

マテリアルズインフォマティクスの中核をなす 計算科学シミュレーション技術

講師：久保百司氏（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）

近年のマテリアルズインフォマティクスの発展は目覚しく、多くの企業で、マテリアルズインフォマティクスを今後、十分に活用できるかどうか、将来の企業における材料開発の成否を分ける重要な鍵となるとの認識が広がりつつあります。一方で、マテリアルズインフォマティクスにおいては、計算科学シミュレーションが重要な役割を担っており、マテリアルズインフォマティクスと計算科学シミュレーションの連携が不可欠であることも、多くの企業において広く認識されています。そこで本講演では、マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションの基礎から応用までの講義を中心に行うとともに、計算科学シミュレーションを活用した様々な材料設計の成功例を紹介します。また、聴講者の方には、計算科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、どうすれば計算科学シミュレーションを有効に活用できるのかの基礎を理解して頂けるものと考えています。

【経歴】平成2年3月 京都大学工学部石油化学科卒業、平成4年3月 京都大学大学院工学研究科石油化学専攻修士課程修了、平成4年7月 東北大学工学部分子化学工学科助手、平成13年4月 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻助教授、平成15年10月 科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業さきがけ研究員を兼任、平成18年4月 科学技術分野の文部科学大臣表彰（若手科学者賞）、平成20年1月 東北大学大学院工学研究科教授、平成27年3月 東北大学金属材料研究所教授、平成29年4月 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 【活動内容】平成25年3月 日本化学会 学術賞 受賞、平成27年5月 日本コンピュータ化学会 学会賞 受賞、平成28年度～平成31年度文部科学省ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」課題責任者、令和2年度～令和4年度 文部科学省 科学技術人材育成費補助事業「計算物質科学人材育成コンソーシアム」コンソーシアム長、令和3年度 計算物質科学協議会 代表、令和5年度～令和7年度 文部科学省 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム DDCoMS 課題責任者

開催日時	2024年9月27日（金）10：30～16：30	※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。詳細は裏面をご覧ください。 ★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。
受講料	58,300円（税込） ※資料作成費込、資料は冊子のみで配布 *メルマガ登録者 52,800円（税込） *アカデミック価格 29,700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、学生に限りです。
※配布資料は「冊子」のみでの配布となります。当日までに間に合わない場合には、後日冊子を郵送いたしますので、ご了承ください。★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込かつ申込者全員メルマガ会員登録をいただいた場合、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】企業において、実験による試行錯誤的な研究開発ではなく、電子・原子レベルの計算科学シミュレーションとマテリアルズインフォマティクスを活用することで、効率的かつ高速な材料設計を実現したいと考えておられる方。特に、マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションに興味があり、実際に企業においてどのように計算科学シミュレーションを活用することができるのかの知識を得たいと思っておられる方。
★【得られる知識】マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーションを、企業における製品開発にどのように応用することができるのか、これまでのような成功例があるのかの知見を得ることができます。将来的に、計算科学シミュレーションを、いかに企業における製品開発に役立たせることができるのかの道筋を理解することができます。さらに、計算科学シミュレーションとマテリアルズインフォマティクスをどのように連携させていくべきかも理解することができます。

【本ウェビナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

1. マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学の企業における意義と活用方法

1.1 企業における計算科学シミュレーションの意義と活用 1.2 マテリアルズインフォマティクスと計算科学シミュレーションの連携 1.3 マテリアルズインフォマティクスを活用した計算科学による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 1.5 計算科学シミュレーションを活用した産学連携

2. 計算科学シミュレーションの基礎

2.1 ニューラルネットワークの基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.2 分子力学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.3 分子動力学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.4 モンテカルロ法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.5 量子化学の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界 2.6 量子分子動力学法の基礎・特徴・応用可能分野・適用限界

3. 計算科学シミュレーションによる実践的材料設計

3.1 トライボロジーへの応用 3.2 化学機械研磨プロセスへの応用 3.3 材料合成プロセスへの応用 3.4 精密加工プロセスへの応用 3.5 エレクトロニクス・半導体への応用 3.6 リチウムイオン2次電池への応用 3.7 燃料電池への応用 3.8 太陽電池への応用 3.9 鉄鋼材料の応力腐食割れへの応用 3.10 摩耗・劣化現象への応用 3.11 高分子材料への応用

4. 計算科学シミュレーションの今後の発展

4.1 マルチフィジックス計算科学 4.2 マルチスケール計算科学 4.3 スーパーコンピュータを活用した超大規模シミュレーション

5. 質疑応答・個別相談

弊社記入欄		ウェビナー申込書			
セミナー名		マテリアルズインフォマティクスの中核をなす計算科学シミュレーション技術			
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 または E-mail (order_7053@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おりません、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 TEL 03-3293-7053
■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧になれます。⇒ <https://cmcre.com/>

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

マテリアルズインフォマティクスの中核をなす 計算科学シミュレーション技術

講師：久保 百司 氏

(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)

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。
- **本セミナーは、紙資料の冊子を配布いたします。資料の PDF での配布はございません。**
- 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-](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)

[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、画像や音声が悪くなる場合があります。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外部者の退出あるいはセミナーを終了いたします。