

第1回マテリアルズ・ゲノム（情報統合型物質・材料研究）

に関する日米ワークショップ概要

日時：2015年6月23-24日

場所：つくば国際会議場

〒305-0032 茨城県つくば市竹園2丁目20番3号

主催：アメリカ国立標準技術研究所（NIST）

国立研究開発法人 物質・材料研究機構、ノースウェスタン大学 CHiMaD

協賛：国立研究開発法人 科学技術振興機構、アメリカ科学技術財団（NSF）、
アメリカエネルギー省

後援：文部科学省

趣旨：

日米両国は材料研究に関して新しい時代を迎えようとしている。それは計算科学にデータベース技術、材料高速合成技術、高速評価技術を融合して進める新しい材料開発の試みである。この試みはアメリカでは Materials Genome Initiative として認識されており、この手法は多くの材料開発に適用され始めている。

日米ではこれまでの数十年間に多くの社会インフラが建設され、そのために多くの費用が投じられてきたが、これからの時代は、両国ともこれらの社会インフラを低コストでより長く維持管理することが求められており、そのための先進的な構造材料の開発と新しい手法の開発が急務となっている。

この新しい材料開発の考え方を導入することで、信頼性の高い材料を短い時間で設計し、開発することができる。手法は計算科学、シミュレーションを中心とし、それらを支える高速材料スクリーニングやデータベース、大型施設を使った材料開発である。日米両国はこれらの個々の技術分野で優れた実績を有しており、両国が協力し、個々の技術を融合しシナジー効果を発揮させることでこれらを組み合わせた新しい材料研究の発展を一層加速することができる。

平成26年7月7日に開催された日米科学技術協力合同実務級委員会でも材料科学・計算科学とデータ科学の融合、及びこの未開拓な新規融合研究分野での人材交流を含む日米連携の重要性が取り上げられ、日本側は NIMS、アメリカ側は NIST やノースウェスタン大学が中心となってこの分野における研究課題を継

続的に議論するためのワークショップを開催することが示された。今回、提案するワークショップはこの合意に基づくものである。この分野の関係者の英知を集め、新しい材料研究の発展をいっそう加速することを趣旨として本ワークショップを開催する。

テーマ:

このワークショップでは情報統合型物質・材料研究に関する内容を包含したものであるが、特に、[金属合金](#)や[コンポジット材料](#)、[セラミックス](#)などを含む[先進材料の開発](#)をテーマとする。そのためにテーマとしては、材料設計、材料データベース等、情報統合型物質・材料研究に必要な要素技術に焦点をあて、基調講演と平行セッションでワークショップを構成する。

基調講演では、その分野の背景と最近のトピックスで構成され、その領域の現状を理解する。平行セッションではパネリストはトピックスと同時に議論の題材となる課題を提示する。この内容はセッション毎でまとめられ、最終的に参加者で内容を共有する。また、このワークショップでは科学技術の観点からも重要な挑戦的課題も議論し将来の両国の共同研究のテーマを探索する。ワークショップの後には、共同研究や実施計画に関する内容を答申としてまとめる。

DAY 1 June 23, 2015 (TUE)

8 : 30 **Registration**

9 : 00 **Welcome and Opening Speeches** @Convention Hall 200

1. Sukekatsu Ushioda,
National Institute for Materials Science (NIMS)
2. Yuko Nagano
Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT)
3. Alexis C. Lewis National Science Foundation (NSF)
4. James Warren National Institute of Standard and Technology (NIST)

[Moderator: Yoshio Aoki (NIMS) and Robert Chang* (Northwestern University)]

Session 1 : 10 : 00-12 : 20 @Convention Hall 200

10 : 00-10 : 20

Outline : "Overview and Research Topics for the Materials Genome Workshop"
Toyohiro Chikyow, NIMS

10 : 20-10 : 40

Plenary Lecture 1 : "Overview of JST's Data-Driven Materials Research"
Jun'ichi Sone, Japan Science and Technology Agency

10 : 40-11 : 30

Plenary Lecture 2 : " The Materials Genome Initiative: NIST, Data, and Open Science"
James Warren, NIST

11 : 30-11 : 50 Coffee Break

11 : 50-12 : 30

Plenary Lecture 3 : "Overview of "Materials Research by Information Integration (MI²I)" Initiative"
Kiyoyuki Terakura, NIMS

[Moderator: Toyohiro Chikyow* (NIMS)]

12 : 30-12 : 40 Group Photo

12 : 40-13 : 30 Lunch

Session 2 : 13 : 30-14 : 20 @Convention Hall 200

Special Lecture : “Informatics Approaches in Materials Science “
Isao Tanaka, Kyoto University

[Moderator: Taizo Sasaki* (NIMS)]

14 : 20-14 : 40 Coffee Break

Session 3 : 14 : 40-16 : 30

General topics related to the MGI by Five parallel discussion groups

Group 1a : Materials design by calculation and modeling

@Conference Hall 201a

Short Lecturer

Koji Tsuda (University of Tokyo)

Vladan Stevanovic (Colorado School of Mines&NREL)

[Moderator: Taizo Sasaki (NIMS) & Wing Kam Liu* (Northwestern Univ.)]

Group 1b : Materials design by simulation and modeling

@Conference Hall 201b

Short Lecturer

Tsuyoshi Miyazaki (NIMS)

Chioko Kaneta (FUJITSU Laboratories)

Jon Guyer (NIST)

Julia Medvedeva (Missouri Univ.S&T)

Alejandro Strachan (Purdue Univ.)

