

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。]

計算物質科学と  
マテリアルデジタルトランスフォーメーション  
DX

第1テーマ 岡部 朋永 東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授

2022年 10月13日(木) 10:00-12:00

基礎編:「固体力学の基礎と応用」

2022年 10月14日(金) 10:00-11:30

応用編:「複合材料の力学」

定員: 50名

申込: 事前登録制(2022年10月11日(火)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

参加無料  
オンライン開催  
Japanese only



今後のセミナースケジュール

※詳細が決まり次第ご案内致します。

第2テーマ 2022年11月18日(金) AM&PM ハイブリッド開催(PC実習有)

寺田 弥生 東北大学 金属材料研究所 PCoMSコーディネーター 准教授  
入門編:「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」

第2テーマ 2022年11月25日(金) AM&PM ハイブリッド開催(PC実習有)

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  
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～基礎編～」  
応用編:「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～」

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 オンライン開催  
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 オンライン開催 <応用編>

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

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/JST(科学技術振興機構) シニアフェロー



計算物質科学  
人材育成コンソーシアム  
Computational Materials Science  
Seminar Series

<主催・問合せ> 計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>

Email: [pcoms@imr.tohoku.ac.jp](mailto:pcoms@imr.tohoku.ac.jp)

<協賛> 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター(CCMS)

## 第1テーマ 「固体力学の基礎と応用/複合材料の力学」

岡部 朋永 東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授

10月13日 (木) 10:00-12:00

開会挨拶：久保 百司  
PCoMSコンソーシアム長 兼 次世代研究者育成委員会委員長 教授[東北大学]

### 基礎編：固体力学の基礎と応用

固体力学は連続体力学の一部であり、構造力学、弾性（塑性）力学、材料力学を内包する。まずは、これらの基礎となる内容を学習し、その実践編として各種有限要素解析を学ぶ。

- [1] 固体に関する基礎理論
- [2] 流体に関する基礎理論
- [3] 弾塑性体の変形に関する基礎理論
- [4] 微小変形理論における仮想仕事の原理と変分原理
- [5] 2次元弾性問題の有限要素法の定式化
- [6] 三角形の曲げ要素
- [8] 四角形(ACM)要素
- [7] Zienkiewicz-Zhouの誤差評価
- [9] アイソパラメトリック要素
- [10] Mindlin板要素
- [11] アイソパラメトリックシェル

10月14日 (金) 10:00-11:30

### 応用編：複合材料の力学（等価物性予測から損傷・破壊のシミュレーションまで）

多くの材料は単一素材で用いられることはまれであり、複合材料の形で利用される。複合材料の力学応答は大変重要な分野であるにも関わらず、体系的に学習したことが無い技術者が多い。開発現場にて複合材料の挙動を理論的に理解するための基礎・応用を学習する。

- [1] 複合則
- [2] 微視モデルからの等価剛性算出法
- [3] シアラグ解析（短繊維）
- [4] 等価介在物法（Eshelby, 森田中, 非線形）、異方性塑性論
- [5] 強度理論（3つのモデル）と微視的破壊モデル（圧縮、引張、SEM）
- [6] 連続体損傷力学（構成則マトリックス、損傷進展則）
- [7] マルチスケールモデリング

閉会挨拶：川勝 年洋  
PCoMSイノベーション創出人材育成委員会委員長 教授[東北大学]

\*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。

