

# — 計算科学によるデータ創出、活用にむけて —

近年、様々な材料について、大規模データを活用した研究開発（マテリアルズ・インフォマティクス）の高度化や、材料の研究開発現場のデジタル化やスマート化といったデジタルトランスフォーメーション（DX）などのデータ駆動型研究の発展による、材料開発の開発時間の短縮、低コスト化に注目が集まっている。

本セミナーシリーズでは、計算物質科学の立場から、マテリアルDXにつながる、計算科学による大規模データの創出の例や大規模データの活用例についての講演、計算物質科学とデータ科学の融合研究例についての講演、さらにはその研究手法の一例を理論とアプリの実習から学ぶハンズオン付き講習会などによって、様々な角度から紹介する。

なお、本セミナーシリーズは、1)「富岳」のみが可能とするデータ駆動型マテリアル研究手法の開発を目的とした「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新 (DDCoMS)」、2) 単一の学問領域を超え、材料開発の階層を超える次世代の人材の育成のために、計算物質科学分野、および計算物質科学に興味のある実験物質科学分野の学生や若手研究者の支援を進めてきた「計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)」、3) 多様な極限環境下で長期使用に耐え得る機能を備えた構造材料およびその利用技術のデータ駆動型開発を行い、既存インフラシステムの長寿命化や新規インフラシステムの高効率化に向けたデータ活用型マテリアル工学の構築を目指す「極限環境対応構造材料研究拠点 (RISME)」の共催で実施する。

第1回 <応用レベル>

2023年10月17日(火)13:30-15:00

## 「スーパーコンピュータによる 大規模シミュレーションにより 何が新たな研究対象となりうるのか？」

講師

久保 百司 東北大学 金属材料研究所 教授

主な対象 理工系の大学院生、および研究者の方

講演レベル <基礎レベル> 計算物質科学が専門外のMC学生以上

<応用レベル> DC、PD、研究者、

計算物質科学が専門のMC学生

(応用レベルのみの回は簡単な導入部有)

定員 60名

申込 事前登録制 2023年10月16日(月)13時迄

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R05/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2023/>

要事前登録  
参加無料  
オンライン開催  
Japanese only



共催：計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新 (DDCoMS)  
計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)  
極限環境対応構造材料研究拠点 (RISME)

協賛：東北大学金属材料研究所計算材料学センター (CCMS)

問合せ：計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS> Email: [pcoms@grp.tohoku.ac.jp](mailto:pcoms@grp.tohoku.ac.jp)

# DDCoMS-PCoMS-RISME 計算物質科学セミナーシリーズ 2023 —計算科学によるデータ創出、活用にむけて—

開催方法:オンライン開催

事前登録制:

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R05/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2023/>

## 第1回<応用レベル>

2023年10月17日(火)13:30-15:00

「スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションにより  
何が新たな研究対象となりうるのか？」

久保 百司 東北大学 金属材料研究所 教授

講演要旨:

スーパーコンピュータを活用した大規模シミュレーションにより、従来サイズのシミュレーションでは検討が不可能であった新たな研究領域の開拓が可能になるという考えのもと「大規模シミュレーションにより何が新たな研究対象となりうるのか？」とのstrategyを掲げて、ここ数年研究を進めてきた。本セミナーでは、講演者による最近のスーパーコンピュータを活用した大規模シミュレーションへの取組を紹介する。

---

## 今後のセミナースケジュール

<応用レベル>

2023年12月25日(月)13:30-15:00

「機械学習原子間相互作用を用いた構造材料の原子シミュレーション」

尾方 成信 大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

講演要旨:

第一原理計算の結果を学習した機械学習原子間相互作用や、第一原理計算より得られるさまざまな特徴量を学習したニューラルネットワークを用いることにより、これまででない高い精度で大規模な原子シミュレーションを実行することが可能になっている。講演では、それらを実際に用いた構造材料中の変形、破壊、拡散の解析例を示し、その有効性について述べる。

※参加申し込みについては後日ご案内致します。