

2023年度

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムDDCoMS 公開シンポジウム
計算物質科学人材育成コンソーシアムPCoMS 次世代研究者セミナー
計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会

2024年 3月27日(水) 10:00~18:00
東北大学金属材料研究所講堂

《参加費》
無料

《共催》◆スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「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)◆計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業

《協賛》◆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)◆スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」◆スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」◆一般財団法人 高度情報科学技術研究機構(RIST)

研究交流会開催 18:10~20:00 会場 レストラン萩 会費 5,000円

《申込締切》

参加登録と研究交流会への参加の有無は、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムDDCoMSホームページのイベントページの申込フォームよりお申込み下さい。 https://www.ddcoms.imr.tohoku.ac.jp/event/event_240327/

2024年3月13日(水)

プログラム(敬称略)

挨拶

10:00-10:10 東北大学金属材料研究所 所長 佐々木孝彦
文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室
DxMT事業 PD/東北大学未来科学技術共同研究センター 教授 栗原和枝

計算物質科学人材育成コンソーシアムPCoMS 次世代研究者セミナー

15:45-16:25 招待講演 山形大学 笠松秀輔
「ハイスループット計算と機械学習を活用した固溶体中イオン配置の統計熱力学サンプリング」

スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムDDCoMS 公開シンポジウム

計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告

10:10-10:15 DDCoMS課題責任者/サブ課題A(構造材料)代表 東北大学 久保百司
「課題概要と体制」
10:15-10:40 サブ課題A(構造材料) 東北大学 久保百司
「極限環境対応構造材料拠点における計算材料科学とデータ駆動型研究」
10:40-11:00 サブ課題A(構造材料) 大阪大学 新里秀平
「機械学習原子間相互作用を用いた原子モデリングに基づく水素環境下における鉄の変形・破壊解析」
11:00-11:20 サブ課題A(構造材料) 島根大学 榎木勝徳
「第一原理計算に基づく溶質原子間力の評価と組織シミュレーションによるデータ創出」
11:20-11:45 サブ課題B(磁性材料)代表 物質・材料研究機構 只野央将
「第一原理計算によるホイスラー合金データベースの構築と応用」

16:25-16:30 東北大学 久保百司
「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告」
16:30-16:50 大阪大学 尾方成信
「機械学習を用いた高速動的モンテカルロ法による合金中の短距離化学秩序構造解析」
16:50-17:10 産業技術総合研究所 福島鉄也
「磁性材料のための基盤的シミュレーションコードの開発」
17:10-17:30 大阪大学 松林伸幸
「ペプチド凝集に対する共溶媒効果の全原子エネルギー論」
17:30-17:50 関西大学 藤本和士
「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用」

11:45-13:00 昼休み

期待と講評

13:00-13:20 サブ課題C(電気化学材料)代表 東京大学 澁田 靖
「電気化学材料研究拠点における理論計算・データ活用型アプローチ」
13:20-13:40 サブ課題C(電気化学材料) 東北大学 Jang Seonghoon
「高並列計算によるイオン性固溶体の構造探索-計算の完全自動化への取り組み」
13:40-14:05 サブ課題D(エレクトロニクス材料)代表 東京工業大学 多田朋史
「第一原理計算による誘電体材料の欠陥構造探索とKMC法による分極ドメインダイナミクス」
14:05-14:25 サブ課題D(エレクトロニクス材料) ファインセラミックスセンター 森分博紀
「第一原理計算による新規強誘電体材料の探索」
14:25-14:50 サブ課題E(バイオ-高分子材料)副代表 理化学研究所 杉田有治
「「富岳」を用いたマルチスケール分子動力学計算法の開発と液液相分離等への応用」
14:50-15:10 サブ課題E(バイオ-高分子材料) 大阪大学 松林伸幸
「ペプチド溶解性の全原子解析」
15:10-15:30 サブ課題E(バイオ-高分子材料) 九州大学 加藤幸一郎
「粗視化シミュレーションとデータ科学手法によるCO₂分離膜材料の解析」

17:50-17:55 産業界からの期待
デンソー 伊藤みほ
17:55-18:00 講評
スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム 領域総括/
東京大学 常行真司

研究交流会

18:10-20:00 研究交流会

15:30-15:45 休憩

■ 発表時間と質疑応答時間

【20分講演の場合】発表時間15分/質疑応答5分

【25分講演の場合】発表時間20分/質疑応答5分

【40分講演の場合】発表時間35分/質疑応答5分