

PCoMS シンポジウム & 計算物質科学スーパーコンピュータ 共用事業報告会 2021

PCoMS Symposium & Annual Meeting of Supercomputing Consortium for Computational Materials Science 2021

2022年2月14日(月) 10:00~17:20 ・ 15日(火) 13:00~16:30
Feb.14 (Mon.) 10:00▶17:20・Feb.15 (Tue.) 13:00▶16:30, 2022



オンライン開催
Online virtual meeting

申込用URL <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R03/PCoMS-SCCMS-Sympo2021/>

事前登録制 2022年2月9日迄 Pre-registration required by Feb.9 (Wed.)

定員:100名 Capacity:100 persons

参加費:無料 Registration fee:free

共催

計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)
計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業

協賛

計算物質科学協議会



計算物質科学
人材育成コンソーシアム
Professional development Consortium
for Computational Materials Scientists

東北大学 金属材料研究所
計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1
Tel: +81-22-215-2282 Fax: +81-22-215-2164
Email: pcoms@imr.tohoku.ac.jp

Contact Address
Professional development Consortium for Computational Materials Scientists (PCoMS)
Institute for Materials Research, Tohoku University 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai,
980-8577 Japan

計算物質科学人材育成コンソーシアム (Professional development Consortium for Computational Materials Scientists: PCoMS) は、文部科学省 科学技術人材育成費補助事業 国立研究開発法人科学技術振興機構「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業 (次世代研究者プログラム)」による支援を受けています。
PCoMS is supported by the Project for Establishing a Consortium for the Development of Human Resources in Science and Technology (Program for Training Researchers for the Next Generation) promoted by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), Japan.

2月14日 (月) / Feb.14 (Mon.)

10:00▶10:10	オープニングアドレス / Opening address	
10:00▶10:10	開会挨拶 東北大学 金属材料研究所 古原 忠 所長 来賓挨拶 文部科学省 科学技術・学術政策局 人材政策課 人材政策推進室 Human Resources Policy of Science and Technology Policy Bureau, Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology	Tadashi FURUHARA [Director, Institute for Materials Research, Tohoku University]
10:10▶10:55	PCoMS活動報告セッション / PCoMS activity summary session	
10:10▶10:25	計算物質科学人材育成コンソーシアムの活動 — 多様性と持続性を目指して — Activity of PCoMS — Toward Diversity and Sustainability —	久保 百司 [東北大学] Momoji KUBO [Tohoku University]
10:25▶10:35	PCoMS東大拠点の活動報告 Annual Report of Activities of PCoMS Utokyo	川島 直輝 [東京大学] Naoki KAWASHIMA [The University of Tokyo]
10:35▶10:45	PCoMS分子科学研究所 活動報告 Activity Report of PCoMS in IMS	斉藤 真司 [分子科学研究所] Shinji SAITO [Institute for Molecular Science]
10:45▶10:55	大阪大学でのPCoMS活動報告 PCoMS activity at Osaka University	森川 良忠 [大阪大学] Yoshitada MORIKAWA [Osaka University]
10:55▶11:45	イノベーション創出人材育成対象者セッション / IPD session	
10:55▶11:20	蓄電池材料開発におけるPCoMS IPD プログラムでの経験の活用 Utilizing the Experience in PCoMS IPD Program for Materials Development of Rechargeable Batteries	李 弘毅* [東北大学] Hongyi LI* [Tohoku University]
11:20▶11:45	PCoMS IPD プログラムでの活動と第一原理計算による炭素鋼の腐食機構の解明 Activity in PCoMS IPD Program and First-Principles Analysis on the Corrosion Mechanisms of Carbon Steels	門脇 万里子* [現: 国立研究開発法人 物質・材料研究機構、前: 東北大学] Mariko KADOWAKI* [National Institute for Materials Science (NIMS)]
11:45▶13:00	昼休憩 / Lunch break	
13:00▶13:30	招待講演セッション1 / Invited talk session 1	
13:00▶13:30	構造材料におけるデータ駆動型研究 Data-driven research in structural materials	古原 忠 [東北大学 金属材料研究所 所長] Tadashi FURUHARA [Director, IMR, Tohoku University]
13:30▶14:30	次世代研究者セッション1 / NPD session 1	
13:30▶13:50	富岳を用いた磁性材料の探索とデータ解析 Design of magnetic materials by supercomputer "Fugaku"	福島 鉄也* [現: 東京大学、元: 大阪大学] Tetsuya FUKUSHIMA* [present: The University of Tokyo / former: Osaka University]
13:50▶14:10	分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能発現ダイナミクス解明 Elucidating functional motions of biomolecular machines by molecular simulations	岡崎 圭一* [分子科学研究所] Kei-ichi OKAZAKI* [Institute for Molecular Science]
14:10▶14:30	オートエンコーダの物性物理への応用事例の紹介 — 特徴の自己学習を利用したデータ解析 Application of Autoencoders to Condensed Matter Physics — Data Analysis Using Self-learning of Features	吉見 一慶* [東京大学] Kazuyoshi YOSHIMI* [The University of Tokyo]
14:30▶14:50	休憩 / break	
14:50▶15:50	次世代研究者セッション2 / NPD session 2	
14:50▶15:10	階層的動力学理論による有機分子のフェムト秒X線光化学 Femtosecond X-ray photochemistry of organic molecules: A multiscale approach	山崎 馨* [現: 理化学研究所、元: 東北大学] Kaoru YAMAZAKI* [present: RIKEN / former: Tohoku University]
15:10▶15:30	Influence of Transition Metal Doping on Thermoelectric Properties of SiGe Alloy	Nguyen Tien QUANG* [Osaka University]
15:30▶15:50	材料系・バイオ系の励起子ダイナミクスの理解と制御に向けて Toward Understanding and Controlling the Exciton Dynamics in Material and Biological Systems	藤田 貴敏* [現: 量子科学技術研究開発機構、元: 分子科学研究所] Takatoshi FUJITA* [present: The National Institutes for Quantum Science and Technology / former: Institute for Molecular Science]
15:50▶16:10	休憩 / break	
16:10▶17:10	次世代研究者セッション3 / NPD session 3	
16:10▶16:30	第一原理強相関計算手法とデータ科学解析の融合 — 鉄系超伝導体の超伝導転移温度を予測する学習器の構成 Combination of ab initio method for strongly correlated electron systems and data-science analysis — Construction of predictors for superconducting critical temperatures in iron-based superconductors	三澤 貴宏* [現: 北京量子情報科学研究院、元: 東京大学] Takahiro MISAWA* [present: Beijing Academy of Quantum Information Sciences / former: The University of Tokyo]
16:30▶16:50	グラフニューラルネットワークによる長時間分子動力学予測 Predicting long-time molecular dynamics with graph neural networks	芝 隼人* [現: 東京大学、元: 東北大学] Hayato SHIBA* [present: The University of Tokyo / former: Tohoku University]
16:50▶17:10	Liquid metal dealloying: Phase-field modeling, interface equilibrium and kinetics	Pierre-Antoine GESLIN* [present: Mateis Laboratory, Insa-Lyon / former: Tohoku University]
17:10▶17:20	PCoMSの活動及びセッションに関する講評 Keiji YAMAMOTO [Program Officer, Japan Science and Technology Agency / Emeritus Professor, Chiba University]	山本 恵司 [JST 科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業 プログラム主管 / 千葉大学 名誉教授]

