

第67回RISMセミナーシリーズ データ駆動型AIセミナー(第18回)

大規模分子動力学シミュレーションと深層生成モデルを活用した材料組織予測
澁田 靖 教授 (東京大学 大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻)

概要：近年の計算機環境の飛躍的向上により数値解析で取り扱える空間スケールは大きく拡張され、講演者らは100億原子以上の超大規模分子動力学(MD)シミュレーションによりマイクロメートルスケールの金属材料組織における全原子解析を実現してきた。また最近では、大規模MDデータを深層生成モデルで学習し新たな材料組織を予測する試みを行っている。講演では大規模MDに立脚した組織予測研究の先端研究事例を中心に紹介する。