

AIMaP 研究集会等実施報告書

(Part 1/4) 名称・重点化連携分野・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	2021A004
重点化連携分野	数理科学・計算科学の新展開と学際的展開 (量子情報・計算科学の学際的研究)
キーワード	分子科学計算、圏論、データサイエンス、未病健康、量子コンピュータ、 原子分子の計算科学、先端の実験、産業界の実テーマ、未病健康の新サイエンス
主催機関	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、九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
運営責任者	中村 振一郎(理化学研究所)
開催日時(開始)	2021/11/25 13:00
開催日時(終了)	2021/11/26 19:10
開催場所	■オンライン ・□オンサイト(会場:)

(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	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、理研) 初田 哲男 (理研) 「分野連携で拓く最先端の数理科学」

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・理研）

「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」

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（京都大）

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」

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」

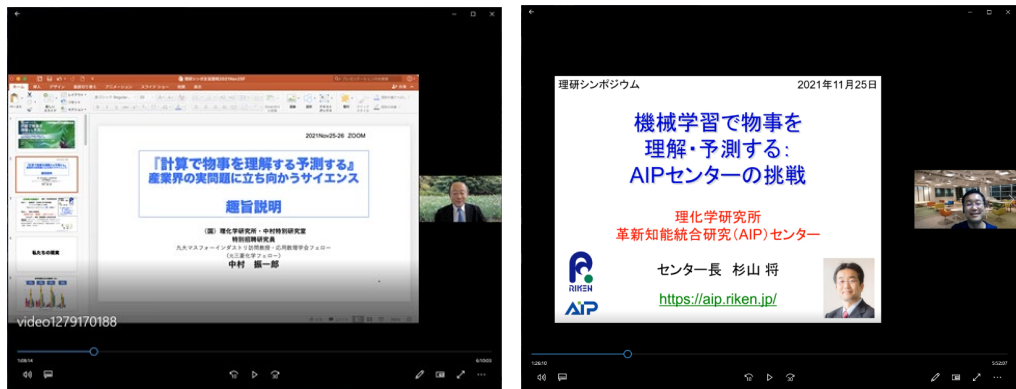
参加者数	西山 裕介（理研・JEOL RESONANCE） 「NMR 結晶学: microED、固体 NMR、計算科学の融合」 司会 檜貝 信一（アーク・イノベーション） 佐々木 裕（東亜合成） 「化学系企業で物理と化学の狭間で考えてきたこと」
	14:45～16:15 第一原理計算のフロンティア 司会 宮本 良之（産総研） 大谷 実（筑波大） 「固液界面における電気化学・触媒反応のシミュレーション技術開発と最近の適用研究」 田中 功（京都大） 「データ駆動による新しい無機材料の発見」 Mauro Boero（IPCMS, University of Strasbourg and CNRS） “Exploring a new environmental-friendly possibility against heavy metal pollution of water and exploiting time reversibility of the microscopic equations of motion” 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」 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、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、理研） 数学・数理科学: 16 人, 諸科学: 156 人, 産業界: 174 人, その他: 23 人 事前登録者数: 369 人 (研究機関 73 名, 大学 99 名, 産業界: 174 名, その他: 23 名) 1 日目参加者数: 229 人, 2 日目参加者数: 206 人

(Part 3/4) 論点・現状・今後の展開

数学・数理学の有効性を知っていただくための訴求活動としてどういった課題に取り組み、どういった効果が得られたかに焦点を当てながらご記入ください。

項目	数学と応用数理 そして 分野横断の課題
当日の論点	例外的な方を別として、いまの自分の仕事に直接関係あることだけを聞く人がやはり、とても多い。このシンポはそれをつなぐ横系、応用数理にあるのだが、日本のたこつぼへの「ひきこもり」現象は年々改善されない、これが課題であろう。
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）	それでも、2018 年以降、今回の 3 回目になって、横系に気が付きはじめた若手が増えつつあるので期待したい。問題は、中堅、シニアにあるのかもしれない。
新たに明らかになった課題	数学会、応用数理学会、IMI(AIMaP)の区別が大半の人にできていない。
今後解決すべきこと、今後の展開・フォローアップ	1) 民間企業で採用に影響のあるひとびとへの宣伝活動。 2) 応用数理の側のシニアは、能力はあるのに、民間の実体の把握、産業界の実課題を知らなすぎる。産業界の側から、もっと伝達する必要がある。 3) 応用数学の教育システムを民間企業に即したカリキュラムに変えてゆく長い大変な地道な努力。

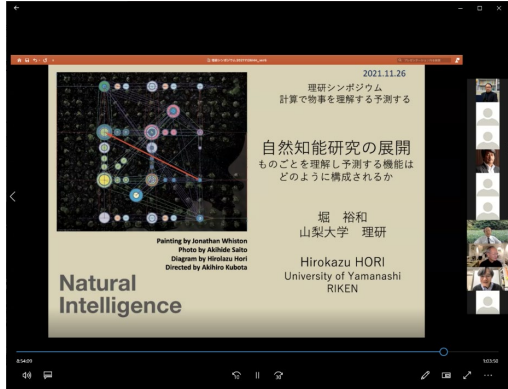
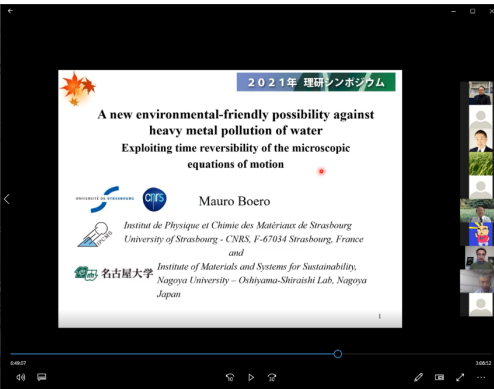
(Part 4/4) 写真

項目	内容
添付写真 1	

添付写真 2



添付写真 3



(20210408ver.)