

自分だけの材料を作ろう！ 計算科学入門

Create Your Own Material! An Introduction to Supercomputers

担当教員： 徐 超男 教授 (chao-nan.xu.c8@tohoku.ac.jp)

○内山 智貴 助教 (tomoki.uchiyama.e8@tohoku.ac.jp)

科学技術の進歩により、高度な計算能力を持つコンピュータ（スーパーコンピュータ）が多くの分野で重要な役割を果たしています。日本が誇るスーパーコンピュータ「京（けい）」は、2011年に運用開始され、その計算速度の速さから世界一となりました。京は気象予測や地震シミュレーション、医薬品開発などで大きな成果を挙げました。その後継機である「富岳（ふがく）」は、2020年に運用開始され、京の約100倍の計算速度を誇ります。富岳は、新型コロナウイルスの感染拡大を防ぐシミュレーションや気候変動予測、AI研究など、多岐にわたる分野で活用されています。このようにコンピュータを利用したシミュレーションは私たちの生活に身近になってきています。

本研修では、計算科学への入門として、自分だけの材料をデザインし、その物性を高性能コンピュータで計算する体験ができます。

この研修を通じて、材料科学と計算科学の融合を体験し、現代の研究におけるコンピュータシミュレーションの重要性と可能性を理解することを目指します。特に、以下のスキルを磨くことを目標とします。未来の研究者としての第一歩を踏み出しましょう。

- 結晶構造と物質科学の基礎
- 結晶設計とコンピュータシミュレーション技術
- 入門レベルの量子力学
- データ解析とプレゼンテーションの能力

