

— 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します。

2025 年度も、「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います。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します。

第3回は DDCoMS サブ課題 D エレクトロニクス材料 (科学大拠点)、第4回はサブ課題 E バイオ・高分子材料 (京大拠点)、第5回はサブ課題 C 電気化学材料 (東大拠点)のメンバーを講師に迎え、講演いただきます。第6回は、ハイブリッド開催で、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」のハンズオン付き講習会を開催します。

**参加無料
事前登録制**

**定員**

オンライン定員: 100 名
オンサイト定員: 40 名 (3/17 開催のみ)

主な対象

理工系の大学院生および研究者

**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、PD、研究者、計算物質科学が専門の MC 学生

**詳細
申込**

<https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R07/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2025/>

オンライン開催 各回 10:00▶12:00

2026
第3回 **1/19** 月
申込締切: 1/16(金)13:00

<基礎レベル>

「遺伝的アルゴリズムによる未知構造探索」

多田 朋史 九州大学・教授

第4回 **2/10** 火
申込締切: 2/9(月)13:00

<応用レベル (基礎レベルの導入を含む)>

「全原子 MD による高分子系の機能解析」

松林 伸幸 大阪大学・教授

第5回 **3/2** 月
申込締切: 2/27(金)13:00

<応用レベル (基礎レベルの導入を含む)>

「数理科学を用いた分子動力学計算中の現象解析」

佐藤 龍平 東京大学・助教

ハイブリッド開催 10:00▶17:20

<基礎レベル・応用レベル>

第6回 **3/17** 火
申込締切: オンサイト 3/2 (月)13:00
オンライン 3/16(月)13:00

「OCTA 講習会&トレーニング 2026」

森田 裕史 産業技術総合研究所マテリアル DX 研究センター
副研究センター長

青柳 岳司 昭和女子大学・特命教授

本田 隆 株式会社 JSOL・博士

小沢 拓 株式会社 JSOL・博士

オンサイト会場: 東北大学東京オフィス
東京都千代田区丸の内 1-12 サピアタワー 10F(東京駅直結)

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.) / 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)

お問合せ先: 計算物質科学人材育成コンソーシアム<PCoMS>事務局 Email: pcoms@grp.tohoku.ac.jp