

## — 計算科学によるデータ創出、活用に向けて —

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。

## 📅 後期セミナースケジュール

第3回	2024年 10/1(火) 13:30-15:00 (最長15:30迄)	9/30(月) 13:00 📅切	<応用レベル> 「コンピュータに自然言語を扱わせる一文字コードからChatGPTまで —材料研究の強力な助っ人:論文検索&要約・実験手法の提案—」	吉武 道子 オムロンサイニックエクス
第4回	10/25(金) 15:00-16:30 (最長17:00迄)	10/24(木) 13:00 📅切	<基礎レベル> 「材料研究者のためのデータ同化入門」	澁田 靖 東京大学
第5回	11/12(火) 13:00-18:00	11/11(月) 13:00 📅切	<基礎レベル&応用レベル> 「OCTA講習会&トレーニング2024秋」	森田 裕史 産業技術総合研究所 本田 隆 お茶の水女子大学 青柳 岳司 旭化成株式会社 小沢 拓 株式会社 JSOL
第6回	2025年 1/15(水) 13:00-14:30 (最長15:00迄)	1/14(火) 13:00 📅切	<応用レベル> 「第一原理計算による無機電子材料の設計と新材料開拓」	大場 史康 東京工業大学
第7回	日程調整中		T.B.A	杉田 有治 理化学研究所

## 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

開催方法 オンライン/事前登録制

概要および申込URL <https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R06/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2024/>

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)

参加  
無料

定員  
60名

Japanese  
only

事前登録制  
オンライン  
開催



【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.)  
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

 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)

開催方法: オンライン開催 (事前登録制)

概要および申込URL: <https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R06/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2024/>

### 第3回<応用レベル>

2024年10月1日(火) 13:30-15:00 (最長15:30迄)

<申込締切: 2024年9月30日(月)13:00>

「コンピュータに自然言語を扱わせる—文字コードからChatGPTまで—  
—材料研究の強力な助っ人: 論文検索&要約・実験手法の提案—」

吉武 道子

オムロンサイニックエックス  
博士

概要: 普通に使っている言葉をコンピュータに扱わせる「自然言語処理」の技術はChatGPTの登場以来すさまじいレベルに到達している。文字コードを使って言語を数字に置き換える古典的な方法から、共起行列、現在でも基本となっている文字のベクトル変換、文法の学習、ニューラルネットワークの利用、ChatGPTに繋がるアテンション付トランスフォーマーと自然言語処理の発展を辿り、ニューラルネットワークを用いた言語モデルの評価指標、材料科学についての言語モデル評価指標の作成、ChatGPTなどのモデルを材料科学モデル評価指標を用いて評価した例を紹介する。

### 第4回<基礎レベル>

2024年10月25日(金) 15:00-16:30 (最長17:00迄)

<申込締切: 2024年10月24日(木)13:00>

「材料研究者のためのデータ同化入門」

澁田 靖

東京大学 大学院工学系研究科  
マテリアル工学専攻 教授

概要: データ同化とは、数値モデルやシミュレーションと実験データを融合する統計的推定論手法の一種で、気象学や海洋学などの分野で発展し成功を取っている。最近では材料研究への応用も試みられ、幅広い研究対象において一定の成果をあげつつある。一方、データ同化の理解には確率や統計学の知識が必要なため、講演者も含め専門外の研究者が理解し活用することは容易でない。本セミナーでは材料研究への導入・応用を想定した立場からデータ同化の基礎について解説する。また、データ同化によるその場観測データとマテリアルシミュレーションとの融合についての最近の研究事例について紹介する。

開催方法:オンライン開催(事前登録制)

概要および申込URL:<https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R06/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2024/>

## 第5回<基礎レベル&応用レベル>

2024年11月12日(火)13:00-18:00 <申込締切:2024年11月11日(月)13:00>

### 「OCTA講習会&トレーニング2024秋」

森田 裕史 産業技術総合研究所  
総括研究主幹

青柳 岳司 旭化成株式会社  
博士

本田 隆 お茶の水女子大学  
特任教授

小沢 拓 株式会社 JSOL  
博士

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、2024年には最新版のOCTA8.5がリリースされる予定です。

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、その成果物はOCTA8.5に搭載される予定です。

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)

13:10-13:40 OCTAの概要(30分)

13:40-14:20 COGNACの機能と事例紹介(40分)

14:20-15:00 SUSHIの機能と事例紹介(40分)

15:00-15:15 休憩(15分)

15:15-15:25 全体質問(10分)

15:25-17:55 OCTAトレーニング(150分) ※講師がサポートします

・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)

17:55-18:00 閉会挨拶 川勝 年洋(東北大学)

#### 前期セミナー&講師(開催済み)

第1回 2024/7/3(Wed) 10:00-11:30 <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 特任教授(お茶の水女子大学)

第2回 2024/7/29(Mon)15:00-16:30 <応用レベル>

「計算科学とデータ駆動による磁性材料開発」

講師 只野 央将 グループリーダー(物質・材料研究機構)