

計算科学の基礎と

結晶構造探索を利用した材料設計【LIVE配信】

◆日時: 2025年7月3日(木)13:00~16:00

◆会場: 自宅や職場など世界中どこでも受講可

◆聴講料: 1名につき49,500円(税込、資料付)

※会員登録(無料)をさせていただいた方には下記の割引・特典を適用します。

・1名でお申し込みされた場合、1名につき**36,300円(税込)**

・2名同時でお申し込みされた場合、**2人目は無料(2名で49,500円(税込))**

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: 長岡技術科学大学 技学研究院電気電子情報系 准教授 博士(工学) 山下 智樹 氏

【習得できる知識】

- ・結晶構造探索手法を用いた材料設計の基礎の理解
- ・機械学習ポテンシャルの基礎の理解

【趣旨】

本講演では、マテリアルズインフォマティクスと材料設計を中心に、第一原理計算と機械学習ポテンシャルの活用、および結晶構造探索について議論する。

まず、第一原理計算の基本概念とその応用について説明し、それを補完する手法として機械学習ポテンシャルを紹介する。これにより、大規模な材料シミュレーションを高精度かつ低コストで実行可能となる。

次に、結晶構造探索に焦点を当て、代表的な探索アルゴリズムについて解説する。特に、ランダムサーチ、進化的アルゴリズム、および組成可変型進化的アルゴリズムの特徴と適用例を示し、それぞれの利点と課題について考察する。また、具体的な結晶構造探索の事例を紹介し、実際の材料設計への応用可能性を議論する。

本講演を通じて、計算科学とデータ科学を融合させた材料探索の最前線を概観し、今後の材料設計における展望を示す。

【プログラム】

1. マテリアルズインフォマティクスと材料設計
2. 第一原理計算と機械学習ポテンシャル
 - 2-1. 第一原理計算
 - 2-2. 機械学習ポテンシャル
3. 結晶構造探索
 - 3-1. 構造探索アルゴリズム
 - (1)ランダムサーチ
 - (2)進化的アルゴリズム
 - (3)組成可変型進化的アルゴリズム
 - 3-2. 結晶構造探索例

【質疑応答】

【LIVE配信セミナーとは?】

- ・本セミナーは「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。「ミーティング用Zoomクライアント」をダウンロードするか、Webブラウザから参加するかの2種類がございます。ZOOM WEBセミナーのはじめかた(<http://www.rdsc.co.jp/files/instruction/zoom.pdf>)をご覧ください。
- ・お申込み後、受理のご連絡メールをさせていただきます。一部メールが通常セミナー形式(受講券、請求書、会場の地図)になっておりますが、LIVE配信のみのセミナーです。
- ・お申込み後、接続テスト用のURL(<https://zoom.us/test>)から「ミーティングテストに参加」を押していただき動作確認をお願いします。
- ・後日、別途視聴用のURLをメールにてご連絡申し上げます。セミナー開催日時の10分前に、視聴サイトにログインしていただき、ご視聴ください。
- ・セミナー資料は前日までには、お送りいたします。タブレットやスマートフォンでも視聴できます。

『計算科学【WEBセミナー】』セミナー申込書

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>