

2021年 理研シンポジウム



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 ～

2021年11月25(木)26(金) ZOOM オンライン開催

参加費無料

サイエンスを如何にしたら価値に変えられるか、このシンポジウムはそれを問う試みです。現代社会は、エネルギー、環境、人口、高齢化という難問を抱え、日本のものづくりの弱体化が危惧されています。民間企業では時代に即した研究開発の進め方が死活問題です。計算科学の使命は分野融合という「横糸」であり、今回も多くの専門分野が交叉します。専門を定め深く掘る「縦糸」とともに最先端の理論と実装可能なモデル化による実問題の解決を目指します。実験の先駆者、原子分子の計算科学、データサイエンス、未病健康の新サイエンス、量子コンピュータ、産業界の実テーマ、そして「圏論」のフロントランナーにご発表いただきます。

主催 理化学研究所 中村特別研究室、九州大学マス・フォア・インダストリ研究所(「AIMaP」受託機関)

共催 理研iTHEMS、株式会社理研数理、理研AIP

協賛 日本化学会、日本応用数理学会、分子科学会、応用物理学会、日本物理学会、高分子学会、VCADシステム研究会
形の科学会、企業研究会

11/25 DAY 1

開会の辞 趣旨説明

13:00-13:20

小林 喜光 日本化学会・会長 開会の挨拶

中村 振一郎 理化学研究所 趣旨説明

司会 甘利 俊一 理化学研究所 帝京大

セッション1

理研が発信を続ける
新たなパラダイム

13:20-15:10

杉山 将 理化学研究所 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 理化学研究所 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 理化学研究所

初田 哲男 理化学研究所 分野連携で拓く最先端の数理解科学

Pause café

司会 原 正彦 東工大 理化学研究所

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 理化学研究所 京都大 構造タンパク質とマテリアルDX

司会 和田 智之 理化学研究所

中村 龍平 理化学研究所 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 理化学研究所 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～

セッション2

実験科学フロント
ランナーが計算科学
に求める挑戦

15:30-17:30

司会 丸山 耕司 理化学研究所 ウルフラム

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

セッション3

量子コンピュータの
現在と未来

17:30-18:30

セッション4

量子化学の
フロンティア
9:30-10:30

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

セッション5

データサイエンス
のフロンティア
10:45-11:45

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

セッション6

産業界で実践
されている計算科学
13:00-14:30

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 理化学研究所
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

セッション7

第一原理計算の
フロンティア
14:45-16:15

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

セッション8

理研が拓く
健康未病の近未来
16:30-17:30

司会 桜田 一洋 慶應義塾大 理化学研究所

渡辺 恭良 理化学研究所 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

司会 渡辺 恭良 理化学研究所

桜田 一洋 慶應義塾大
理化学研究所 生命医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～

セッション9

圏論と自然知能
17:30-18:00

司会 田邊 國士 統数研 早稲田大 理化学研究所

堀 裕和 山梨大
理化学研究所 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

閉会の辞

講評 田邊 國士 統数研 早稲田大 理化学研究所

お申込み

1 QRコード or
中村特別研究室 HP
から申込みフォームへ

QR



OR

中村特別研究室 HP

www2.riken.jp/photoandsonic/symposium_2021.html2 申込みフォームを
入力▶送信3 自動返信メール
が届きます。

申込み完了

(11/22 申込み〆切)

お問合せ先：nakamuralab_symp@ml.riken.jp