

# 計算で物事を理解する予測する

～ 産業界の実問題に立ち向かうサイエンス～

Nov 25,26 2021 ZOOM

11月25日 13:00～

開会挨拶 小林 喜光 (日本化学会・会長)

趣旨説明 中村 振一郎 (理研)

13:20～15:10

理研が発信を続ける新たなパラダイム

司会 甘利 俊一 (理研・帝京大)

杉山 将 (理研)

「機械学習で物事を理解・予測する：AIP センターの挑戦」

泰地 真弘人 (理研)

「分子動力学シミュレーション専用計算機 MDGRAPE-4A の開発」

司会：肥山 詠美子 (東北大学、理研)

初田 哲男 (理研)

「分野連携で拓く最先端の数理科学」

～ Pause café ～

15:30～17:30

実験科学フロントランナーが計算科学に求める挑戦

司会 原 正彦 (東工大、理研)

内田 欣吾 (龍谷大)

「生物に学んだ光応答性結晶システム」

沼田 圭司 (理研、京都大)

「構造タンパク質とマテリアル DX」

司会 和田 智之 (理研)

中村 龍平 (理研、東工大)

「地殻元素を用いた水電解触媒 ～ 現状と課題」

藤井 克司 (理研)

「再生可能エネルギー利用を具現化するための電気化学反応を用いたエネルギー貯蔵  
— 計算科学へ向けたメッセージ —」

17:30～18:30

量子コンピュータの現在と未来

司会 丸山 耕司 (ウルフラム 理研)

廣川 真男 (九州大)

「計算機を開発する視点から見た量子コンピュータ」

Gao QI (三菱ケミカル)

「量子コンピュータ分野における三菱ケミカルの研究活動」

-----11月26日-----

9:30～10:30

量子化学のフロンティア

司会 杉本 学 (熊本大)

塩崎 亨 (Qsimulate)

「QSimulate: 量子化学で企業 R&D を変える」

立川 仁典 (横浜市立大)

「水素の量子ゆらぎを考慮した第一原理分子理論の構築と重水素化学への展開」

～ Pause café ~

10:45～11:45

データサイエンスのフロンティア

司会 安達 泰治 (京大)

中本 高道 (東工大)

「多次元データ解析を用いた香りの再現」

小野 謙二 (九州大)

「データ駆動型のモデリング研究」

～ Pause repas ~

13:00～14:30

産業界で実践されている計算科学

司会 茂本 勇 (東レ)

松崎 洋市 (日本製鉄)

「量子化学計算の産業応用」

西山 裕介 (理研・JEOL RESONANCE)

「NMR 結晶学：microED、固体 NMR、計算科学の融合」

司会 檜貝 信一 (アーク・イノベーション)

佐々木 裕 (東亜合成)

「化学系企業で物理と化学の狭間で考えてきたこと」

～ pause café ~

14:45～16:15

第一原理計算のフロンティア

司会 宮本 良之 (産総研)

大谷 実 (筑波大)

「固液界面における電気化学・触媒反応のシミュレーション技術開発と最近の適用研究」

田中 功 (京都大)

「データ駆動による新しい無機材料の発見」

Mauro Boero (IPCMS, University of Strasbourg and CNRS)

“Exploring a new environmental-friendly possibility against heavy metal pollution of water and exploiting time reversibility of the microscopic equations of motion”

～ Pause café ～

16:30～17:30

### 理研が拓く健康未病の近未来

司会 桜田 一洋 (慶應義塾大、理研)

渡辺 恭良 (理研)

「プレジジョンヘルスケア/メディシンによるヘルスケアイノベーション

Healthcare Innovation based on Precision Healthcare and Precision Medicine」

司会 渡辺 恭良 (理研)

桜田 一洋 (慶應義塾大、理研)

「生命医科学と情報科学の新たな融合への挑戦 ～AI、データサイエンスと医療～」

17:30～18:00

### 最終セッション 圏論と自然知能

司会 田邊 國士 (統数研、早稲田大学、理研)

堀 裕和 (山梨大学、理研)

「自然知能研究の展開：ものごとを理解し予測する機能はどのように構成されるか」

ご講評 田邊 國士 (統数研、早稲田大学、理研)