

12月3日(月)

(†は若手奨励賞対象者)

開会挨拶

(座長：山地洋平(東京大学))

◎戦略課題1 「新量子相・新物質の基礎科学」

- 10:00-10:20 新量子相・新物質の基礎科学の展望
今田正俊(東京大学), 天能精一郎(神戸大学)
- 10:20-10:35 ワームアルゴリズムの並列化
正木晶子(東京大学) † ----- A-1
- 10:35-10:50 脱閉じ込め臨界現象のユニバーサリティ
原田健自(京都大学) ----- A-2
- 10:50-11:05 動的密度行列繰り込み群法による一次元強相関電子系の
非線形光学応答の研究
曾田繁利(理化学研究所) † ----- A-3
- 11:05-11:20 多変数変分モンテカルロ法による $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ 第一原理有効模型の
基底状態解析
森田悟史(東京大学) † ----- A-4
- 11:20-11:35 第一原理電子状態計算法をもとにした高温超伝導体にたいする電子状態計算
三澤貴宏(東京大学) ----- A-5
- 11:35-11:50 密度行列繰り込み群を用いた量子化学計算
柳井毅(分子科学研究所) † ----- A-6
- 11:50-12:05 メニーコアプロセッサと量子化学
安田耕二(名古屋大学) ----- A-7

12:05-13:45 昼休み
CMSI 運営委員会 (担当者のみ)

(座長：坂下達哉(東京大学))

◎戦略課題1 「新量子相・新物質の基礎科学」

- 13:45-14:00 高精度 MP2-F12 法によるフラーレンの超並列量子化学計算
大西裕也(神戸大学) † ----- A-8
- 14:00-14:15 量子古典対応における特異点の除去：超多体量子動力学に向けて
高塚和夫(東京大学) ----- A-9

◎戦略課題2 「次世代先端デバイス科学」

- 14:15-14:35 次世代先端デバイス科学の展望
押山淳 (東京大学)
- 14:35-14:50 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 (大阪大学) ----- B-1
- 14:50-15:05 シリコン表面上のゲルマニウムハットクラスター成長に対する
オーダーN 法第一原理計算
宮崎剛 (物質・材料研究機構) ----- B-2
- 15:05-15:20 分割統治型実空間 DFT コードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーション
大庭伸子 (豊田中央研究所) ----- B-3
- 15:20-15:35 ナノ構造体における近接場光励起ダイナミクスの第一原理計算
信定克幸 (分子科学研究所) ----- B-4
- 15:35-15:50 コーヒーブレイク

(座長：米原文博 (東京大学))

◎戦略課題2 「次世代先端デバイス科学」

- 15:50-16:05 高強度パルス光と物質の相互作用を記述する
第一原理マルチスケールシミュレーション
矢花一浩 (筑波大学) ----- B-5
- 16:05-16:20 界面磁気異方性エネルギーの実証計算と駆動電界閾値の予測
小田竜樹 (金沢大学) ----- B-6
- 16:20-16:35 第一原理電子状態計算コード OpenMX の超並列化及び高精度化
尾崎泰助 (北陸先端科学技術大学院大学) ----- B-7
- 16:35-16:50 多様な結晶におけるフォノンの非調和性に関する直接的計算
東後篤史 (京都大学) ----- B-8
- 16:50-17:05 第一原理トランスコリレイティッド法に基づく
ジャストロウ因子最適化の新手法
越智正之 (東京大学) † ----- B-9

◎戦略課題1 「新量子相・新物質の基礎科学」

- 17:05-17:20 三次元溶媒和構造の分布関数理論
佐藤啓文 (京都大学) ----- A-10

(座長：藤堂眞治 (東京大学))

◎招待講演

17:20-17:50 超並列で FFT は高速に動かせるか？
-- スーパーコンピュータ「京」上での PHASE の性能最適化を通じて
黒田明義 (理化学研究所) ----- S-1

17:50-18:00 コーヒーブレイク

◎討論会

18:00-19:00 「将来のスパコンのありかた検討会」 (HPCI コンソーシアム共催)

12月4日(火)

(†は若手奨励賞対象者)

(座長：野田真史(分子科学研究所))

◎戦略課題3 「分子機能と物質変換」

- 9:00-9:20 分子機能と物質変換の展望
岡崎進(名古屋大学)
- 9:20-9:35 光機能分子の物性化学: Direct SAC-CI法による共役系分子の研究
福田良一(分子科学研究所) ----- C-1
- 9:35-9:50 ナノスケールの化学反応を取り扱うDC-DFTB法の開発と並列化
西澤宏晃(早稲田大学/分子科学研究所) † ----- C-2
- 9:50-10:05 分割統治MP2プログラムの最近の展開と性能評価
小林正人(早稲田大学) † ----- C-3
- 10:05-10:20 分子動力学計算ソフトMODYLASの開発と
巨大分子集団系シミュレーションへの展開
安藤嘉倫(名古屋大学) † ----- C-4
- 10:20-10:35 小児マヒウイルスの全原子シミュレーション
岡崎進(名古屋大学) ----- C-5
- 10:35-10:50 コーヒーブレイク

(座長：河野貴久(東京大学))

◎戦略課題3 「分子機能と物質変換」

- 10:50-11:05 フラグメント分子軌道法と溶媒モデルとの融合法と
その解析的エネルギー勾配の開発
北浦和夫(神戸大学) ----- C-6
- 11:05-11:20 拡張アンサンブル法による分子の構造と機能の解明
岡本祐幸(名古屋大学) ----- C-7
- 11:20-11:35 均一および不均一水溶液系における混合溶媒効果の自由エネルギー解析
松林伸幸(京都大学) ----- C-8
- 11:35-11:50 ミセルの生成と難溶分子の可溶化の分子動力学シミュレーション
吉井範行(名古屋大学) ----- C-9

