

計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索 ――階層構造を解析する――

日時：2013年3月13日(13:00) - 15日(15:00)

場所：東北大学原子分子材料科学高等研究機構 セミナー室（2階）

主催：東北大学WPI-AIMR

協賛：CMSI「計算物質科学イニシアティブ」

組織委員：常行真司（東京大学）、赤木和人（東北大学）、尾畑伸明（東北大学）、鹿野豊（分子科学研究所）、塚田捷（東北大学）、廣川真男（岡山大学）、小谷元子（東北大学）

【13日】

時間帯	内容	講演者/討論者	座長
13:00-13:50	「計算材料科学の現状と課題（全体サーベイ）」	常行 真司（東京大学）	塚田 捷（東北大学）
13:50-14:10	「AIMRにおける数学-材料連携への挑戦」	小谷 元子（東北大学）	
14:10-14:40	「計算材料科学と階層性」	赤木 和人（東北大学）	杉野 修（東京大学）
14:40-15:00	討論	加藤 毅（京都大学）	
		杉野 修（東京大学）	
15:00-15:20	Tea Break		
15:20-15:50	「熱力学量と相転移（拡張アンサンブル法と熱力学的down-folding）」	吉本 芳英（鳥取大学）	杉野 修（東京大学）
15:50-16:20	「クラスター展開法による第一原理熱力学」	世古 敦人（京都大学）	
16:20-16:40	討論	杉野 修（東京大学） 大野 宗一（北海道大学）	
16:40-17:10	「確率的情報処理への統計力学的アプローチ」	田中 和之（東北大学）	安田 宗樹（東北大学）
17:10-17:30	討論	安田 宗樹（東北大学）	
		大関 真之（京都大学）	

【14日】

時間帯	内容	講演者/討論者	座長
09:00-09:40	「Materials Informaticsの諸問題」	田中 功（京都大学）	鹿野 豊（分子科学研究所）
09:40-10:00	討論	鹿野 豊（分子科学研究所）	
10:00-10:30	「コンピュータによる物質デザイン：ナノ構造の物性探索」	押山 淳（東京大学）	土田 英二（産業技術総合研究所）
10:30-10:50	討論	土田 英二（産業技術総合研究所）	
10:50-11:20	「離散と連続をつなぐ大規模シミュレーション」	大野 宗一（北海道大学）	針谷 祐（東北大学）
11:20-11:50	「流体力学極限について」	永幡 幸生（新潟大学）	
11:50-12:10	討論	針谷 祐（東北大学）	
12:10-13:10	昼食		
13:10-13:40	「高次元データの次元削減」	福水 健次（統計数理研究所）	平岡 裕章（九州大学）
13:40-14:00	討論	平岡 裕章（九州大学）	
14:00-14:30	「計算アルゴリズムと計算科学」	稲葉 真理（東京大学）	吉本 芳英（鳥取大学）
14:30-14:50	討論	星 健夫（鳥取大学）	
		吉本 芳英（鳥取大学）	
14:50-15:20	「計算トポロジーの現状」	平岡 裕章（九州大学）	中村 壮伸（東北大学）
15:20-15:40	討論	中村 壮伸（東北大学）	
15:40-16:20	ポスターセッション *裏面ご参照ください		
16:20-17:50	総合討論「計算材料科学と数学の連携」	常行 真司（東京大学） 田中 功（京都大学） 土田 英二（産業技術総合研究所） 鹿野 豊（分子科学研究所） 廣川 真男（岡山大学） 赤木 和人（東北大学） 小谷 元子（東北大学）	塚田 捷（東北大学）

【15日】

時間帯	内容	講演者/討論者	座長
09:00-09:40	「ゆらぎ、遅い緩和、階層性」	山本 量一（京都大学）	赤木 和人（東北大学）
09:50-10:30	「計算物質科学の新手法」	杉野 修（東京大学）	
10:40-11:20	「超離散化によるパターンの枠組みの導出」	加藤 毅（京都大学）	尾畑 伸明（東北大学）
11:30-12:10	「量子ウォークの統計的性質」	瀬川 悦生（東北大学）	
12:10-13:30	昼食		
13:30-14:10	「数学・計算材料科学・HPC分野の融合としての大行列数理論アルゴリズム」	星 健夫（鳥取大学）	吉本 芳英（鳥取大学）
14:20-15:00	「(人工)原子と光の相互作用の数理論から量子デバイスへ」	廣川 真男（岡山大学）	

【ポスター発表】

タイトル	発表者
Estimating stress fields via Riemann-Cartan geometry	井上 和俊 (東北大学)
ダイヤモンド半導体の電極形成に関する理論的研究	上田 陽亮 (北陸先端科学技術大学院大学)
ポテンシャル面の非調和性を用いた構造探索手法	遠藤 辰哉 (東京大学)
Dispersion of Nanoparticles with control theory	小林 幹 (東北大学)
Connectivities of Networks and Subnetworks	田中 守 (東北大学)
Theoretical analysis on the optoelectronic properties of single crystal of thiophene-furan-phenylene co-oligomers	田村 宏之 (東北大学)
効率的な位相空間探索の方法について	土田 英二 (産業技術総合研究所)
汎用ポテンシャルに対する圧力場計算の方法	中村 壮伸 (東北大学)
非平衡状態における等重率の仮定の有用性：Pottsモデルの定温緩和における検証	能川 知昭 (東北大学)
Theory of induced spin polarization at molecule-metal interfaces	濱田 幾太郎 (東北大学)
第一原理量子モンテカルロ法による分子間相互作用の高精度計算	本郷 研太 (北陸先端科学技術大学院大学)
On the optimal position of heat diffusion nano particles	松江 要 (東北大学)
Rheology and Topological Characterization of Colloidal Crystal	観山 正道 (東北大学)
局所Z ₂ ベリ-位相のモンテカルロ計算	本山 裕一 (東京大学)
動的異方性制御を用いた量子相転移の数値的解析	安田 真也 (東京大学)
Molecular dynamics study of frictional properties of ionic liquids	Filippo Federici Canova (東北大学)
New Growth Mechanism of Cubic Rh Clusters Composed of 8–12 Atoms Found by the Method of Euclidean Designs	Yunye Liang (東北大学)