

2021/11/19 (Tue.)

第12回 シミュレーションスクール

マテリアルズインフォマティクスを支えるシミュレーション

電歪ソフトマテリアルのマルチスケール 計算と機械学習を用いた材料設計

パナソニック株式会社
テクノロジー本部
マテリアル応用技術センター

田頭 健司 氏

【講演内容】

第12回では、超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトにて取り組んでいる、電歪ソフトマテリアル開発のマルチスケール計算および機械学習活用による効率化について講演します。本取り組みでは、モデル材料である液晶エラストマー(LCE)を Gay-Berne(GB)粒子によりモデル化し、粗視化分子動力学(CGMD)計算で力学特性や電歪特性の予測を行い、さらに、蓄積したCGMD計算データの機械学習により、重要パラメータを明らかにし、材料設計へ反映しています。また、粗視化空間から全原子空間あるいはデバイス空間へマルチスケール化し、分子構造と薄膜デバイスの力学特性や電歪特性を紐づけるため、量子化学計算および有限要素法との連成にも取り組んでいます。

本公演では、LCEのモデル化とシミュレータの詳細、およびマルチスケール化における連成手法について述べ、本シミュレータの開発期間短縮に対する有効性について言及します。この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(JPNP16010)の結果得られたものです。

【ご略歴】

2013年大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻博士後期課程修了。同年パナソニック株式会社入社。2016年より産総研つくばセンターを拠点とするNEDO超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトの技術研究組合ADMATに研究員として参画。ADMATでは、主に高分子ソフトマテリアルの力学特性を予測するマルチスケールシミュレータ開発に従事。

ライブ配信でのセミナーを実施いたします。皆様のご参加をお待ちしています。

■日 時 : 2021年11月19日(金)13:30
講義 13:30~14:15 質疑 14:15~14:30 (予定です)

■配信方法 : Teams で配信。

■参加費 : 無料です (日本ファインセラミックス協会 会員限定)

■お申込み締切 : 11月12日(金) 定員になり次第、締め切らせて頂きます。

■お申込み方法 : JFCA ホームページ/会員向けコンテンツより、お申込みください。

https://www.jfca-net.or.jp/index_kaiin.html

■定 員 : 120名

※1つの端末で複数名での聴講も可能です。代表者1名様のお申込記載をお願いいたします。

※お申込直後【受付完了】メール『〇〇様のご登録を受け付けました』という自動返信メールが届きますが、回線数に制限があるため申込者多数の際には、1社あたり先着3名までとさせていただきます。
その場合、募集締切り後に上記対応をさせていただきますので、ご了解の程、何卒よろしくお願いいたします。

■参加申込いただいた方には、

11月16日頃に、ご入力いただいた e-mail アドレスへ直接 web セミナーのご招待メールをお送りいたします。

■お問合せ窓口

(一社)日本ファインセラミックス協会 岩頭
〒105-0011 東京都港区芝公園 1-2-6 ランドマーク芝公園 2 階
TEL (03)3431-8271, FAX (03)3431-8284
E-mail:iwagashira@jfca-net.or.jp

以上