑応答があった。

【プログラム】

13:00-13:30 OpenMX の概要
13:30-13:45 インストール方法
13:45-14:00 実習内容(1)の説明
14:00-14:40 各自実習(1)
14:40-14:50 休憩／コーヒブレーク
14:50-15:50 計算の実際と実習内容(2)の説明
15:50-17:00 各自実習(2)
17:00-17:30 質疑・応答

以上

配布先 関係各位	報告書57	作成日 平成 26 年 12 月 16 日	
	第 20 回ハンズオン xTAPP チュートリアル	No. CMSI-14-57	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 26 年 12 月 12 日(金) 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

講師： 吉本芳英（東京大学）

参加費：無料

参加者：7 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】

密度汎関数法、擬ポテンシャル、平面波基底による第一原理電子状態計算ソフトxTAPPの利用者向け講習会を開催した。

xTAPPをとりあえずは動かすことができる方を対象として、並列実行、STMシミュレーション、エネルギー障壁、ワニエ関数など高度な機能の紹介や、xTAPPを改造するために必要な情報の提供など、中級から上級者向けの話題提供を行なった。

【プログラム】

13:00 ~ 15:00 xTAPP の高度な機能について(説明と実習)

15:00 ~ 15:30 コーヒーブレイク

15:30 ~ 17:00 xTAPP の内部構成について、および質疑応答

以上

配布先 関係各位	報告書58	作成日 平成 26 年 1 月 30 日	
	第 21 回ハンズオン MODYLAS チュートリアル	No. CMSI-14-58	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 26 年 1 月 30 日(金) 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

講師： 安藤嘉倫（名古屋大学大学院）、遠藤裕太（名古屋大学大学院）、
小西優祐（産業技術総合研究所）、吉見一慶（株式会社 構造計画研究所）、
坂下達哉（東大物性研）

参加費：無料

参加者：13 名（講師 5 名含む）

主催： 計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

【概要】

◎ 分子動力学(MD)シミュレーションによる自由エネルギー計算の基礎 ◎

分子動力学シミュレーションと熱力学的積分法の組み合わせによって、溶媒中の溶質分子間距離の関数としての自由エネルギープロフィールを計算する方法の解説、および MODYLAS を用いた演習を行った。

【プログラム】

13:00-14:00 分子動力学シミュレーションおよび熱力学的積分法の説明

14:00-15:00 MODYLAS を用いた実習(1) 使い方説明およびサンプル系の平衡化

15:00-15:30 コーヒーブレイク

15:30-17:00 MODYLAS を用いた実習(2) 平均力の計算および自由エネルギーの算出

以上

配布先 関係各位	報告書59	作成日 平成 27 年 2 月 8 日	
	第 11 回 若手技術交流会	No. CMSI-14-59	
			作成
			CMSI 事務局 三浦

【開催要項】

日時 : 平成 27 年 2 月 4 日(水)12:55 ～ 6 日(金)16:30

会場 : ヤマハリゾート(静岡県掛川市)

参加者 : 28 名

主催 : 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

参加費 : 無料

【概要】

今回の若手技術交流会では、アプリ(OpenMX, ALPS, xTAPP, Rokko, MODYLAS)のミニ講習会を実施し、各々のソフトウェアの構造とそれらのノウハウの共有をひとつ目の目標としました。また、単に上記アプリを使ってみるだけでなく、講習技法を学び実際に「講習会を作る」経験をすることで、各自が開発したアプリの普及活動を自ら行う事ができる研究者の育成を目指し開催しました。

さらに、自分が開発に携わっていないアプリについて、その適用対象となる物質系や計算手法を学びながら同時に講習会講師を体験することで、非専門家との対話に対する知見を得、今後需要が高まると予想される「実験家と計算物質科学との架け橋になる人材」を養成することを目指し開催しました。

【プログラム】

◆第 1 日目

12:55-13:00 Opening 第 11 回若手技術交流会趣旨説明 (坂下)
13:00-13:30 ソフトウェアの開発・公開・普及活動: その意義と方法
(尾崎泰助 東京大学)
13:30-14:30 OpenMX ミニ講習会
14:30-14:40 (休憩)
14:40-15:40 ALPS ミニ講習会
15:40-15:50 (休憩)
15:50-16:50 xTAPP ミニ講習会
16:50-17:00 (休憩)
17:00-18:00 Rokko ミニ講習会
18:00-19:00 夕食
19:00-21:00 討論会: 西川氏(FOCUS)

◆第 2 日目

09:00-10:00 Modylas ミニ講習会
10:00-12:00 実習:講習会資料作成(グループ毎)
12:00-13:00 昼食
13:00-13:45 拠点研究員紹介
Sergio Ruiz Barragan 氏
Sankar Kumar Deb Nath 氏
Swastibrata Bhattacharyya 氏
13:45-16:00 実習:講習会資料作成(グループ毎)
16:00-16:15 (休憩 Break)

16:15-18:00 実習:講習会資料作成(グループ毎)

18:00-19:00 夕食

19:00-21:00 座談会:中間発表

◆第3日目

09:00-11:00 実習:講習会資料作成(グループ毎)

11:00-12:00 成果発表:講習会実演 1 グループ x 50 min (6 グループにした場合)

12:00-13:00 昼食 Lunch

13:00-16:20 成果発表:講習会実演 5 グループ x 50 min

16:20-16:30 まとめ

以上

配布先 関係各位	報告書60	作成日 平成 27 年 2 月 17 日	
	第 22 回ハンズオン SMASH チュートリアル	No. CMSI-14-60	
			作成
			CMSI 神戸 松下

【開催要項】

日時： 平成 27 年 2 月 16 日(月) 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

講師： 石村和也(分子科学研究所)

参加費：無料

参加者：8 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】

大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発者向け講習会を開催した。

SMASH のプログラム構造、並列化手順、2 電子積分計算ルーチンなどソースコードの一部を取り出す方法について解説と実習を行った。

【プログラム】

13:00-14:30 SMASH のプログラム構造などの説明

14:30-15:00 コーヒーブレイク

15:00-17:00 実習および質疑応答

以上