

第2回<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

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 グループリーダー

日時

2024年7月29日(月) 15:00-16:30 (最長17:00迄)

開催方法

オンライン/事前登録制 2024年7月26日(金)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

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2回<応用レベル> 2024年7月29日(月)15:00-16:30(最長17:00迄)

「計算科学とデータ駆動による磁性材料開発」

只野 央将 グループリーダー (物質・材料研究機構)

概要:近年、第一原理計算を利用した物性の最適化に関する研究が一般化している。しかし、材料として実際に利用するには、単一の物性値を最適化するだけでは不十分であり、安定性を保ちながら複数の物性値を同時に最適化する事が求められる。そのためには、さまざまな物性値を網羅した包括的なデータベースが必要になる。本講演では、我々が第一原理計算を用いて構築したホイスラー合金物性マップについて説明し、その中から見出したいくつかの材料を紹介する。また、このデータベースにグラフニューラルネットワークを適用し、材料探索の空間を拡大する試みについても紹介する。

今後のセミナースケジュール&講師

•2024年10月1日(火)13:30-15:00(最長15:30迄)

<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 博士 (オムロンサイニクエックス)

•2024年10月25日(金)15:00-16:30

<基礎レベル>

「材料研究者のためのデータ同化入門」

澁田 靖 教授 (東京大学)

•2024年11月12日(火)13:00-18:00

<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 総括研究主幹 (国立研究開発法人 産業技術総合研究所)

青柳 岳司 博士 (旭化成株式会社)

本田 隆 特任教授 (お茶の水女子大学)

小沢 拓 博士 (株式会社 JSOL)

•日時:調整中

大場 史康 教授 (東京工業大学)

他

終了済みのセミナー&講師

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 (お茶の水女子大学)