

2024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

2025年

3月7日(金)

10:00～17:50

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)
- 《協賛》◆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
◆高度情報科学技術研究機構 (RIST)
◆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」
◆計算物質科学協議会 (CMSF)

研究交流会開催 18:00～20:00

会場

レストラン萩

会費

5,000円

《申込締切》

2025年2月21日(金)

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_250307/

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 室長 栗原 潔 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
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	
10:10-10:15	DDCoMS課題責任者 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) 代表 東北大学 久保百司 「大規模反応分子動力学法による構造材料の腐食・摩耗シミュレーション」
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水素環境下におけるbcc鉄中欠陥ダイナミクスの分子動力学解析」
11:00-11:20	サブ課題A (構造材料) 島根大学 榎木勝徳 「第一原理計算を用いたbcc Fe中のi-sクラスタリング予測によるデータ創出」
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 「ハイスループット第一原理計算と機械学習による機能性ホイスラー合金の探索」
11:45-13:00	昼 休 み
13:00-13:45	招待講演 ENEOS 小野寺拓 「汎用原子レベルシミュレータの開発とENEOSのMI研究への活用、将来展望」
13:45-14:10	サブ課題C (電気化学材料) 代表 東京大学 瀧田 靖 「材料研究汎用データ同化アプリの開発と「富岳」への実装の取り組み」
14:10-14:30	サブ課題C (電気化学材料) 東京科学大学 館山佳尚 「非平衡MDによるイオン相関を考慮したイオン伝導度計算の加速」
14:30-14:50	サブ課題C (電気化学材料) 東京科学大学 周 子臻 「LiNbO ₃ and LiTaO ₃ Coating Effects on the Interface of the LiCoO ₂ Cathode : A DFT Study of Li-Ion Transport」
14:50-15:15	サブ課題D (エレクトロニクス材料) 代表 東京科学大学／九州大学 多田朋史 「欠陥配置探索と機械学習ポテンシャルMDによる誘電体分極反転ダイナミクス」
15:15-15:35	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 設楽一希 「理論計算に基づく新規強誘電体材料の探索」
15:35-15:50	休 憩
15:50-16:15	サブ課題E (バイオ・高分子材料) 代表 京都大学 佐藤啓文／金丸恒大 「液体の積分方程式理論のハイブリッド手法によるペプチドデータベースの構築」
16:15-16:35	サブ課題E (バイオ・高分子材料) 名古屋大学 吉田紀生 「バイオ高分子の溶媒和解析手法の開発と応用」
16:35-16:55	サブ課題E (バイオ・高分子材料) 九州大学 加藤幸一郎 「CO ₂ 分離膜材料のマルチスケール解析」
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	
16:55-17:40	招待講演 物質・材料研究機構 田村 亮 「自律駆動型材料研究を支援するオープンソースソフトウェア開発」
期待と講評	
17:40-17:45	産業界からの期待 京セラ 執行役員／研究開発本部長 仲川彰一
17:45-17:50	講評 HPCIコンソーシアム 理事長／DxMT事業 SPD／ 計算科学振興財団 チーフコーディネータ 伊藤 聡
研究交流会	
18:00-20:00	研究交流会

■ 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

【45分講演の場合】発表時間40分／質疑応答5分