

— 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4回 < 基礎レベル
応用レベル >

2024年2月27日(火)13:00-18:10

OCTA講習会&トレーニング2024

講師

森田 裕史 (国立研究開発法人 産業技術総合研究所)
青柳 岳司 (旭化成株式会社)
本田 隆 (お茶の水女子大学)
小沢 拓 (株式会社JSOL)

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

定員 60名

申込 事前登録制 2024年2月7日(水)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, IMR, Tohoku Univ.)
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・データ連携部会 (DxMT CoLabo)

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

第4回<基礎レベル・応用レベル> 2024年2月27日(火) 13:00-18:10

OCTA講習会&トレーニング2024

講演要旨:今回、産学の双方で利用者が多く、マルチスケール シミュレーションに加え、シミュレーション結果の機械学習も可能な「ソフトマテリアルのための統合シミュレータ:OCTA」の講習会を、DDCoMS、PCoMS、RISMEとの共催で実施いたします。

「ソフトマテリアルのための統合シミュレータ:OCTA」は経済産業省およびNEDOの出資による「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」通称「土井プロジェクト」の成果物として2002年に公開されました。プロジェクト終了後もバージョンアップが続けられ、2021年6月には最新版のOCTA8.4がリリースされました。

また、2017年7月には、OCTAの応用事例をまとめた成書である「高分子材料シミュレーション-OCTA活用事例集」(化学工業日報社)の増補版も発行されました。2016年7月には同書の英訳に相当する”Computer Simulation of Polymeric Materials. Applications of the OCTA System”もSpringer社から出版されています。さらに、経済産業省およびNEDOの出資により、2016年度に産業技術総合研究所を中心として始動した「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」においてAI活用による材料開発の加速などを目的としてOCTAの機能拡張が実施され、その成果の一部はOCTA8.4にも搭載されています。これらの背景のもとに、このたびOCTAの講習会とトレーニングを開催します。OCTAを使い始めたばかりの方、これからOCTAを使ってみようとする方、あるいは「そもそもOCTAって何?」という興味を持たれた方など、主に初心者向けの内容です。

前半ではシミュレーションに用いられている理論的背景の解説を行い、その後、後半にてその実際にOCTAを使って操作法を学んでいただきます。

(各自のPCにOCTAをインストールして頂きます)。

内容としては、

- OCTAの代表的な入出力ファイルとその可視化方法
 - OCTA上でのPythonスクリプトの使い方
 - COGNAC(分子動力学エンジン)とSUSHI(平均場法エンジン)を用いたマルチスケールシミュレーション
 - AITool(機械学習ツール)を用いたシミュレーション結果の機械学習のデモ
- などを取り上げます。

また、最後にOCTAに関する総合的な質疑応答の時間を取り、ユーザー、エンジン開発者との直接的な議論の場を設けます。

13:00-13:05 開会挨拶 久保 百司 (東北大学)

13:05-13:10 始めに(5分)

13:10-13:50 OCTAの概要 (40分)

13:50-14:30 COGNACの機能と事例紹介(40分)

14:30-15:10 SUSHIの機能と事例紹介(40分)

15:10-15:25 休憩(15分)

15:25-15:35 全体質問(10分)

15:35-18:05 OCTAトレーニング(150分)

- ファイル操作や可視化、Pythonスクリプトの使い方
 - COGNACとSUSHIを用いたマルチスケールシミュレーション
 - AIToolを用いたシミュレーション結果の機械学習(画像分類)
- ※ 他講師がサポートします

18:05-18:10 閉会挨拶 川勝 年洋 (東北大学)

今後のセミナースケジュール

•ソフトウェア開発者によるハンズオン付き講習会

第5回<基礎レベル・応用レベル>

TOMBO Seminar: First-Principles Theory, Computation, and Hands-On 2024

2024年3月28日(木)AM&PM

※詳細については後日ご案内致します。