

AIMaP 研究集会等実施報告書

(Part 1/4) 名称・重点テーマ・キーワード等

項目	内容
名称	〈 理研シンポジウム〉 計算で物事を理解する予測する
採択番号	2018A015
重点テーマ	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・応用数理
キーワード	応用数理、統計数理、連続体、流体力学、分子計算、第一原理計算、圏論の応用
主催機関	国立研究開発法人 理化学研究所 科技ハブ産連本部 バトンゾーン研究推進プログラム 中村特別研究室
運営責任者	中村振一郎
開催日時(開始)	2018/10/15 10:00
開催日時(終了)	2018/10/16 18:15
開催場所	国立研究開発法人 理化学研究所 和光 大河内ホール

(Part 2/4) 最終プログラム・参加者数

項目	内容
最終 プログラム	<p>10:00-10:15 中村 振一郎 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)</p> <p>10:15-10:45 小野 謙二(九州大学 情報基盤研究開発センター 教授) Toward Data-Driven Equations 帰納的・演繹的手法を補完的に用いながら現象を探る試みについてご紹介します。</p> <p>10:45-11:15 浜 孝之(京都大学 大学院エネルギー科学研究科 准教授) 実用的展開が期待される結晶塑性シミュレーション 近年急速な発展を遂げて塑性加工解析への応用など実用的な展開が期待される結晶塑性シミュレーションについて、講演者の最近の取り組みを紹介する。</p> <p>11:15-11:45 杉山 和靖(大阪大学 大学院基礎工学研究科 教授) ボクセルベースの流体構造連成シミュレーション 多媒質幾何形状を表現するボクセルデータに適した計算手法の開発と、気液二相攪拌や血流など、機械工学、生体力学の問題への解析例について紹介します。</p> <p>11:45-12:15 平川 和明((株)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 航空機などの設計・製造現場における解析の活用や、AI・IDCAE などのこれからの展望についてご紹介します。</p> <p>第2セッション 圏論とその応用</p> <p>13:00-13:30 堀 裕和(山梨大 先端材料理工学科 教授) 非自明な現象をいかにして捉え制御するか 圏論に基づく数理的考察に基づき非自明性を支配する特異性の型を特定し制御する手法について考察する。</p> <p>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 総括研究員) 光を用いた意思決定メカニズムの理論と実験 自然知能の実践例として、光を用いた意思決定機構の先端を議論する。</p> <p>第3セッション 先端計測は数理解析を要求する</p> <p>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 TL) 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</p>

ラボレベルでの中性子による非破壊計測システムの目指す最先端、バルク鉄鋼材料組織評価、インフラ大型構造物内部非破壊観察評価の最新情報などを紹介します。

14:30-15:00 秋葉 正博(株式会社トプコン R&D 企画部 部長)

光干渉層計 OCT を用いた眼底血流計測からわかること

眼底の断層画像を抽出する OCT は眼底構造のみならず眼底血流のダイナミックな情報を取得することが出来ます。本講ではその臨床での活用例をご紹介します。

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 准教授)

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

データ駆動型手法を活用することにより界面構造を高速に決定する手法や、スペクトルを解釈する手法の開発を行っております。それらの研究成果について発表します。

15:45-16:15 茂本 勇(東レ株式会社 先端材料研究所 主席研究員)

インフォマティクスは素材産業の救世主か？

高分子機能膜設計の事例を中心に、インフォマティクスを含めた計算科学の可能性と限界を探る

16:15-16:45 神田 英一郎(川崎医科大学 教授)

医療ビッグデータを用いた疾患病態の解明について 一慢性腎臓病を中心に

患者データを集積しビッグデータが構築され、統計解析と機械学習を用いて病態の解明に迫ります。

16:45-17:15 諫田 克哉(理化学研究所 中村特別研究室)

健診データとレセプトで あなたの未病度を計る

健診データとレセプトを合わせて解析することで、生活習慣病の危険度を予測する。

17:15-17:45 檜貝 信一(株式会社村田製作所 技術・事業開発本部 プリンシパルリサーチャー)村田製作所

における計算科学技術活用事例

表題について詳しく紹介すると共に、産業界における同技術活用の課題について、ご参加の皆様と議論したい

10月16日 受付開始 8:30

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 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター チーム長)

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

電気化学反応のメカニズムは、最新のシミュレーション技術でどこまで明らかになるか。

9:30-10:00 野田 祐輔(名古屋大学 大学院工学研究科 物質科学専攻 特任教授)

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

遺伝的アルゴリズム・凸包解析と第一原理計算による Li イオン伝導性固体電解質の研究成果を紹介する。

10:00-10:30 河村 芳海(トヨタ自動車株式会社 未来創生センター グループ長)

