

— 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2回 <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」

講師 尾方 成信 大阪大学大学院基礎工学研究科 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12月22日(金)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科学センター (CCMS, IMR, Tohoku Univ.)
計算物質科学協議会 (CMSF)

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

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2回<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、これまでになく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。

今後のセミナースケジュール

<基礎レベル・応用レベル>

2024年2月8日(月) 13:00-15:20

13:00- <基礎レベル> 「トポロジカルデータ解析入門」

14:15(予定)- <応用レベル> 「トポロジカルデータ解析の材料科学への応用」

平岡 裕章 京都大学高等研究院 教授

講演要旨:

<基礎レベル> 現代社会にはデータが氾濫していますが、人工知能のブラックボックス問題に見られるように、それらが持つ真の価値を十分に活用できていません。このようなビッグデータを有効利用するには、適切な数学言語でデータの本質となる構造を記述し、その記述言語を用いてデータを生み出す現象の背後にある機構に意味を与え理解するプロセスが不可欠です。この問題に対して、図形を研究する数学分野の一つであるトポロジーをデータ解析に応用する「トポロジカルデータ解析」が近年盛んに研究されています。本講演の基礎レベル編ではトポロジーの考え方や基本的な道具について紹介した後に、トポロジカルデータ解析の解説を行いたいと思います。

<応用レベル> トポロジーでは連続変形で保たれる構造に着目しますが、この性質がビッグデータ解析ではデータの粗視化や複雑構造の記述などに利用されています。本講演の応用レベル編では、パーシステントホモロジーを材料構造データの記述子とした各種構造解析手法を概説します。特に、パーシステントホモロジーに対する逆解析、機械学習、ソフトウェアを紹介することで、参加者の方々が自分のPCでデータ解析を行えるようになることを目指します。

ソフトウェア開発者によるハンズオン付き講習会

・<基礎レベル・応用レベル> OCTA講習会&トレーニング2024 2024年2月27日(火)13:00-18:00
他

※詳細については後日ご案内致します。