

計算科学・社外実験データベースを活用した マテリアルズインフォマティクス基礎

1名分料金で
2人目無料【LIVE配信】【アーカイブ配信】 セミナーURLはこちら→<https://www.rdsc.co.jp/seminar/250860>

- ◆日時: 2025年08月26日(火) 13:00~16:00
- ◆アーカイブ配信: 8/27(水)~9/10(水)期間中何度でも受講可能
- ◆受講料: 1名につき49,500円(税込、資料付)

会員(案内)登録していただいた場合、通常1名様申込で49,500円(税込)から
・1名で申込の場合、**46,200円(税込)**へ割引になります。
・2名同時申込で両名とも会員登録していただいた場合、**計49,500円(2人目無料)**です。

セミナーお申込みFAX

03-5857-4812

※お申込み確認後は弊社よりご連絡いたします。

【講師】(株)ダイセル デジタル戦略推進センター
上席技師 兼子 祐氏

【習得できる知識】材料開発加速化のための計算科学技術の重要性について理解できる / MI 技術の活用による効果が理解できる / 必要な MI の要素技術について理解できる

【趣旨】近年のコンピューター技術の発展から、計算化学の重要性や機械学習の重要性が謳われてきました。弊社内ではデジタルアキテチャーによって、研究開発・プロセス開発・製造工程・物流など多岐にわたったデジタル化を進めております。この取り組みの中においても基礎技術となるマテリアルズインフォマティクスは、プロフェッショナルな経験と勘に基づく判断を、機械学習によってさまざまな技術者が利用できる技術として期待しております。本セミナーでは、計算科学・社外実験データベースを活用したマテリアルズインフォマティクス基礎と題して、基礎からの説明と、先端研究について紹介致します。本セミナーを受講したからといって、エキスパートになれるとは限りませんが、解決の糸口を見つける手助けになるでしょう。

1. イントロダクション

- 1.1 計算化学とマテリアルズインフォマティクスの違い
- 1.2 インフォマティクス・シミュレーション連携

2. 公開データベースの活用

- 2.1 データベースまとめ
- 2.2 無償公開
- 2.3 有償公開
- 2.4 まとめ

3. 計算科学の基礎

- 3.1 HFとは
- 3.2 DFT法とMP法
- 3.3 量子計算ソフトウェア
- 3.4 MDとは
- 3.5 分子動力学計算ソフトウェア
- 3.6 まとめ

4. マテリアルズインフォマティクスの基礎

- 4.1 機械学習とは
- 4.2 逆解析とは
- 4.3 まとめ

5. 実際の応用例

- 5.1 社内事例
- 5.2 論文事例
「An Intelligent, User-Inclusive Pipeline for Organic Semiconductor Design」
- 5.3 論文事例
「SMiPoly: Generation of Synthesizable Polymer Virtual Library using Rule-based Polymerization Reactions, J. Chem. Inf. Model. Article ASAP」
- 5.4 論文事例
「A Graph Convolutional Network for Elution Order Prediction in Chromatographic Enantioseparation」
- 5.5 論文事例
「Fully virtual exploration of cellulose solvents」
- 5.6 学会発表事例
「Materials informatics study of Molecular Catalysis of Cyclic Olefin Copolymer」

6. まとめ

【プログラム】

『計算科学』 セミナー申込書 FAX: 03-5857-4812 ※ご希望の参加形式にチェックを入れて下さい⇒☐LIVE/☐アーカイブ

会社・大学			
住所	〒		
電話番号		FAX	

お名前	所属・役職	E-Mail
①		
②		

会員登録(無料) ※案内方法を選択してください。複数選択可。

☐Eメール ☐郵送

● セミナーの受講申込みについて ●

必要事項をご明記の上、FAXでお申込み下さい。弊社で確認後、必ず受領のご連絡をいたします。受講用URLは後日お送りいたします。

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ので、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。

お申込み・振込に関する詳細はHPをご覧ください。
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/entry>

個人情報保護方針の詳細はHPをご覧ください。
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/privacy>