

平成30年 4月 2日

エレクトロニクス部会
コンピュータ化学部会 会員 各位



創立100周年記念
きんか(1919-2019)

一般社団法人 近畿化学協会
エレクトロニクス部会
部会長 松田 建児
(京都大学工学研究所)

平成30年度第1回研究会 ご案内 ＜コンピュータ化学部会 共催行事＞

拝啓 時下ますますご清祥の段お慶び申し上げます。

平素より本部会の運営に際しましては、種々ご高配を賜わり厚く御礼を申し上げます。

このたび安蘇 芳雄前部会長のあとを受けまして、エレクトロニクス部会の運営を担当することとなりました。本部会活動のより一層の活性化と発展に努力致たく存じますので、何卒ご高配を賜りますようお願い申し上げます。

さて、早速ながら標記研究会を下記の通り開催致しますので、業務ご多繁のところ恐縮ながら、ご都合お繰り合わせのうえ、ご参集下さいませようご案内申し上げます。

敬具

(記)

日 時 平成30年 5月16日(水) 14:00~18:30

会 場 大阪科学技術センター 4階404号室 [大阪市西区靱本町1-8-4, Tel. 06-6443-5324]

＜交通＞地下鉄四つ橋線「本町駅」下車、25・28番出口より北へ徒歩約5分、うつぼ公園北詰。

テーマ：マテリアルインフォマティクス：AI利用の可能性

1. 講演＜質疑応答 5~10分含む＞

1) 高分子材料開発におけるシミュレーションとインフォマティクスの連携 (14:00~15:00)

(国研) 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
統括研究主幹 青柳 岳司 氏

高分子材料開発における計算機シミュレーションと機械学習等の情報科学的手法との連携に関して、アプローチの可能性、事例などに関して紹介する。合わせて、現在進行中の NEDO プロジェクト「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」に関して概要と現在の進捗状況に関して紹介する。

2) 第一原理計算とベイズ統計を融合したデータ駆動型物質探索 (15:00~16:00)

北陸先端科学技術大学院大学情報科学系 准教授 本郷 研太 氏

最近、物質・材料科学と統計科学・データ科学との融合展開である「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)/材料情報科学」が注目されている。本講演では、MI研究の現況を概観した後、典型的な物質探索法であるハイスループット・バーチャルスクリーニングとの対比の上で、講演者が最近開発した新しい物質探索手法である、第一原理計算計算とベイズ統計に基づくデータ駆動型物質探索手法について解説する。

3) データ科学の先進技術がもたらす材料研究の在り方 (16:10~17:10)

情報・システム研究機構 統計数理研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長・教授 吉田 亮 氏

一般に材料設計のパラメータ空間は極めて広大である。例えば、低分子有機化合物のケミカルスペースには、 10^{60} 個を超える埋蔵物質が存在すると言われている。問題の本質は、このような広大な空間から所望の物性・機能を併せ持つ埋蔵物質を発掘することである。データ科学の観点から、マテリアルズインフォマティクスの最前線及びデータ科学の先進技術がもたらす次世代の材料開発の在り方を示す。

2. 懇親会 (17:15~18:30) *講師の先生を囲みアフターディスカッションを兼ねたビアパーティを開催します。

於:「ATRIO CAFE」[大阪市西区京町堀 1-8-27、会場より徒歩 1 分] 会費 3,000 円(当日お支払いください)

※エレクトロニクス部会・コンピュータ化学部会 会員・近化学識会員 : 聴講無料

【申込方法】 ホームページ上の「参加申込フォーム」(<http://www.kinka.or.jp/form/view/index.php?id=30>)をご活用ください。または、E-mailにて「エレ部会 H30第1回研究会参加申込」と題記し、1)参加者氏名、2)勤務先(所属)、3)連絡先(TEL、E-mail)、4)懇親会参加の有無、5)所属部会 を明記のうえ、下記宛てにお申込みください。参加証は送付しませんので、直接会場にお越しください。

一般社団法人近畿化学協会 エレクトロニクス部会

TEL : 06(6441)5531 / FAX : 06(6443)6685 / E-mail: fujita@kinka.or.jp