

# マテリアルズインフォマティクスの中核をなす 計算科学シミュレーション技術

**講師：久保百司氏（東北大学金属材料研究所計算材料学センター センター長・教授）**

近年のマテリアルズインフォマティクスの発展は目覚しく、多くの企業で、マテリアルズインフォマティクスを今後、十分に活用できるかどうか、将来の企業における材料開発の成否を分ける重要な鍵となるとの認識が広がりつつあります。一方で、マテリアルズインフォマティクスにおいては、計算科学シミュレーションが重要な役割を担っており、マテリアルズインフォマティクスと計算科学シミュレーションの連携が不可欠であることも、多くの企業において広く認識されています。そこで本講演では、マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションの基礎から応用までの講義を中心に行うとともに、計算科学シミュレーションを活用した様々な材料設計の成功例を紹介します。また、聴講者の方には、計算科学シミュレーションをいかに実際の企業における材料開発に応用可能であるか、どうすれば計算科学シミュレーションを有効に活用できるのかの基礎を理解して頂けるものと考えています。

**【経歴】**平成2年3月 京都大学工学部石油化学科卒業、平成4年3月 京都大学大学院工学研究科石油化学専攻修士課程修了、平成4年7月 東北大学工学部分子化学工学科助手、平成13年4月 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻助教授、平成15年10月 科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきがけ研究員を兼任、平成18年4月 科学技術分野の文部科学大臣表彰（若手科学者賞）、平成20年1月 東北大学大学院工学研究科教授、平成27年3月 東北大学金属材料研究所教授、平成29年4月 東北大学金属材料研究所計算材料学センター センター長 **【活動内容】**平成25年3月 日本化学会 学術賞 受賞、平成27年5月 日本コンピュータ化学会 学会賞 受賞、平成28年度～平成31年度文部科学省ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」課題責任者

開催日時	2020年5月19日（火）10：30～16：30	【会場】 ちよだプラットフォームスクウェア ミーティングルーム5F 会議室 〒101-0054 東京都千代田区神田錦町3-21
受講料	52,000円 +税 ※昼食・資料付 * メルマガ登録者 46,000円 +税 * アカデミック価格 25,000円 +税	

\*アカデミック価格：学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2名目は無料、3名目以降は半額です。

★【対象者】企業において、実験による試行錯誤的な研究開発ではなく、電子・原子レベルの計算科学シミュレーションとマテリアルズインフォマティクスを活用することで、効率的かつ高速な材料設計を実現したいと考えておられる方。特に、マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションに興味があり、実際に企業においてどのように計算科学シミュレーションを活用することができるのかの知識を得たいと思っておられる方。

★【得られる知識】マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションを、企業における製品開発にどのように応用することができるのかの道筋を理解することができます。将来的に、計算科学シミュレーションを、いかに企業における製品開発に役立たせることができるのかの道筋を理解することができます。さらに、計算科学シミュレーションとマテリアルズインフォマティクスをどのように連携させていくべきかも理解することができます。

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

<p><b>1. マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学の企業における意義と活用方法</b></p> <p>1.1 企業における計算科学シミュレーションの意義と活用 1.2 マテリアルズインフォマティクスと計算科学シミュレーションの連携 1.3 マテリアルズインフォマティクスを活用した計算科学による高速スクリーニング 1.4 計算科学シミュレーションによる特許戦略 1.5 計算科学シミュレーションを活用した産学連携</p> <p><b>2. 計算科学シミュレーションの基礎</b></p> <p>2.1 ニューラルネットワークの基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.2 分子力学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.3 分子動力学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.4 モンテルロ法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.5 量子化学の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.6 量子分子動力</p>	<p>学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界</p> <p><b>3. 計算科学シミュレーションによる実践的材料設計</b></p> <p>3.1 トライボロジーへの応用 3.2 化学機械研磨プロセスへの応用 3.3 材料合成プロセスへの応用 3.4 精密加工プロセスへの応用 3.5 エレクトロニクス・半導体への応用 3.6 リチウムイオン2次電池への応用 3.7 燃料電池への応用 3.8 太陽電池への応用 3.9 鉄鋼材料の応力腐食割れへの応用 3.10 摩耗・劣化現象への応用 3.11 高分子材料への応用</p> <p><b>4. 計算科学シミュレーションの今後の発展</b></p> <p>4.1 マルチフィジックス計算科学 4.2 マルチスケール計算科学 4.3 スーパーコンピュータを活用した超大規模シミュレーション</p> <p><b>5. 質疑応答・名刺交換・個別相談</b></p>
---	---

弊社記入欄		<b>セミナー申込書</b>			
セミナー名		<b>マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーション技術</b>			
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○↓		会社名（団体名）	TEL：		
		住所 〒	FAX：		
			E-mail：		
会員登録済み	新規登録希望	部署	役職	氏名	
お支払方法		銀行振込 ・ その他		お支払予定	年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail (re@cmcre.com) でお申し込みください。

■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしておりません、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。

■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町2-7 TEL 03-3293-7053

■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号  
**03-3291-5789**