DxMT ｜ 東京科学大学拠点 D²MatE セミナー

材料データ × 計算材料科学 ハンズオン

材料データを組織の壁を越えて活用する方法と、計算科学を材料研究に取り入れる方法を、実例とハンズオンをを通して体験するセミナーです。
第1部ではWAVEMAP・WAVEBASE、
第2部ではWinmostarを用い、材料データ活用から量子化学・第一原理計算・汎用機械学習力場を紹介します。

参加費無料、定員65名（先着順）
ハンズオンを行う方は、ノートPC、モバイルWifiなどの通信手段を準備して下さい。
Winmostarの環境構築については、参加登録者に事前に連絡いたします。

参加登録
登録URL https://forms.cloud.microsoft/r/uVvyDRqC8i

開催日　2026年10月20(火)
場所　東京科学大学 大岡山キャンパス
本館 4階 第1会議室 （410会議室）

本館地図
https://www.ssc.titech.ac.jp/amap/home/ookayama/east/main-bldg_main-bldg-lecture-halls/

13:30 — 17:00 （開場 13:00）

PROGRAM

13:30 OPENING　東京科学大学 元素戦略MDX研究センター 神谷 利夫教授

13:35 — 15:35
材料データを『見つける・拡げる・深める』
WAVEMAP、WAVEBASEがつなぐデータ相互利用とDxMT事例紹介
平田 裕人 氏｜トヨタ自動車株式会社 材料技術領域 主査
青柳 裕一氏｜トヨタ自動車 株式会社　新事業企画部　主幹
吉川 英樹 氏｜NIMS データ創出・活用型データ連携部会運営室 上席室長

15:35 — 15:55 BREAK

15:55 — 17:00
Winmostarによる計算材料科学 ハンズオン
量子化学計算・第一原理計算・汎用機械学習力場を対象に
坂牧 隆司 氏｜株式会社クロスアビリティ　取締役
吉田 孝史 氏｜株式会社クロスアビリティ 材料計算支援コンサルタント

共催｜元素戦略MDX研究センター｜フロンティア材料研究所
協賛｜物質理工学院｜VI Materials Positive Society
お問い合わせ｜d2mate@mdxes.iir.isct.ac.jp

DxMT ｜ 東京科学大学拠点セミナー ｜ 10.20 TUE 13:30—17:00
東京科学大学 大岡山キャンパス　本館 4階 第1会議室（410会議室）

講演内容のご案内

01 開催趣旨

材料データの相互利用と計算材料科学を、研究の選択肢に

材料データを組織の壁を越えて活用する方法と、計算科学を材料研究に取り入れる方法を、実例とハンズオンを通して紹介します。
第1部ではWAVEMAP・WAVEBASEを用いた材料データの相互利用と解析・活用を、第2部ではWinmostarを用いた量子化学計算・第一原理計算・汎用機械学習力場を体験します。

02 材料データを『見つける・拡げる・深める』

WAVEMAP、WAVEBASEがつなぐデータ相互利用とDxMT事例紹介

WAVEMAPでは、材料間の類似性を可視化し、データ保有者と利用者をつなぐ材料データ相互利用の考え方と活用方法を紹介します。
WAVEBASEでは、教師なし学習やPCA等を活用して材料・計測データの特徴を抽出し、解析から結果の再利用へつなげる方法を紹介します。
ハンズオンでは2班に分かれてWAVEMAP／WAVEBASEを実際に操作し、途中で班を入れ替えて双方のツールを体験します。
あわせて、DxMTにおけるRDE登録データのカタログ化とデータ相互利用に向けた取組事例も紹介します。

03 Winmostarによる計算材料科学 ハンズオン

量子化学計算・第一原理計算・汎用機械学習力場を対象に

Winmostarの概要紹介に続き、MOPAC GUIを用いた量子化学計算、Quantum ESPRESSO GUIを用いた第一原理計算（結晶・スラブ）を実習形式で体験します。その他LAMMPSおよびLAMMPSを介したMLFF計算についても手順を紹介します。