

# 計算で物事を理解する予測する

～ 産業界の難課題が求めている解決パラダイムの提案、  
三つの計算科学、連続体、分子、そして統計～

**日時** 2018.10.15(月) - 16(火) (15日: 9:30 受付開始)

**会場** 理化学研究所 鈴木梅太郎記念ホール

## 申込み

Email: [kanda@riken.jp](mailto:kanda@riken.jp) Tel: 048-467-9314

理化学研究所ウェブサイト掲載ページ: <http://www.riken.jp/pr/events>

ご所属 / 氏名 / メールアドレスを明記の上、上記メールアドレス宛にお申し込みください。

計算科学・計算工学の大きな潮流がさらに世代を超えて躍進し、役割を果たし続けることをねらいとします。それは“最先端の理論”と“実現可能なモデル化・実装コード化”により“社会の課題解決につながる”ことです。フロントランナーを迎えました。理研VCADプロジェクトを巣だって新フロンティアを疾走している研究者、原子分子レベルの計算科学の旗手、産業界で計算科学・計算工学を実践中の企業戦士、統計解析手段を実践活用している研究者、加えて「圏論」の応用の先端を走る研究者です。到達点を公開し、切磋琢磨しつつ、展望を浮かび上がらせるシンポジウムです。ふるってお集まりください。

- 主催** 国立研究開発法人理化学研究所 中村特別研究室、  
文部科学省委託事業「数学アドバンスイノベーションプラットフォーム (AIMaP)」
- 共催** 株式会社トプコン、株式会社先端力学シミュレーション研究所、インテグレーションテクノロジー株式会社、  
三菱ケミカル株式会社
- 後援** VCAD システム研究会、分子科学会、日本化学会、日本物理学会、応用物理学会、高分子学会、日本応用数理学会

## 10 / 15 MON

10:00-10:15 中村 振一郎 (理化学研究所) 開会の辞

### 第1セッション 連続体のフロンティア (その1)

10:15-10:45 小野 謙二 (九州大学 情報基盤研究開発センター)

10:45-11:15 浜 孝之 (京都大学 大学院エネルギー科学研究科)

11:15-11:45 杉山 和靖 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)

11:45-12:15 平川 和明 (株式会社先端力学シミュレーション研究所)

### 第2セッション 圏論とその応用

13:00-13:30 堀 裕和 (山梨大 先端材料理工学科)

13:30-14:00 成瀬 誠 (情報通信研究機構 ネットワークシステム研究所)

### 第3セッション 先端計測は数理解析を要求する

14:00-14:30 大竹 淑恵 (理化学研究所 中性子ビーム技術開発チーム)

14:30-15:00 秋葉 正博 (株式会社トプコン R&D 企画部)

### 第4セッション データサイエンス

15:15-15:45 溝口 照康 (東京大学 生産技術研究所)

15:45-16:15 茂本 勇 (東レ株式会社 先端材料研究所)

16:15-16:45 神田 英一郎 (川崎医科大学)

16:45-17:15 諫田 克哉 (理化学研究所 中村研)

17:15-17:45 檜貝 信一 (株式会社村田製作所 先端技術研究開発部)

18:00- 懇親会及び宮崎敦子 (理研 中村研) プレゼン

## 10 / 16 TUE

### 第5セッション 電気化学

9:00-9:30 大谷 実 (産業技術総合研究所)

9:30-10:00 野田 祐輔 (名古屋大学 大学院工学研究科)

10:00-10:30 河村 芳海 (トヨタ自動車株式会社)

### 第6セッション 分子科学・量子化学のフロンティア (その1)

10:30-11:00 立川 仁典 (横浜市立大学 大学院)

11:00-11:30 今村 穰 (AGC 株式会社 先端技術研究所)

11:30-12:00 前田 理 (北海道大学 大学院)

### 第7セッション 分子科学・量子化学のフロンティア (その2)

13:00-13:30 石北 央 (東京大学 先端科学技術研究センター)

13:30-14:00 畠山 允 (山口東京理科大学)

14:00-14:30 小林 高雄 (三菱ケミカル株式会社)

### 第8セッション 第一原理計算のフロンティア

14:45-15:15 宮本 良之 (産業技術総合研究所)

15:15-15:45 三上 昌義 (三菱ケミカル株式会社)

15:45-16:15 大野 かおる (横浜国立大学 大学院)

### 第9セッション 連続体のフロンティア (その2)

16:15-16:45 長嶋 利夫 (上智大学 理工学部)

16:45-17:15 井上 康博 (京都大学 ウイルス・再生医科学研究所)

17:15-17:45 安達 泰治 (京都大学 ウイルス・再生医科学研究所)