シミュレーションを活用した自動車用材料開発

主に電池用材料の事例を中心に、計算科学を活用した材料開発について紹介する。

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 大学院生命ナノシステム科学研究科 教授)

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

プロトン自身の量子力学的効果を顕にとりいれた量子化学計算方法を構築しています

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

第一原理計算を用いた無機・有機材料開発を中心に紹介する。

11:30-12:00 前田 理(北海道大学 大学院理学研究院化学部門 教授)

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

未知の反応経路をコンピュータで自動探索する人工力誘起反応法について紹介する。

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 教授)

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

先入観を持たず、蛋白質分子構造の内包する反応メカニズムについて展望したい。

13:30-14:00 畠山 允(山口東京理科大学 講師・理化学研究所 客員研究員)

光合成の酸素発生中心と光電荷分離について

酸素発生メカニズムの研究事例と電荷輸送との関連についてご紹介します

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～

ジリアルルエテンを中心とした光開閉環反応を非断熱動力学的観点も踏まえて議論する。

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 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター チーム長)

非平衡励起状態を利用した材料産業へ向けて

電子励起による材料構造変化は、従来の熱平衡理論の範疇を超えた材料加工技術となりうる。第一原理計算による解析と予測に向けて我々は何ができるかをまとめる

15:15-15:45 三上 昌義(三菱ケミカル株式会社)

Eu²⁺/Ce³⁺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

LED 用蛍光体の母体設計～発光中心同定・発光エネルギー予測に関する理論解析事例を紹介する予定である。

15:45-16:15 大野 かおる(横浜国立大学 大学院工学研究院 知的構造の創生部門教授)

第一原理フェーズ・フィールド法の開発

	<p>一切のパラメタを用いない新手法で 1300K の Ni-Al 合金の微細組織や相図を再現した。</p> <p><u>第9セッション 連続体のフロンティア(その2)</u></p> <p>16:15-16:45 長嶋 利夫(上智大学 理工学部 機能創造理工学科 教授)</p> <p>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</p> <p>構造物の強度健全性評価のために実施している、金属材料や CFRP 積層材料を対象とした XFEM によるき裂進展解析事例を紹介する。</p> <p>16:45-17:15 井上 康博(京都大学 ウイルス・再生医科学研究所 准教授)</p> <p>上皮形態形成を捉える多細胞力学シミュレーション</p> <p>上皮形態形成における細胞の力学的な振る舞いを数理モデル化し、多細胞力学シミュレーションにより上皮組織の形づくりを理解する。</p> <p>17:15-17:45 安達 泰治(京都大学 ウイルス・再生医科学研究所 教授)</p> <p>骨の形態リモデリングと代謝の in silico の実験</p> <p>骨の細胞活動を制御する力学・生化学シグナルを数理モデル化し、骨の形態リモデリングと代謝のダイナミクスを in silico 観察・予測する。</p> <p><u>閉会にあたって</u></p> <p>17:45-18:15 牧野内 昭武(理化学研究所)</p> <p>明治 150 年、理研 100 年、VCAD 研究会50年</p>
参加者数	数学・数理科学 21 人、諸科学 36 人、産業界 91 人、その他 115 人

(Part 3/4) 論点・現状・今後の展開

項目	内容
当日の論点	かつて技術立国であったが、現在の日本は経済成長がとうとうマイナスに転じ(2018)、働く人の意欲は減少し、かつ働き方改革も加わり、成長に希望が持てない。さらに労働人口が減りつつあり、若い人が減る一方である。そのなかで、科学技術は、学術だけを追求することで良いのか？やはり、「この先、日本が何で喰ってゆくのか」という課題に解を与える、あたらしい産業を生み出す」ことに役に立たなければ、国は消滅に向かうのではないか？そこで、応用数理を共通言語とする計算科学は細分化された専門を超えて新しい希望を与える可能性がある。
研究の現状と課題(既にできていること、できていないことの切り分け)	全ての発表は、厳選されたフロントランナーによるものであったので、どれをとっても超一流の秀逸の白眉であった。一方、現状の日本では大学までの教育カリキュラムに根源的な細分化志向という瑕疵があるために、やむを得ないとはいえ、発表者が専門の細分化された言葉に頼るしかないので、マクロ連続体、ミクロ量子論、統計数理、そして圏論、の間の相互交流が限定的であった。
新たに明らかになった課題	圏論という素晴らしい数学を、堀裕和先生のように物理、化学そして生物を対象として解説できる識者がもっと欲しい。
今後解決すべきこと、今後の展開・フォローアップ	上記の課題、「日本がこれから何で喰っていくか、新産業の湧き出しに貢献したい」という問題意識を共有する、計算科学ネットワークを構築する。

