

計算科学研究センター・計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業合同ワークショップ
「AI/MLに基づく材料設計と開発：理論と実験の接点」

計算科学研究センターでは、スーパーコンピュータシステムを全国の研究者に共同利用していただいています。また、研究交流を目的として、例年、理論・計算分子科学に関するワークショップを開催しております。

2024年のノーベル物理学・化学賞は、人工知能（AI）や機械学習（ML）を含む計算科学研究に授与されました。今後、理論・計算科学の重要性は、益々増すことが期待されます。そこで、今年度は、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業と合同で、「AI/MLに基づく材料設計と開発：理論と実験の接点」をテーマとしたワークショップを企画しました。分子・物質科学分野でAI/MLを用いた先進的な研究に取り組んでおられる気鋭の研究者を講師にお招きし、研究成果や展望をご紹介いただけます。実験で計算科学を研究に導入して、顕著な成果を挙げておられる先生方にもご講演いただけます。また、参加者のポスター発表（現地のみ）もごございます。幅広い研究分野からのご参加をお待ちしております。部分的な参加も歓迎いたします。

参加希望者の方は、下記参加登録申込ページより必要事項をご記入の上、お申し込みください。

*参加のための必要情報（Zoom ID、PW情報等）はメールにてご連絡いたします。

主催：分子科学研究所、計算科学研究センター

共催：計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）

協賛：計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）、計算物質科学協議会（CMSF）

開催場所：岡崎コンファレンスセンター・ハイブリッド開催

開催日：2025年1月15日(水)～16日(木)

開催方法：ハイブリッド形式

参加費：無料

定員：100名（現地参加）

500名（Zoomウェビナー参加）

申込締切：2024年12月13日(金)まで（現地参加、旅費支援あり）*申し込みを締め切りました。

2024年12月25日(水)まで（旅費支援なし、ポスター発表）*申し込みを締め切りました。

2025年1月10日(金)まで（Zoomウェビナー参加）*申し込みを締め切りました。

懇親会

日時：1月15日(水) 18:15～19:30

会場：岡崎コンファレンスセンター（中会議室）

懇親会費：（一般）4,000円 / （学生）2,000円

- ・予約制のため申込後のキャンセルはご遠慮ください。
- ・急なキャンセルは、不参加でもお支払いいただく場合がございます。
- ・お支払いは受付時間に集金します。お釣りのないようお願いします。

プログラム（*敬称略）

2025年1月15日（水） 1日目

| | | |
|-----------------|----------------|--|
| 座長：白男川貴史 | | |
| 12:45～ 13:30 | 受付 | |
| 13:30～ 13:40 | 開会の挨拶 | |
| 13:40～ 14:20 | 中山 哲（東京大学） | 「ニューラルネットワークポテンシャルを用いた表面・界面の分子シミュレーション」 |
| 14:20～ 15:00 | 原測 祐（北海道大学） | 「量子化学計算に基づく化学反応解析：実験・情報との連携研究への展開」 |
| 15:00～ 15:20 | 休憩 | |
| 15:20～ 16:00 | 古川 森也（大阪大学） | 「多元素合金触媒における反応場および速度論のモデリング」 |
| 16:00～ 16:40 | 辻 雄太（九州大学） | 「触媒材料探索における計算科学と情報科学の応用」 |
| 16:40～ 17:10 | 藤本 和士（関西大学） | 「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」 【SCCMS講演】 |
| 17:10～ 18:10 | ポスター発表（現地参加のみ） | |

| | |
|-----------------|---------------------|
| 18:15～ 19:30 | 懇親会（現地参加のみ） 司会：江原正博 |
|-----------------|---------------------|

2025年1月16日（木） 2日目

| | | |
|-----------------|----------------------|---|
| 座長：江原正博 | | |
| 9:30～ 10:10 | 熊谷 悠（東北大学） | 「第一原理計算とMIによる欠陥を考慮した新材料探索」 |
| 10:10～ 10:50 | 福島 知宏（北海道大学） | 「水電解反応の機械学習解析」 |
| 10:50～ 11:10 | 休憩 | |
| 11:10～ 11:40 | 尾方 成信（大阪大学） | 「機械学習ポテンシャルを用いた水素が構造材料に与える影響の原子シミュレーション」 【SCCMS講演】 |
| 11:40～ 12:10 | 只野 央将 （物質・材料研究機構） | 「第一原理計算とデータ駆動手法による機能性ホイスラー合金の探索」 【SCCMS講演】 |
| 12:10～ 12:15 | 閉会の挨拶 | |

【SCCMS講演】東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所と協力して、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業（SCCMS）として大規模計算を志向した分子・物質科学分野の大型プロジェクトを支援しています。今年度は、本ワークショップで研究成果をご講演いただきます。

