

科目名	データ駆動科学H
講義題目(テーマ)	材料設計計算工学とデータ駆動科学
担当教員	名古屋大学 小山敏幸
年度・学期	2022年 集中
単位数	1

学修成果とその割合	
1.高度な専門的知識・技能及び研究力	70
2.学際的領域を理解できる深奥な教養力	30
3.グローバルな視野と行動力	0
4.地域社会を牽引するリーダー力	0
その他	0

使用言語	「日本語」による授業
教科書・資料の言語	「日本語」のテキスト
実務経験を活かした授業	非該当
授業の形態	講義
対面・遠隔の別	遠隔形式
授業の方法	Zoomを用いた遠隔授業と、オンデマンド受講

授業の目的	フェーズフィールド法に基づく材料設計計算工学の基礎と、そのデータ駆動科学への展開について理解する。
授業の概要	以下の事柄について講義を行う。 (1). 熱力学の数学的構造、(2). 状態図の熱力学(CALPHAD法)、(3). 界面の熱力学、(4). ギブスエネルギーと拡散、(5). フェーズフィールド法、(6). 勾配エネルギーとスピノーダル分解、(7). マイクロメカニックスの基礎、(8). 組織形成シミュレーションとデータ駆動型科学

学修目標	
A水準（到達すれば「優」に相当）	(1). 熱力学の数学的構造、(2). 状態図の熱力学(CALPHAD法)、(3). 界面の熱力学、(4). ギブスエネルギーと拡散、(5). フェーズフィールド法、(6). 勾配エネルギーとスピノーダル分解、(7). マイクロメカニックスの基礎、(8). 組織形成シミュレーションとデータ駆動型科学について、十分に理解し、講義内容を他者に正確に説明できる。
C水準（到達すれば「可」に相当）	(1). 熱力学の数学的構造、(2). 状態図の熱力学(CALPHAD法)、(3). 界面の熱力学、(4). ギブスエネルギーと拡散、(5). フェーズフィールド法、(6). 勾配エネルギーとスピノーダル分解、(7). マイクロメカニックスの基礎、(8). 組織形成シミュレーションとデータ駆動型科学について、概ね理解し、講義内容の要点をまとめることができる。
評価方法・基準	Moodleで提出されたレポートの到達度(100%) から評価する。

各回の授業内容		
回	授業テーマ (5文字以上100文字以内)	内容概略(10文字以上200文字以内)

1	熱力学の数学的構造	熱力学の構造を数学的に捉え直し、多変数系の熱力学の実践的活用 法を理解する。
2	状態図の熱力学(CALPHAD法)	CALPHAD法による状態図計算について解説し、状態図計算ソフトの 活用法について示す。
3	界面の熱力学	熱力学を基礎に、界面の取り扱いについて説明する。
4	ギブスエネルギーと拡散	拡散現象を題材に、エネルギー論と速度論がどのように結びついているか を解説する。
5	フェーズフィールド法	フェーズフィールド法の歴史と全体像（組織形成シミュレーションも含む）
6	勾配エネルギーとスピノーダル分解	不均一系のエネルギー解析と相分離の基礎について説明する。
7	マイクロメカニックスの基礎	マイクロメカニックスの基礎から、複合材料における種々の特性解析への一般 的拡張について述べる。
8	組織形成シミュレーションとデータ駆動 型科学	材料組織形成シミュレーションとデータ駆動科学の融合について説明し、材料 科学・工学の今後の発展におけるインフォマティクス役割について議論す る。

授業外学修時間の目安	本科目は、45時間の学修が必要な内容で構成されている。授業は 16時間分（2h×8コマ）となるため、29時間分相当の事前・事後学 修（課題等含む）が、授業の理解を深めるために必要となる。
------------	---

キーワード	状態図、CALPHAD法、フェーズフィールド法、マイクロメカニク ス、データ同化
テキスト	授業の際に資料を配布する。
参考文献	[1] 小山敏幸：「材料設計計算工学 - 計算組織学編 - (増補新版)」, 内田老鶴圃, (2019). [2] 阿部太一：「材料設計計算工学 - 計算熱力学編 - (増補新版)」, 内田老鶴圃, (2019). [3] 小山敏幸, 高木知弘：「フェーズフィールド法入門」, 丸善, (2013). [4] 小山敏幸, 塚田祐貴：「材料組織弾性学と組織形成」, 内田老鶴圃, (2012). [5] 足立吉隆, 小山敏幸：「3D材料組織・特性解析の基礎と応用」, 新家光雄(編), 内田老鶴 圃, (2014).

オフィス・アワー	データ駆動型社会を担う人材育成プログラム事務室に連絡を取るこ と
担当教員への連絡方法	データ駆動型社会を担う人材育成プログラム事務室に連絡を取るこ と
担当教員からのメッセージ	各自で実際に計算してみることをお勧めします。