◎戦略課題4 「エネルギー変換」

- 11:50-12:05 ナノ構造制御によるカルコパイライト型およびII-VI族化合物
太陽電池材料の計算機マテリアルデザイン
佐藤和則(大阪大学) ----- D-1

12:05-12:20 光増感剤の合理的分子設計にむけて：環境効果と励起エネルギー移動
長谷川淳也（北海道大学）----- D-2

12:20-13:50 昼休み
CMSI 各小委員会（担当者のみ）

（座長：水口朋子（分子科学研究所））

◎一般課題

13:50-14:05 フラストレート磁性体の計算科学的研究
--空間異方性を持つ三角格子 S=1 ハイゼンベルク反強磁性体--（支援課題）
中野博生（兵庫県立大学）----- F-1

14:05-14:20 ペタスケールコンピュータにおける分子動力学法の可能性
渡辺宙志（東京大学）----- F-2

14:20-14:35 剪断流下の脂質膜系の構造形成（支援課題エントリー）
芝隼人（東京大学）†----- F-3

14:35-14:50 3d 遷移金属化合物における L_{2,3} 端 X 線吸収スペクトルの第一原理計算
池野豪一（京都大学）†----- F-4

14:50-15:05 量子ウォーク法による時間依存シュレーディンガー方程式の解法
関野秀男（豊橋技術科学大学）----- F-5

15:05-15:20 コーヒーブレイク

（座長：榮慶丈（分子科学研究所））

◎分野拠点課題

15:20-15:35 フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移の
大規模並列モンテカルロシミュレーション
大久保毅（東京大学）†----- F-6

15:35-15:50 量子化学超並列計算基盤プログラムの開発
石村和也（分子科学研究所）†----- F-7

15:50-16:05 ポテンシャルスムージングによる Wang-Landau サンプリングの拡張に向けて
志田和人（東北大学）----- F-8

◎戦略課題 4 「エネルギー変換」

16:05-16:20 3D-RISM-SCF によるピロリン酸の加水分解反応解析
吉田紀生（九州大学）----- D-3

(座長：寺倉清之 (産業技術総合研究所))

◎招待講演

16:20-16:50 第一原理計算に基づいたマテリアルズ・インフォマティクス
田中功 (京都大学) ----- S-2

16:50-18:15 ポスターセッション&コーヒー

18:30～ 懇親会 (岡崎コンファレンスセンター 1階 中会議室)

12月5日(水)

(†は若手奨励賞対象者)

(座長：河津励 (分子科学研究所))

◎戦略課題4 「エネルギー変換」

- 9:00-9:20 エネルギー変換の展望
杉野 修, 山下 晃一 (東京大学)
- 9:20-9:35 First-Principles Molecular Dynamics under Constant Potential
Nicephore Bonnet (産業技術総合研究所/東京大学) ----- D-4
- 9:35-9:50 第一原理分子動力学計算コード STATE の京コンピュータでの
計算効率向上を目指した改良
稲垣耕司 (大阪大学) ----- D-5
- 9:50-10:05 電極界面の解析と拡張アンサンブル法の適用
杉野修 (東京大学) ----- D-6
- 10:05-10:20 高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究
大脇創 (日産自動車株式会社) ----- D-7
- 10:20-10:35 メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算
矢ヶ崎琢磨 (岡山大学) † ----- D-8
- 10:35-10:50 コーヒーブレイク

(座長：大久保毅 (東京大学))

◎戦略課題4 「エネルギー変換」

- 10:50-11:05 有機・色素増感型太陽電池における光電変換の基礎過程(2)
城野亮太 (東京大学) † ----- D-9
- 11:05-11:20 クラスレートハイドレート基のガス貯蔵材料の理論研究
水関博志 (東北大学) ----- D-10
- 11:20-11:35 外部電場下における C₆₀ 分子の光励起スペクトル第一原理計算
野口良史 (東京大学) † ----- D-11
- 11:35-11:50 実用材料の飛躍的高性能化にむけたマルチスケール組織設計・評価方法の開発
澤田英明 (新日鐵住金株式会社) ----- D-12
- 11:50-13:20 昼休み
- 部会小委員会 (担当者のみ)

(座長：吉澤香奈子 (東京大学))

◎材料戦略課題・特別支援課題提案

- 13:20-13:40 マルチスケール材料科学
毛利哲夫 (北海道大学／東北大学)
- 13:40-13:55 合金凝固組織の高精度制御を目指した dendrite 組織の大規模数値計算
大野宗一 (北海道大学) ----- E-1
- 13:55-14:10 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化
西松毅 (東北大学) ----- E-2
- 14:10-14:25 ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス
大野かおる (横浜国立大学) ----- E-3
- 14:25-14:40 コーヒーブレイク

(座長：小西優祐 (産業技術総合研究所))

◎計算物質科学分野振興

- 14:40-14:50 物性拠点・スパコン連携小委員会
川島直輝 (東京大学)
- 14:50-15:00 分子拠点
高塚和夫 (東京大学)
- 15:00-15:10 材料科学拠点
毛利哲夫 (北海道大学／東北大学)
- 15:10-15:20 CMSI 神戸・広報小委員会
藤堂眞治 (東京大学)
- 15:20-15:30 人材育成・教育小委員会
赤井久純 (大阪大学)
- 15:30-15:40 産官学連携小委員会
浅井美博 (産業技術総合研究所)
- 15:40- 閉会挨拶
- 16:00-18:00 企画室会議 (担当者のみ)