

近年、様々な材料(構造材料・ハードマテリアル・ソフトマテリアル)での、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)が盛んに議論されてきている。このような流れの中で、材料設計・研究におけるデータ活用の根幹をなす理論とシミュレーション技術の知識は必要不可欠なものとなっている。さらに、計算物質科学やマテリアルズインフォマティクスのみならず、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システムであるマテリアルズインテグレーション(Materials Integration)システム*による基礎研究から実用化・事業化までの研究・開発の加速が注目されている。

本セミナーシリーズでは、特に、計算物質科学の観点から、シミュレーションや数値計算の理論的背景や手法、マテリアルズインテグレーション、マテリアルDXなどによる多様な材料研究の基盤となる内容について、具体的な事例をもとにオムニバスで学ぶ。

[*注: マテリアルズインテグレーションは、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の課題の一つ「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」で推進されている計算材料科学の手法。]

第3テーマ 「材料開発と機械学習」-その1-

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の発展に伴い、機械学習が材料研究に急速に浸透している。「基礎編」では、過去10年間の世界のMI研究の進展を概観し、材料開発における機械学習の役割を考察する。「応用編」では、具体的な研究事例を題材にする。ハイスループット第一原理計算や結晶構造予測を用いた新物質探索、機械学習を用いた材料スクリーニング、計測・解析の効率化、物質合成の自動化と自律化などの代表的なMI研究を紹介する。また、スモールデータ、データの共有、メカニズム解明などの課題について議論する。

参加無料
オンライン開催
Japanese only



開催日時

2022年 **12月13日(火)** 10:00-14:50

講師

三宅 隆

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域研究チーム長

10:00-11:40

基礎編:「材料開発のための機械学習入門」

13:10-14:50

応用編:「機械学習を活用した材料開発の現状と課題」

定員: 50名

申込: 事前登録制(2022年12月12日(月)10:00迄)

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-CMS-seminars-2022/>

主な対象: <基礎編>理工系のMCLレベル以上

<応用編>DC、PD、若手研究者以上

<共催>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)



第3テーマ「材料開発と機械学習」—その1—

三宅 隆 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域研究チーム長

12月13日 (火)

10:00-11:40

開会挨拶：久保 百司

PCoMSコンソーシアム長 兼 次世代研究者育成委員会委員長 教授[東北大学]

基礎編：材料開発のための機械学習入門

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) の発展に伴い、機械学習が材料研究に急速に浸透している。「基礎編」では、過去10年間の世界のMI研究の進展を概観し、材料開発における機械学習の役割を考察する。続いて、回帰、分類、クラスタリング、次元削減、正則化、交差検証などの機械学習の基本的な技術を説明する。

<休憩>

13:10-14:50

応用編：機械学習を活用した材料開発の現状と課題

「応用編」では、具体的な研究事例を題材にする。ハイスループット第一原理計算や結晶構造予測を用いた新物質探索、機械学習を用いた材料スクリーニング、計測・解析の効率化、物質合成の自動化と自律化などの代表的なMI研究を紹介する。また、スモールデータ、データの共有、メカニズム解明などの課題について議論する。

閉会挨拶：川勝 年洋

PCoMSイノベーション創出人材育成委員会委員長 教授[東北大学]

※PCoMSIPD対象者の方は、「計算物質科学セミナー」のいずれか1日（もしくは半日*2回）を受講され、受講後に所定の報告書を提出された場合に、IPDプログラム選択科目カテゴリー A&B 1単位として認定されます。なお、IPD対象者（フェロー：インターンシップ実施済み）は報告書の提出は不要です。

今後の
セミナー
スケジュール

第3テーマ「材料開発と機械学習」-その2-

2023年1月17日(火) 13:30-15:00 オンライン開催

福島 鉄也 東京大学 物性研究所 データ統合型材料物性研究部門
(兼)附属計算物質科学研究センター 特任准教授

応用編：「第一原理計算を用いた不規則系磁性材料の探索」

第4テーマ

2023年2月24日(金) オンラインorハイブリッド開催 <基礎編&応用編>

毛利 哲夫 北海道大学 名誉教授/JST(科学技術振興機構) シニアフェロー