17:45-18:15 牧野内 昭武 (理化学研究所) 閉会の辞



15  
MON

|                          |                               |  |
|--------------------------|-------------------------------|--|
| 10:00-10:15              | 中村 振一郎 (理化学研究所)               | 開会の辞 趣旨と目的地について                                |
| 第1セッション 連続体のフロンティア (その1) |                               |  |
| 10:15-10:45              | 小野 謙二 (九州大学 情報基盤研究開発センター)     | Toward Data-Driven Equations                   |
| 10:45-11:15              | 浜 孝之 (京都大学 大学院エネルギー科学研究科)     | 実用的展開が期待される結晶塑性シミュレーション                        |
| 11:15-11:45              | 杉山 和靖 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)       | ボクセルベースの流体構造連成シミュレーション                         |
| 11:45-12:15              | 平川 和明 (株式会社先端力学シミュレーション研究所)   | 不具合は設計室で起きてるんじゃない! 現場で起きてるんだ! ...けれど設計室での解析も大事 |
| 第2セッション 圏論とその応用          |                               |  |
| 13:00-13:30              | 堀 裕和 (山梨大 先端材料理工学)            | 非自明な現象をいかにして捉え制御するか                            |
| 13:30-14:00              | 成瀬 誠 (情報通信研究機構 ネットワークシステム研究所) | 光を用いた意思決定メカニズムの理論と実験                           |
| 第3セッション 先端計測は数理解析を要求する   |                               |  |
| 14:00-14:30              | 大竹 淑恵 (理化学研究所 中性子ビーム技術開発チーム)  | インフラ、ものづくり現場利用を目指した RANS 小型中性子源システム            |
| 14:30-15:00              | 秋葉 正博 (株式会社トプコン R&D 企画部)      | 光干渉断層計 OCT を用いた眼底血流計測からわかること                   |
| 第4セッション データサイエンス         |                               |  |
| 15:15-15:45              | 溝口 照康 (東京大学 生産技術研究所)          | データ駆動型手法による界面構造探索とスペクトル解釈                      |
| 15:45-16:15              | 茂本 勇 (東レ株式会社 先端材料研究所)         | インフォマティクスは素材産業の救世主か?                           |
| 16:15-16:45              | 神田 英一郎 (川崎医科大学)               | 医療ビックデータを用いた疾患病態の解明について -慢性腎臓病を中心に-            |
| 16:45-17:15              | 諫田 克哉 (理化学研究所 中村研)            | 健診データとレセプトで あなたの未病度を計る                         |
| 17:15-17:45              | 檜貝 信一 (株式会社村田製作所 先端技術研究開発部)   | 村田製作所における計算科学技術活用事例                            |
| 18:00-                   | 懇親会及び宮崎敦子 (理研 中村研) プレゼン       | ドラムをたたいて認知症に喝! 脳科学が活かされる現場                     |

16  
TUE

|                                |                            |   |
|--------------------------------|----------------------------|---|
| 第5セッション 電気化学                   |                            |   |
| 9:00-9:30                      | 大谷 実 (産業技術総合研究所)           | 電気化学反応を第一原理シミュレーションから理解する   |
| 9:30-10:00                     | 野田 祐輔 (名古屋大学 大学院工学研究科)     | 情報科学と第一原理計算に基づく Li イオン電池用固体電解質の物性評価                                   |
| 10:00-10:30                    | 河村 芳海 (トヨタ自動車株式会社)         | シミュレーションを活用した自動車用材料開発   |
| 第6セッション 分子科学・量子化学のフロンティア (その1) |                            |   |
| 10:30-11:00                    | 立川 仁典 (横浜市立大学 大学院)         | プロトンの量子効果を考慮した多成分系分子理論の構築   |
| 11:00-11:30                    | 今村 穰 (AGC 株式会社 先端技術研究所)    | 第一原理計算に基づく機能性材料開発   |
| 11:30-12:00                    | 前田 理 (北海道大学 大学院)           | 化学反応経路の系統的な理論予測を目指した反応経路自動探索法の開発                                      |
| 第7セッション 分子科学・量子化学のフロンティア (その2) |                            |   |
| 13:00-13:30                    | 石北 央 (東京大学 先端科学技術研究センター)   | 実験結果ありきではない蛋白質分子の理論研究をめざして  |
| 13:30-14:00                    | 畠山 允 (山口東京理科大学)            | 光合成の酸素発生中心と光電荷分離について  |
| 14:00-14:30                    | 小林 高雄 (三菱ケミカル株式会社)         | 電子励起状態ポテンシャルの形と光化学反応 ~光開閉環反応を例として~                                    |
| 第8セッション 第一原理計算のフロンティア          |                            |   |
| 14:45-15:15                    | 宮本 良之 (産業技術総合研究所)          | 非平衡励起状態を利用した材料産業へ向けて  |
| 15:15-15:45                    | 三上 昌義 (三菱ケミカル株式会社)         | Eu <sup>2+</sup> /Ce <sup>3+</sup> 付活蛍光体の第一原理バンド計算: 結晶サイトエンジニアリングに向けて |
| 15:45-16:15                    | 大野 かおる (横浜国立大学 大学院)        | 第一原理フェーズ・フィールド法の開発  |
| 第9セッション 連続体のフロンティア (その2)       |                            |   |
| 16:15-16:45                    | 長嶋 利夫 (上智大学 理工学部)          | 拡張有限要素法 (XFEM) による、構造物のき裂進展シミュレーション                                   |
| 16:45-17:15                    | 井上 康博 (京都大学 ウイルス・再生医科学研究所) | 上皮形態形成を捉える多細胞力学シミュレーション   |
| 17:15-17:45                    | 安達 泰治 (京都大学 ウイルス・再生医科学研究所) | 骨の形態リモデリングと代謝の in silico の実験  |
| 17:45-18:15                    | 牧野内 昭武 (理化学研究所)            | 閉会の辞 明治 150 年、理研 100 年、VCAD 研究会 50 年                                  |

<申込み> FAX 048-467-8705 Email: [kanda@riken.jp](mailto:kanda@riken.jp)

|      |           |           |                     |              |
|------|-----------|-----------|---------------------|--------------|
| ふりがな |           |           | 所属                  |              |
| 氏名   |           |           |                     |              |
| お電話  |           |           | Email アドレス          |              |
| 参加日  | 15月 • 16火 | ○でお囲みください | 懇親会 15日 18:00-20:00 | 会費 4000円 諾・否 |