

第1回<基礎レベル&応用レベル>

「仮想実験を利用した材料開発」

講師

本田 隆

お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター
特任教授

日時

2024年7月3日(水)10:00-11:30

開催方法

オンライン/事前登録制 2024年7月2日(火)13時迄

<https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R06/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2024/>

本セミナーシリーズでは、計算科学による大規模な材料データの創出例や活用例、計算物質科学とデータ科学の融合研究例を紹介する。2024年度は「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)」のメンバーによる事例紹介や、データ科学を活用した材料研究の事例紹介を行う。また、それらの研究手法を理論とアプリの実習から学ぶハンズオン付き講習会も開催する。

なお、本セミナーシリーズは、

- 1) 「スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム」(2023-2025年度)に採択された「富岳」のみが可能な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) 「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)」(2015-2022年度)への採択を受けて設立され、計算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) 「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)」(2022-2030年度)の拠点の一つで、多様な極限環境下で長期使用可能な構造材料とその利用技術のデータ駆動型開発を行う「極限環境対応構造材料研究拠点(RISME)」の共催で実施する。

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>

理工系(計算物質科学が専門外)の
MC学生以上

<応用レベル>

DC学生、PD、研究者、
計算物質科学が専門のMC学生

定員

60名

要事前登録
参加無料
オンライン開催
Japanese only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

【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 (CCMS, IMR, Tohoku Univ.)
計算材料科学センター
Center for Computational Materials Science

計算物質科学協議会(CMSF)

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)
データ連携部会

DDCoMS-PCoMS-RISME 計算物質科学セミナーシリーズ 2024
Computational Materials Science Seminar Series 2024
—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:

<https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R06/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2024/>

第1回<基礎レベル&応用レベル> 2024年7月3日(水)10:00-11:30

「仮想実験を利用した材料開発」

本田 隆

お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター 特任教授

概要:

材料開発に材料の記述子を利用して教師あり学習を行い材料開発の効率化・高速化を行うことは最近多く行われている。しかし、材料の記述子の定義が難しい場合、教師なし学習方法が必要となる。教師なし学習方法の一つに「敵対的生成ネットワーク」(Generative Adversarial Networks:GAN)が存在する。カーボンナノチューブ(Carbon Nanotube:CNT)はカーボンのみの材料で簡単には組成式 C_n で記述できてしまう材料であり、記述子を想定することが難しい。しかし、製造方法によりさまざまな外見を有するCNTの種類が存在する。本講演では異なる製造元のCNTを混合して不織膜を生成する試みに走査電子顕微鏡(SEM)画像データを利用したGANによる仮想実験を行い、混合CNT不織膜の物性を高速に評価する手法を開発した例について説明する。

今後のセミナースケジュール&講師

・2024年7月29日(月)15:00—

只野 央将 グループリーダー

物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究センター 磁性理論グループ

・日時:調整中

澁田 靖 教授

東京大学大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻マテリアル機能講座

・日時:調整中

吉武 道子 博士

オムロンサイニックエックス

他