[Moderator: Naoto Umezawa* (NIMS) & Monic Olvera (Northwestern Univ.)]

Group 2 : Materials synthesis and data base

@Conference Hall 202a

Short Lecturer

Toyohiro Chikyow (NIMS)

Atsushi Yamamoto (National Institute of Advanced Industrial Science
and Technology, AIST)

Zach Trautt (NIST)

Sara Barron (NIST)

[Moderator: Takahiro Nagata (NIMS) & Darryl Butt* (Boise State Univ.)]

Group 3 : Materials characterization and data mining

@Conference Hall 202b

Short Lecturer

Dam Hieu Chi (Japan Advanced Institute of Science and Technology,
JAIST)

Yibin Xu (NIMS)

Martin Green (NIST)

Boris Wilthan (NIST)

[Moderator: Hideki Abe (NIMS) and Kevin Coakley* (NIST)]

Group 4 : Research Infrastructure for materials development

@Conference Hall 406

Short Lecturer

Yasuo Koide (NIMS)

Shinji Kohara (NIMS)

Mike Bedzyk (Northwestern Univ.)

[Moderator: Hideki Yoshikawa (NIMS) & Cate Brinson* (Northwestern Univ.)]

Session 4 : 16 : 30-17 : 30 @Convention Hall 200

Joint discussion with short reports from each group

[Moderator: Toyohiro Chikyow (NIMS) & Sara Barron* (NIST)]

Day 2 June 24, 2015 (WED)

Session 5 : 8 : 30- 10 : 30 @Convention Hall 200

MG for advanced structure materials

8 : 30- 9 : 10

Plenary Lecture 4 : “Materials Genomics: From CALPHAD to Flight”

Gregory Olson (Northwestern University)

9 : 10-9 : 50

Plenary Lecture 5 : “CVM as a theoretical tool in Integrated Computational Materials Designing”

Tetsuo Mohri (Tohoku University)

9 : 50-10 : 20

Invited Talk : “Introduction to Development of Materials Integration System in Structural Materials for Innovation Project, Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program”

Masahiro Takemura (JST)

Yutaka Kagawa (University of Tokyo)

[Moderator: Koichi Tsuchiya (NIMS) & R.P.H. Chang* (Northwestern Univ)]

10:20-10:40

Coffee Break

Session 6 : 10 : 40-12 : 40

MG for advanced structure materials

Group 1a : Materials design by calculation and modeling

@Conference Hall 201a

Short Lecturer

Ryoji Sahara (NIMS)

Mitsuhiro Itakura (Japan Atomic Energy Agency, JAEA)

Wing Kam Liu (Northwestern Univ)

[Moderator:Tomonori Kitashima (NIMS) & Francesca Tavazza* (NIST)]

Group 1b : Materials design by simulation and modeling

@Conference Hall 201b

Short Lecturer

Jun Yanagimoto (University of Tokyo)

Zi-Kui Liu (Penn State Univ.)

Ed Garboczi (NIST)

Monica Olvera de la Cruz (Northwestern Univ.)

[Moderator: Takuya Kadohira (NIMS) &

Julia Medvedeva* (Missouri Univ.S&T)]

Group 2 : Materials synthesis and data base

@Conference Hall 202a

Short Lecturer

Ikuo Ohnuma (NIMS)

Junpei Sakurai (Nagoya University)

Darryl Butt (Boise State Univ.)

Srikanth Patala (North Carolina State University)

[Moderator: Masahiro Goto (NIMS) & Sara Barron* (NIST)]

Group 3 : Materials characterization and data mining

@Conference Hall 202b

Short Lecturer

Yoshitaka Adachi (Kagoshima University)

Kevin Coakley (NIST)

[Moderator: Yibin Xu (NIMS) & Martin Green* (NIST)]

Group 4 : Research Infrastructure for materials development

@Conference Hall 406

Short Lecturer

Yo Tomota (NIMS)

Cate Brinson (Northwestern Univ.)

Eswaran Subrahmanian (NIST)

[Moderator: Yoshiyuki Yamashita (NIMS) &

Mike Bedzyk*(Northwestern Univ.)]

12 : 40-14 : 00 Lunch

Session 7 : 14 : 00-17 : 20 @Convention Hall 200

US and Japan's Expectation to Materials Genome Initiative

14:00—14:30

“DFT calculation over view of NIST”

Francesca Tavazza (NIST)

14:30—15:00

“Global Information Infrastructure”

Foster, Ian T, (University of Chicago)

15:00—15:30

“The Needs and Some Case Studies of Integrated Computational Materials Engineering in Boeing”

Donald S. Shih (Boeing Research & Technology)

15:30-16:00 Coffee Break

16:00—16:30

“Material and Process Designs in Toyota Central R&D Laboratories and Industry's Expectation for Materials Genome”

Masaya Kawasumi (Toyota Central R&D Labs)

16:30—17:00

“Alloy and Process Design and Development at General Electric: Using Computational Methods to Accelerate Technology Introduction”

Judson S. Marte (GE Global Research)

[Moderator: Yasuo Koide (NIMS) and James Warren* (NIST)]

Session 8 : 17 : 00-17 : 30 @Convention Hall 200

Joint session: reports from groups; discussion; and future plans

[Moderator: Koichi Tsuchiya* (NIMS) & R.P.H. Chang (Northwestern Univ)]

17 : 30 **Closing Remark**

Takahiro Fujita (NIMS)

@Convention Hall 200

18 : 00 **Banquet**

@ Multi-Purpose Hall