ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎とその材料設計への応用【LIVE配信】

1名分料金で2人目無料

◆日時：2025年9月4日（木）10：30～16：30
◆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55,000円（税込、資料付）

※会員登録（無料）をしていただいた方には下記の割引・特典を適用します。
・1名でお申込みされた場合、1名につき49,500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55,000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：東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター センター長・教授 博士(工学) 久保 百司 氏

ここ数年、データ科学と計算科学を組み合わせた「ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーション」が、大学などの研究機関のみならず、企業においても大きな注目を浴びています。本講演では、ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎から応用までの講義を中心に行うとともに、ニューラルネットワーク分子動力学法の特徴・長所、さらにはニューラルネットワーク分子動力学法が得意な計算対象や課題、うまく計算できなかった場合の対処方法についても説明をさせて頂き、今後、ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションを行う時に、どのようなことに気をつけて行けば良いのかなど実践的な内容についてお話をさせて頂きます。

聴講者の方には、ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションをいかに実際の企業における材料開発に応用可能であるか、どうすればニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションを企業で有効に活用できるのかの基礎と将来戦略を理解して頂けるものと考えています。

【プログラム】※内容を省略して掲載しております。詳細はHPでご確認ください。

1．計算科学の企業における意義と活用方法
- 1-1. 計算科学シミュレーションの企業における意義
- 1-2. 計算科学シミュレーションの応用例
- 1-3. 計算科学を活用した高速スクリーニング
- 1-4. 計算科学シミュレーションによる特許戦略

2．ニューラルネットワーク分子動力学(NNMD)法の特徴
- 2-1. 従来の分子動力学法との違い
- 2-2. 第一原理分子動力学法との比較
- 2-3. Tight-Binding量子分子動力学法との比較
- 2-4. ReaxFF反応力場分子動力学法との比較
- 2-5. NNMD法の特徴①：第一原理計算に相当する精度で大規模計算が可能
- 2-6. NNMD法の特徴②：パラメータ開発の困難さからの脱却
- 2-7. NNMD法の特徴③：多元素系への応用が可能
- 2-8. NNMD法の特徴④：複雑な化学反応への応用が可能
- 2-9. NNMD法の特徴⑤：ReaxFFでは困難な二次元材料への応用が可能

3．ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎
- 3-1. 分子動力学法の基礎理論
- 3-2. ニューラルネットワークの材料設計への応用例
- 3-3. ニューラルネットワーク分子動力学法の概要
- 3-4. ニューラルネットワークの基礎理論
- 3-5. ニューラルネットワーク分子動力学法の歴史
- 3-6. ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎理論
- 3-7. ニューラルネットワーク分子動力学法の計算手順

4．ニューラルネットワーク分子動力学(NNMD)法の応用例
- 4-1. ニューラルネットワーク分子動力学(NNMD)シミュレータの開発
- 4-2. NNMD法のマルチフィジックス現象への応用
- 4-3. NNMD法の多元素系への応用
- 4-4. NNMD法の複雑な化学反応への応用

5．計算科学シミュレーションの今後の発展

【質疑応答・個別相談】

【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。

『ニューラルネットワーク分子動力学法【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をご覧下さい。
⇒ https://www.rdsc.co.jp/pages/entry

個人情報保護方針の詳細はHPをご覧下さい。
⇒ https://www.rdsc.co.jp/pages/privacy

R&D SUPPORT CENTER
株式会社Ｒ＆Ｄ支援センター
〒135-0016 東京都江東区東陽3-23-24 VORT東陽町ビル7階
TEL）03-5857-4811 FAX）03-5857-4812 URL）https://www.rdsc.co.jp/