

電池材料のマテリアルズ・インフォマティクス

講師：中山将伸 氏 / 名古屋工業大学 生命・応用化学専攻・教授

無機固体材料データベースを活用して、材料計算をしたデータなどをマテリアルズ・インフォマティクスにより効率的に予測する技術を学びます。今回は、古典力場計算で算出したセラミックス中のリチウムイオン導電性の評価値を題材にして、インフォマティクスの基礎を紹介します。

【講師経歴】

2004年 博士（工学） 東京工業大学
 2004年 東京工業大学 助教
 2009年 名古屋工業大学 准教授
 2016年 名古屋工業大学 教授

開催日時	2020年11月24日(火) 12:30~16:30	※本セミナーは、 当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。推奨環境は当該ツールをご参照ください。後日、視聴用のURLを別途メールにてご連絡いたします。
受講料	48,000円(税込) ※資料付 * メルマガ登録者 38,000円(税込) * アカデミック価格 24,000円(税込)	

- ★【メルマガ会員特典】通常の特典（2名目無料、3名目以降半額）は適用外となりますが、定価の20%引でご参加いただけます。
- ★【セミナー対象者】主に無機材料を対象にしたマテリアルズ・インフォマティクスに興味のある初心者
- ★【セミナーで得られる知識】マテリアルズ・インフォマティクスに必要なデータ収集法、機械学習の原理などに関する知識。

【本ウェビナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- | | |
|--|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 電池材料概要（動画配信） <ol style="list-style-type: none"> 電池正極反応（インターカレーション反応） 電池特性と結晶／電子構造の関係 固体電解質におけるイオン伝導（結晶／電子スケール） 固体電解質におけるイオンの拡散（マクロスケール） 材料シミュレーションとハイスループット計算 <ol style="list-style-type: none"> Materials Projectからのデータ取得 <ul style="list-style-type: none"> 結晶構造データの取得 物性データの取得 古典力場計算 <ul style="list-style-type: none"> 古典力場の特徴（長所と問題点） 分子動力学計算 ハイスループット計算・自動化 <ul style="list-style-type: none"> 全自動網羅計算のためのアルゴリズム マテリアルズ・インフォマティクスの基礎 <ol style="list-style-type: none"> 機械学習の概念 <ul style="list-style-type: none"> 過学習 | <ul style="list-style-type: none"> 内挿と外挿 訓練／検証／テストデータ <ol style="list-style-type: none"> 材料記述子の構築 <ul style="list-style-type: none"> 結晶構造データベース ヒストグラム記述子 線形関数に対する回帰分析 <ul style="list-style-type: none"> 重回帰分析 LASSO回帰、Ridge回帰 主成分分析とPLS回帰 非線形関数に対する回帰分析 <ul style="list-style-type: none"> ニューラルネットワーク回帰 決定木、ランダム森回帰 2値分類問題について ガウス過程 ベイズ最適化による逆探査 <ul style="list-style-type: none"> 例1：材料シミュレーションと連動させたベイズ最適化 例2：実験評価と組成最適化 まとめ |
|--|--|

弊社記入欄				ウェビナー申込書			
セミナー名		電池材料のマテリアルズ・インフォマティクス					
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○↓		会社名（団体名）		TEL :			
		住所 〒		FAX :			
		E-mail :					
会員登録済み	新規登録希望	部署	役職	氏名			
お支払方法		銀行振込・その他		お支払予定		年 月 日頃	
■申込方法：セミナー申込書にご記入の上FAX、E-mail(re@cmcre.com)でお申し込みください。				参加申込 FAX 番号 03-3291-5789			
■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町2-7 TEL03-3293-7053							
■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ http://www.cmcre.com							

電池材料のマテリアルズ・インフォマティクス

講師：中山将伸 氏 / 名古屋工業大学 生命・応用化学専攻・教授

当該セミナーは、ライブ配信のウェビナー（オンラインセミナー）です！

【ライブ配信対応セミナー】

- ・本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。
- ・お申し込み前に、下記リンクから視聴環境をご確認ください。

→ <https://zoom.us/test>

- ・当日はリアルタイムで講師へのご質問も可能です。
- ・タブレットやスマートフォンでも視聴できます。
- ・お手元の PC 等にカメラ、マイク等がなくてもご視聴いただけます。この場合、音声での質問はできませんが、チャット機能、Q&A 機能はご利用いただけます。
- ・ただし、セミナー中の質問形式や講師との個別のやり取りは講師の判断によります。ご了承ください。
- ・「Zoom」についてはこちら↓をご参照ください。

<https://zoom.us/jp-jp/meetings.html>

【お申し込み後の流れ】

- ・開催前日までに、ウェビナー事前登録用のメールをお送りいたします。お手数ですがお名前とメールアドレスのご登録をお願いいたします。
- ・事前登録完了後、ウェビナー参加用 URL をお送りいたします。
- ・セミナー開催日時に、参加用 URL よりログインいただき、ご視聴ください。
- ・講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみのご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固く禁じます。
- ・資料を冊子で配布する場合は、事前にご登録のご住所に発送いたします。開催日時に間に合わない場合には、後日お送りするなどの方法で対応いたします。

【注意事項】

- ・本セミナーの受講にあたっての推奨環境は「Zoom」に依存します。受講者の方のお手元の PC などの設定や通信環境が受信の状況に大きく影響いたしますので、ご自分の環境が対応しているか、お申し込み前の確認をお勧めいたします。

<https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC->

[MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6](#)

- ・Zoom クライアントは最新版にアップデートして使用してください。
 - ・インターネット経由でのライブ中継ですので、回線状態などにより、画像や音声が乱れる場合があります。また、状況によっては、講義を中断し、再接続して再開する場合がありますが、予めご了承ください。
 - ・万が一、当社や講師側（開催側）のインターネット回線状況や設備機材の不具合により、開催を中止した場合には、受講料の返金や、状況により後日録画を提供すること等で対応させていただきます。
 - ・本セミナーはお申し込みいただいた方のみ受講いただけます。
- 複数端末から同時に視聴することや複数人での視聴は禁止いたします。
- ・受講中の録音・撮影等は固く禁じます。
 - ・Zoom のグループにパスワードを設定しています。お申込者以外の参加を防ぐため、パスワードを外部に漏洩しないでください。
 - ・万が一外部者が侵入した場合は管理者側で部外者の退出あるいはセミナーを終了いたします。