

化学・物質工学セミナー

以下の通りセミナーを開催致します。万障お繰り合わせの上、ご参加ください。

第 740 回例会

日時：2024 年 3 月 8 日(金)13:00～14:30

場所：工学部 1 号館 10 番講義室 (4F)

講師：小林 正人 准教授（北海道大学大学院理学研究院化学部門 量子化学研究室）

演題：「大規模/ハイスループット量子化学計算とそのデータ解析：触媒への応用を主題として」

本セミナーでは、最近急速に発展している「マテリアルズインフォマティクス(MI)と計算化学」に関する集中レクチャーとして、両分野に造詣の深い先生をお招きしてご講演いただいています。このたび、小林先生が長崎県工業技術センターに来訪される機会に、同センターのシミュレーション技術研究会(2023 年度第 6 回)との共催として本セミナーを企画しました。ご参加の程、どうぞよろしくお願い致します。

【概要】

「富岳」コンピュータのような超並列計算機とプログラムの発展により、大規模系の量子化学計算が可能となると同時に、量子化学計算のハイスループット化、すなわち多数の計算を短時間かつ並列に得て利用する様々な応用が急速に広がっている。また、このような計算で得られる膨大な情報を解析し、新しい系のふるまいの予測に用いるための手法として、インフォマティクスの利用が叫ばれるようになって久しい。本講演では、大規模・ハイスループット量子化学計算の手法を概観し、触媒への応用を主なターゲットとして、それらの計算結果からインフォマティクスを活用した解析法とその研究例について紹介する。

セミナー世話人

工学研究科・物質科学部門 木村正成 (masanari@nagasaki-u.ac.jp)
長崎県工業技術センター 重光保博 (shige@tc.nagasaki.go.jp)