

第 35 回スパコンセミナー

「分子・材料設計の新たな手法開拓に向けて ～インフォマティクスのアプローチを中心に～」

開催結果報告

本年度は、産応協設立 11 年の年として、次の 10 年に向けたユーザコミュニティ発展を目指した活動を展開し、年 3 回のスパコンセミナー「旬なトピックス含めた啓蒙活動とニーズ発掘」の企画・開催することとなりました。

本年度第 1 回(通算 35 回)スパコンセミナーは、平成 28 年 9 月 21 日(水)午後 1 時から 5 時まで、機械振興会館地下 3 階研修-1(東京都港区・東京タワー前)で行いました。

今回は、分子・材料設計の新たな手法開拓、特にインフォマティクスのアプローチを重点テーマとして開催しました。

スーパーコンピューティングの応用は、科学研究から工学、社会科学など、対象が広がると同時に、その社会的意義・期待も高まりつつあります。本セミナーでは、関係分野の有識者をお招きし、最新動向、事例、今後の展望等について講演をいただきました。

[実施概要]

主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）

日時：2016 年 9 月 21 日(水) 13:00～17:00

場所：機械振興会館 地下 3 階研修-1

(東京都港区・東京タワー前)

参加者数：47 名（内、参加登録:33 名<32 名/当日 1 名>、講師/WG 委員/事務局:14 名）



第 35 回スパコンセミナー参加風景
平成 28 年 9 月 21 日(水)
午後 1 時から 5 時



テーマ：「分子・材料設計の新たな手法
開拓に向けて
～インフォマティクスのアプローチを中心に～」

第 35 回スパコンセミナープログラム

<司会進行:スパコンセミナーWG 委員(株MCHC)竹内久雄>

- 13:00～13:05 開会ご挨拶
産応協実行委員会委員長(住友化学株) 石田 雅也
- 13:05～13:50 「データ集約型化学研究へのパラダイムシフト
～分野融合がもたらす可能性～」
東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻
教授 船津 公人
- 13:50～14:35 「データベースとインフォマティクスを活用した蓄電池材料の探索」
名古屋工業大学 大学院 工学研究科 生命・応用化学専攻
教授 中山 将伸
- 14:35～14:50 休 憩

<司会進行:スパコンセミナーWG 委員(東レ株)茂本 勇>

- 14:50～15:35 「先進計算スクリーニングによる新規半導体の開拓」
東京工業大学 科学技術創成研究院フロンティア材料研究所
教授 大場 史康
- 15:35～16:15 「物質・材料科学における機械学習の先端応用：現状と展望」
大学共同利用開発法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所
モデリング研究系・データ同化研究開発センター准教授 吉田 亮
- 16:15～16:55 「マテリアルズ・インフォマティクスとスパースモデリング」
東京大学大学院 新領域創成科学研究科
教授 岡田 真人
- 16:55～17:00 閉会の挨拶
産応協実行委員会スパコンセミナーWG 主査 高原 浩志

講演講師の紹介

	<p>船津研究室は、情報科学的な手法を用いて化学の様々な問題の解決を目指すケモインフォマティクスの研究室です。材料設計・医薬品等の分子設計・有機化合物の合成経路設計・プロセス制御・様々な物性および活性の予測などを対象とした研究を行っています。</p> <p>http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/.</p>
<p>東大・船津公人教授</p>	<p>中山研究室は、無機固体化学・電気化学・計算科学の専門知識に基づいてリチウムイオン電池材料や燃料電池の機能解析と材料探索を中心に研究活動を展開しています。研究活動は、名古屋工業大学のほかに京都大学・触媒電池元素戦略拠点(ESICB)、物質材料研究機構(NIMS) ナノ材料科学環境拠点(GREEN) および情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi2i)でも展開しています。</p> <p>http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/</p>
	<p>大場研究室は、膨大な第一原理計算のデータを蓄積し、そこから効率的かつ自動的に有望な物質を選び出すハイスループット・スクリーニングの基盤技術の開発を進めています。高いポテンシャルを有する新物質を的確に選出し、連携している実験グループに提案することで、材料開発を加速することが目標です。このシナリオを実現するため、計算手法の開発に取り組んでいます。</p> <p>http://www.msl.titech.ac.jp/~oba/research.html</p>
<p>東工大・大場史康教授</p>	<p>吉田研究室は、ベイズ統計学と機械学習を駆動力として、バイオサイエンス分野の諸問題に幅広く取り組んでいます。ここでは、以下の四つの研究課題を紹介。</p> <ol style="list-style-type: none"> (1) 力学的反発力に基づく並列型マルコフ連鎖モンテカルロ法とゲノム配列のパターン認識 (2) カーネル原像法による有機化合物の分子設計 (3) 4次元顕微鏡画像に基づく神経細胞のカルシウムイオン濃度の定量化 (4) ベイジアン・モデリング技術を使った生体分子ネットワークの構造設計と制御 <p>http://daweb.ism.ac.jp/yoshidalab/index.html</p>
	<p>岡田研究室は、統計力学や非線形非平衡物理学などの理論物理学の手法で脳科学・神経科学を研究するとともに、情報統計力学・機械学習をもちいて物性物理学・地球惑星科学などの自然科学の広い分野を研究しています。</p> <p>脳科学・神経科学では、「スパース符号化」という仮説と密接に関連し、情報科学では圧縮センシングという技術とつながりがあり、高次元の観測データからの知識抽出という切り口から、幅広い自然科学分野のデータ解析において成果をあげつつあります。</p> <p>http://mns.k.u-tokyo.ac.jp/index.php</p>
<p>統数研・吉田 亮准教授</p>	<p>東京大学・岡田真人教授</p>

次回告知:第 36 回スパコンセミナーは、平成 28 年 11 月末から 12 月頃開催予定。