2月15日 (火) / Feb.15 (Tue.)

13:00▶13:15	計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 活動報告セッション / SCCMS activity summary session	
13:00▶13:15	計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告 Annual Report of Activities of Supercomputing Consortium for Computational Materials Science	江原 正博 [分子科学研究所] Masahiro EHARA [Institute for Molecular Science]
13:15▶14:00	招待講演セッション2 / Invited talk session 2	
13:15▶14:00	「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現 Realization of Innovative Light Energy Conversion Materials utilizing the Supercomputer Fugaku	中嶋 隆人 [国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター] Takahito NAKAJIMA [RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)]
14:00▶14:40	計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業セッション1 / SCCMS session 1	
14:00▶14:20	Honeycomb Borophene: myth or reality?	Andrey LYALIN [Hokkaido University]
14:20▶14:40	Ba-Li oxyhydrideにおける集団運動の解析 Analysis of collective dynamics in Ba-Li oxyhydride	杉野 修 [東京大学] Osamu SUGINO [The University of Tokyo]
14:40▶15:00	休憩 / break	
15:00▶16:20	計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業セッション2 / SCCMS session 2	
15:00▶15:20	第一原理計算による半導体パワーデバイスの科学 Science in Semiconductor Power Devices Revealed by First-Principle Calculations	押山 淳 [名古屋大学 未来材料・システム研究所] Atsushi OSHIYAMA [IaMaSS, Nagoya University]
15:20▶15:40	遷移金属炭化物MXeneにおける電気二重層構造の表面官能基依存性の第一原理解析 First-principles analysis of the effect of surface functional group on electric double-layer structure of transition metal carbide MXene	島田 頌 [東京大学] Tatau SHIMADA [The University of Tokyo]
15:40▶16:00	tba	齋藤 晋 [東京工業大学] Susumu SAITO [Tokyo Institute of Technology]
16:00▶16:20	第一原理計算と機械学習法によるCuZn表面合金形成過程の研究 Atomic-scale processes of CuZn surface alloy formation studied by DFT and Machine Learning Methods	森川 良忠 [大阪大学] Yoshitada MORIKAWA [Osaka University]
16:20▶16:30	クロージングアドレス / Closing address	