

近年、様々な材料(構造材料・ハードマテリアル・ソフトマテリアル)での、データを活用した研究開発(マテリアルズインフォマティクス)の高度化や、材料の研究開発現場のデジタル化やスマート化といったデジタルトランスフォーメーション(DX)が盛んに議論されてきている。このような流れの中で、材料設計・研究におけるデータ活用の根幹をなす理論とシミュレーション技術の知識は必要不可欠なものとなっている。さらに、計算物質科学やマテリアルズインフォマティクスのみならず、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システムであるマテリアルズインテグレーション(Materials Integration)システム*による基礎研究から実用化・事業化までの研究・開発の加速が注目されている。

本セミナーシリーズでは、特に、計算物質科学の観点から、シミュレーションや数値計算の理論的背景や手法、マテリアルズインテグレーション、マテリアルDXなどによる多様な材料研究の基盤となる内容について、具体的な事例をもとにオムニバスで学ぶ。

[*注: マテリアルズインテグレーションは、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の課題の一つ「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」で推進されている計算材料科学の手法。]

第2テーマ「有限差分法と1次元熱伝導方程式・フェーズフィールド法」

本テーマでは、フェーズフィールド法の基礎からPythonを用いたプログラミングまで解説します。数値シミュレーションの馴染みのない方に向けて、ウェブブラウザでの実習環境の解説やサンプルプログラムを用意しています。少しでもフェーズフィールド法に興味がある方は、是非ご参加ください。

<入門編: 受講の方へ期待される事前知識> 理工系修士学生程度

<基礎・応用編: 受講の方へ期待される事前知識> Pythonプログラム基本(for文, if文, 関数呼出, 配列) 実習は、Google Colaboatory、またはJupyter Notebook形式のファイルが開ける環境であること

2022年 **11月18日(金)** 9:30-16:00 (PC実習あり)

<ハイブリッド開催> 会場: 東北大学金属材料研究所 2号館 講堂(片平キャンパス)

寺田 弥生 東北大学 金属材料研究所 准教授 PCoMSコーディネーター&RISME企画マネージャー

「さわって、うごかして理解する

有限差分法と1次元熱伝導方程式～入門編～」

2022年 **11月25日(金)** 9:30-17:00 (-最長18:00) (PC実習あり)

<ハイブリッド開催> 会場: 東北大学理学研究科合同C棟 青葉サイエンスホール(青葉山北キャンパス)

山中 晃徳 東京農工大学 工学研究院 先端機械システム部門 教授

「さわって、うごかして理解する

フェーズフィールド法～基礎編～」

「さわって、うごかして理解する

フェーズフィールド法～応用編～」

定員: オンサイト参加・各日25名 / オンライン参加・各日50名

申込: 事前登録制(2022年11月16日(水)13:00迄)

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-CMS-seminars-2022/>

主な対象: <基礎編・入門編> 理工系のMCLレベル以上 <応用編> DC、PD、若手研究者以上



<共催> 計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>

極限環境対応構造材料研究拠点 (RISME)

<協賛> 東北大学金属材料研究所 計算材料科学センター (CCMS)



第2テーマ「有限差分法と1次元熱伝導方程式・フェーズフィールド法」

11月18日(金)

「さわって、うごかして理解する有限差分法と1次元熱伝導方程式～入門編～」

寺田 弥生 東北大学 金属材料研究所 准教授 PCoMS コーディネーター & RISME企画マネージャー
＜ハイブリッド開催＞会場：東北大学 金属材料研究所 2号館 講堂 (片平キャンパス)

アクセスマップ：<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/about/location.html>

9:30-11:30

- 1 有限差分法 ～Taylor展開から導出しよう～
- 2 熱伝導方程式の有限差分法による離散化 ～プログラミングの準備～
- 3 Google Colaboatoryの使い方 ～Google Chromeでプログラミング～

13:30-16:00

- 4 1次元熱伝導方程式のPythonプログラミング ～プログラムの理解～
- 5 2次元熱伝導方程式のPythonプログラミング ～1次元からの拡張～

11月25日(金)

「さわって、うごかして理解するフェーズフィールド法～基礎編～」

「さわって、うごかして理解するフェーズフィールド法～応用編～」

山中 晃徳 東京農工大学 工学研究院 先端機械システム部門 教授

＜ハイブリッド開催＞会場：東北大学 理学研究科合同C棟 青葉サイエンスホール(青葉山北キャンパス)

アクセスマップ：<https://www.sci.tohoku.ac.jp/campusmap/kita-aobayama/>

9:30-12:40 <基礎編>

- 1 イントロダクション ～フェーズフィールド法で何ができるか～
- 2 フェーズフィールド法の基礎
(休憩)
- 3 Allen-Cahn (AC) 方程式を用いた移動境界問題を解くPythonプログラミング
- 4 Cahn-Hilliard方程式を用いたスピノーダル相分解を解くPythonプログラミング

14:00-17:00 (～最大18:00) <応用編>

- 1 フェーズフィールド法による材料組織形成シミュレーション ～研究紹介～
- 2 純物質凝固 (デンドライト形成) のフェーズフィールドシミュレーション
(休憩)
- 3 多結晶粒成長のフェーズフィールドシミュレーション
- 4 質問タイム

今
後
の
セ
ミ
ナ
ー
ス
ケ
ジ
ュ
ー
ル

第3テーマ 2022年12月13日(火) 基礎編10:00-11:40、応用編13:10-14:50 オンライン

三宅 隆 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域 研究チーム長

基礎編:「材料開発のための機械学習入門」

応用編:「機械学習を活用した材料開発の現状と課題」

第4テーマ 2023年1月17日(火) 13:30-15:00

福島 鉄也 東京大学 物性研究所 データ統合型材料物性研究部門

(兼) 附属計算物質科学研究センター 特任准教授

応用編:「第一原理計算を用いた不規則系磁性材料の探索」

第5テーマ 2023年1月～2月 t.b.a.

第6テーマ 2023年2月～3月 オンラインorハイブリッド開催 <基礎編&応用編>

毛利 哲夫 北海道大学 名誉教授/UST(科学技術振興機構) シニアフェロー

※PCoMSIPD対象者の方は、「計算物質科学セミナー」のいずれか1日(もしくは半日*2回)を受講され、受講後に所定の報告書を提出された場合に、IPDプログラム選択科目カテゴリー A&B 1単位として認定されます。なお、IPD対象者(フェロー・インターンシップ実施済み)は報告書の提出は不要です。



計算物質科学
人材育成コンソーシアム
Professional development Consortium
for Computational Materials Scientists

東北大学 金属材料研究所

計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>

Professional development Consortium for Computational Materials Scientists <PCoMS>

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1

Tel: +81-22-215-2282 Fax: +81-22-215-2164 Email: pcoms@imr.tohoku.ac.jp

*PCoMS は「文部科学省 科学技術人材育成費補助事業 国立研究開発法人科学技術振興機構『科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)』」の採択を受け2015年に発足しました。東北大学(主として金属材料研究所)、東京大学(主として物性研究所)、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学(主としてエマージングサイエンスデザインR³センター)が実施機関となって、計算物質科学分野や計算物質科学に興味のある実験物質科学分野の若手研究者や博士人材のキャリア支援のための様々な取組を行っています。