世話人：白男川貴史（分子研）、江原正博（分子研、計算セ）

ポスター発表

| | | |
|------|--|---|
| P-1 | 生体分子の溶媒和理論の開発と応用 | (名古屋大学) ○吉田紀生, 山口毅, 金丸恒大 |
| P-2 | アゾ含有のアミノ酸シッフ塩基銅(II)錯体のDFT計算と蛋白質ラッカーゼとの相互作用 | (東京理科大学) 成田真央, ○伊藤匠汰, 中根大輔, 秋津貴城 |
| P-3 | 反応物を表現とした活性予測モデル構築と分子構造生成への適用 | (奈良先端科学技術大学院大学) ○岩崎悠人, 宮尾知幸 |
| P-4 | 機械学習とハイパーパラメータチューニングを用いた酵素反応の反応座標探索 | (九州大学) ○川島恭平, 佐藤拓海, 森俊文 |
| P-5 | 汎用機械学習ポテンシャルを用いた有限温度におけるSrTiO ₃ 元素置換系の相図シミュレーション | (ENEOS株式会社) ○小鷹浩毅, 原嶋庸介, 入口広紀, 高山大鑑, 高須賀聖五, 藤井幹也 |
| P-6 | 立体配置を考慮した反応経路ネットワーク解析手法の開発：NNP-AFIR法を用いたプロリン触媒不斉アルドール反応の機構解析 | (北海道大学大学院総合化学院 1, WPI-ICReDD 2, JST-ERATO 3, 北海道大学大学院理学研究院 4, NIMS 5) ○砂崎慎之介 1, 原淵祐 2,3, Staub Ruben 2, Varnek Alexandre 2, 前田理 2,3,4,5 |
| P-7 | データ駆動型分子特性予測モデルにおける立体配座の重要性の理解 | (奈良先端科学技術大学院大学) ○濱川祐羽, 宮尾知幸 |
| P-8 | 高濃度ATP溶液における水モデルの重要性の理論的解析 | (九州大学) ○森俊文, 吉田紀生 |
| P-9 | AiiDAによるハイスループット第一原理計算システム | (日本電気株式会社) ○矢作裕太 |
| P-10 | 化合物空間の構造の理論研究：物質的反对称性の開拓 | (分子科学研究所) ○白男川貴史, Simon León Krug, 江原正博, O. Anatole von Lilienfeld |

■ ポスター発表

ポスターボードのサイズは、縦120cm×横90cmです。

*ポスター発表の申込みは、発表者リストと発表タイトルが登録時に必要です。

■ 宿泊について

・三島ロッジに宿泊を希望される方は参加登録の際に申し込んで下さい（1泊2600円）。但しロッジは数に限りがあり、希望に添えない場合もございます。

宿泊施設をおとりした方には、後日、メールにて連絡します。

ロッジURL <https://sites.google.com/orion.ac.jp/oka-lodge/>

- ・ホテルはご自身で予約をお願い致します。近郊のホテル案内は下記URLをご参考ください。
近郊ホテルURL <https://www.ims.ac.jp/guide/joint-research/lodging.html>

*ロッジの宿泊受付を終了しました。

■ 旅費・宿泊費の支援について

- ・支援はセンター利用者優先で、予算に限りがあり、ご希望に添えない場合もありますのでご了承ください。
 - *民間企業の方への旅費支援、及びロッジのご利用はご遠慮いただいております。
- ・学生の場合は修士以上で、指導教官の許可が得られる方のみ支援可能です。
 - *学部生の参加は可能ですが旅費の支援はできません。
 - *学生の方は賠償付傷害保険の加入が参加条件となります。
- ・自然科学研究機構の旅費規程に基づき、所属機関からの往復交通費、日当及び宿泊費を支給します。
 - *前後に別用務で他機関にご出張される場合（発着地が所属機関ではない場合）はこの限りではありませんのでその旨を事前にお知らせ願います。（登録ページの「連絡事項」にご記入ください。）
 - 支援可能な方には、申込締切後、所定の手続き案内メールを差し上げます。
 - *飛行機をご利用の場合は、その旨「連絡事項」にご記入ください。搭乗券半券往復原本・領収書・航空券明細の提出が必要です。（航空券明細及び領収書は事前に提出ください。）
 - 開催日と間隔のあく搭乗日の場合、支援の対象外となる場合があります。特別な事情のある方は事前にご連絡をお願いします。
- ・登録口座への振込はワークショップ終了後、1~2ヶ月後となります。

*旅費・宿泊費の支援の受付を終了しました。

参加登録は以下のリンクよりお願いします

<https://registration.ims.ac.jp/scws2024/registration>

*申し込みを締め切りました。多数の登録ありがとうございました。

■ お問い合わせ

自然科学研究機構 分子科学研究所 計算科学研究センター
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地
TEL: 0564-55-7462
FAX: 0564-55-7025
Email: rccs-scws2024_at_ims.ac.jp

*メールアドレス内の_at_は@に直してお送りください。

*このページ内の著作権はすべて分子科学研究所に属します。無断転載等はお断りいたします。