

# 第一原理計算 入門～原理の把握と実践的な知識・ノウハウの習得～

**講師: 下司雅章氏 (大阪大学 エマージングサイエンスデザイン R<sup>3</sup> センター 特任准教授)**

第一原理計算は、量子力学に基づいた原子、分子レベルの挙動を高い精度で再現できるツールとして、近年導入を検討される企業が増えてきている。2000年以降それらのソフトウェアのパッケージ化が進み、有償無償の多くのものが入手可能になっているが、その違いが分からないまま使われている事例を見かける。ユーザーフレンドリな GUI も開発が進み、マウスだけの操作でもかなりのことが出来るようになってきてものもあるが、それゆえに中身を詳しく知らなくても結果が出てくるため、かえってその結果の正しさを判断する力がないと間違った結果を信じてしまう可能性もある。正しく使用するために、実際に使うための準備や手順、それを正しく使うための知識などについて、実際にやる内容を中心に説明する。導入を決めた場合にでも、実行するための計算機が必要で、その管理運営にはどのようなことがあるのかも紹介する。また、京コンピュータが大きく注目されたが、これを使えば何でもできるという過剰な期待を持つ人も多い。計算科学、その中での第一原理計算の位置づけを理解し、何が出来るのか、何ができないのか、どう利用するのが良いのかといったことについて紹介する。

**【活動】** 第一原理計算を用いての物性研究、特に高圧物性、スピントロニクス、最近では結晶構造探索法の開発も研究を進めている。第一原理計算関連の人材育成（計算機マテリアルズデザイン (CMD<sup>®</sup>) ワークショップの事務局 (<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/index.html>) ) および High Performance Computing 関連の人材育成（計算科学技術特論 A/B ([https://www.rccs.riken.jp/library/event/tokuronB\\_2020.html](https://www.rccs.riken.jp/library/event/tokuronB_2020.html)) ) も行っている。日本物理学会、日本高圧力学会に所属。関連書籍 「計算科学のための HPC 技術 1 & 2」 <http://www.osaka-up.or.jp/books/ISBN978-4-87259-586-4.html>、<http://www.osaka-up.or.jp/books/ISBN978-4-87259-587-1.html>、The Art of High Performance Computing for Computational Science, Vol. 1 <https://www.springer.com/gp/book/9789811361937>、The Art of High Performance Computing for Computational Science, Vol. 2

開催日時	2022年10月28日(金) 10:30~16:30	※本セミナーは、 <b>当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナー</b> 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。 <b>詳細は裏面をご覧ください。</b>
受講料	55,000円(税込) ※資料付 *メルマガ登録者 49,500円(税込) *アカデミック価格 26,400円(税込)	

\*アカデミック価格:学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込かつ申込者全員がメルマガ会員登録していただいた場合、1名あたりの参加費がメルマガ会員価格の半額となります★【対象者】・第一原理計算とはどういうものかを知りたい方・第一原理計算で出来ることは何かを知りたい方・第一原理計算あるいは物質科学系の科学技術計算ソフトウェアの導入を検討している方・スパコンやPCクラスタなどの高性能計算機を利用あるいは導入を考えている方★

【得られる知識】・第一原理計算の概要とそれを学ぶための情報・いくつもある第一原理計算ソフトウェアの特徴の違い・その他の物質科学系の科学技術計算ソフトウェアに関する概要・計算科学を導入する場合に考えるべき事項・科学技術計算ソフトウェアを利用するための計算機の導入や利用についての情報

## 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

### 1.物質科学・材料科学におけるシミュレーション

1.1 物質科学・材料科学におけるシミュレーションの種類 1.2 第一原理計算の概要 1.3 いくつかの応用事例 1.4 シミュレーションは日本が生き残るための必須事項～ICTスキルの向上、人間は同じことを繰り返すと間違える！～

### 2.密度汎関数理論に基づいた第一原理計算

2.1 簡単な理論的背景 2.2 計算手法の種類と特徴～一つの方法で全てのこと出来るのではない！～2.3 実際の第一原理計算ソフトウェアとはどういうものか～ソースコードから入手方法まで～2.4 具体的計算の手順～入力ファイルから出力ファイルの中身について 2.5 第一原理計算実施の注意点～“ちゃんと”計算しないと意味がない！～

3.第一原理計算を実施する環境整備～ソフトウェア、PCクラスタからスパコンまで～

3.1 どんな計算機を用意すべきか～スパコンを使えば何でも出来るのではない！～3.2 現在の計算機の動向～スパコンランキングの正しい見方～3.3 外部計算機の利用の仕方 3.4 第一原理計算ソフトウェアのインストール 3.5 実際に導入する場合のアドバイス

### 4.第一原理計算を社内に導入すべきか？

4.1 第一原理計算は社内の研究に必要なか？4.2 どんなソフトウェアを選ぶべきか？～有名ソフトが必ずしも良いのではない！～4.3 誰がやるのか？どうやって学ばよいか？4.4 アカデミアと共同研究をする時のポイント 4.5 実りある成果を得るために。～餅屋は餅屋に任せつつ、修行もする！？～

時間によって第一原理計算の簡単な実演

弊社記入欄		<b>ウェビナー申込書</b>		
セミナー名		第一原理計算 入門～原理の把握と実践的な知識・ノウハウの習得～		
所定の事項にご記入下さい <b>メルマガ会員、登録希望の場合は○↓</b>		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 2022年 月 日頃

- 申込方法: セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail (re@cmcre.com) でお申し込みください。
- 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いません。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。
- 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>

**参加申込 FAX 番号**  
**03-3291-5789**

2022年10月28日（金）開催

# 第一原理計算 入門

～原理の把握と実践的な知識・ノウハウの習得～

**講師：下司 雅章氏**

大阪大学 エマージングサイエンスデザイン R<sup>3</sup> センター 特任准教授

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 URL より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](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。