

機械学習原子間ポテンシャルの理論体系と応用展開

セミナーURLはこちら→ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/2607119>

1名分料金で
2人目無料

- ◆日時:2026年07月30日(木) 13:00~16:00
- ◆【アーカイブ配信受講:7/31(金)~8/7(金)】を希望される方は、
⇒こちら <https://www.rdsc.co.jp/seminar/2607119A> からお申し込み下さい。
- ◆【WEB限定セミナー】在宅、会社にながらセミナーを受けられます
- ◆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を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:名古屋工業大学 大学院工学研究科 応用物理プログラム 准教授 博士(理学) 小林 亮氏

【受講対象】

・材料研究・開発に携わっていて、機械学習ポテンシャルを使って分子シミュレーションをしている・検討している方。

【必要な予備知識】

・特に予備知識は必要としませんが、Pythonプログラムを使ったデモをお見せする予定ですので、Python言語の知識があると良いです。

【習得できる知識】

・機械学習ポテンシャルを用いた分子シミュレーションの方法を修得できる。
・機械学習ポテンシャルの基礎となる理論・技術の理解が深まる。

【講演の趣旨】

本講習では、材料科学のシミュレーションを一変させている「機械学習ポテンシャル」について、基礎から実際の使い方までを概説します。従来の古典力学的ポテンシャルと第一原理計算の利点を併せ持つ機械学習ポテンシャルの基本概念を整理・分類し、既存の汎用ポテンシャルを用いた効率的な計算手法や、学習プロセスといった実用的な運用方法とノウハウを紹介いたします。さらに、MLPを支える記述子(SOAP、ACE等)やグラフニューラルネットワーク、ガウス過程回帰などの数学的・情報科学的背景を少し詳しく紹介いたします。理論と実践の両面から、高精度な分子動力学シミュレーションを実現するための最新技術を習得することを目指します。

【プログラム】

- はじめに
 - 1-1 原子間ポテンシャルについて
 - 1-2 古典ポテンシャルと機械学習ポテンシャル
 - 1-3 機械学習ポテンシャルの分類
- 機械学習ポテンシャルの使い方
 - 2-1 汎用機械学習ポテンシャルの使い方
 - 2-2 汎用機械学習ポテンシャルの性能と効率
 - 2-3 機械学習ポテンシャルの学習
- 機械学習ポテンシャルの基礎となる理論と技術
 - 3-1 記述子・特徴量
 - 3-2 ニューラル・ネットワーク
 - 3-3 ベイズ推論とガウス過程回帰
 - 3-4 SOAPとACE, グラフ表現
 - 3-5 最近の研究動向と展望

『機械学習原子間ポテンシャル』セミナー申込書 ※ご希望の参加形式にチェックを入れて下さい⇒< LIVE配信 / アーカイブ配信 >

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>