

マテリアル探索自動化-自律化人材育成セミナー

解説：21世紀、材料科学の進化はデータ駆動の時代を迎えています。このセミナーシリーズで今回は欧州のClaudia Draxl教授とMilica Todorović准教授をお呼びして、日々蓄積される膨大なデータを知識と価値に変えるための戦略やテクニックを紹介して頂きます。FAIRデータ基盤の重要性や異質なデータを活用した材料科学AI技術が紹介されます。大学院生から大学教授、産業界の研究者まで、材料科学でのデータからの知識獲得やAIに興味を持つすべての方を対象としています。皆様のご参加をお待ちします。

(NIMS木野日織)

日時：2023年12月19日（火）14:00-16:00

形式：オンサイトのみ。

場所：東京大学 工学部2号館 3階 31A会議室

https://www.u-tokyo.ac.jp/campusmap/cam01_04_03_j.html

言語：英語

申し込み：人数把握のためできる限り参加登録
お願いいたします。（変更しました。）



講師：Claudia Draxl教授
(Humboldt-Universität zu Berlin)

材料科学分野で毎日生成される膨大な研究データは21世紀の金鉱であり、FAIR（見つけやすい、アクセス可能、相互運用可能、再利用可能）なデータ基盤の重要性が強調されています。ご講演では、NFDIコンソーシアムFAIRmatがどのようにこれらの目標を追求しているか、および選ばれた例を通じてデータからの知識獲得方法についてご紹介させていただきます。

The vast amount of research data generated every day in materials science is a goldmine of the 21st century, underscoring the importance of a FAIR (findable, accessible, interoperable, reusable) data infrastructure. In this talk, you will learn how the NFDI Consortium FAIRmat is pursuing these goals and how to acquire knowledge from data through selected examples.



講師：Milica Todorović准教授
(University of Turku)

AI技術は材料科学の発見を加速させており、我々の研究方法論の標準的なツールとして急速に普及しています。Todorović准教授は異質なデータタイプの障壁を利点として変え、複数の情報源を組み合わせるマルチモーダルAIモデルの枠組みを開発しています。特に、マルチフェデリティデータにおけるマルチモーダルAIアルゴリズムを紹介し、具体例として、古典的な力場FFシミュレーション、第一原理計算（PBEおよびPBE0レベル）、およびCCSD(T)データとの情報統合についてご紹介させていただきます。

AI techniques are accelerating discovery in materials science and are rapidly becoming a standard tool in our research methodology, and Associate Professor Todorović is developing a multimodal AI modeling framework that turns the heterogeneous data type barrier into an advantage and combines multiple sources of information. In particular, the presentation will introduce multimodal AI algorithms in multi-fidelity data, with specific examples of classical force-field FF simulations, ab initio calculations (PBE and PBE0 levels), and information integration with CCSD(T) data.