

# ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎と応用：AI活用型材料設計

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）

ここ数年、AI技術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。特に、①第一原理計算と同等の計算精度で大規模計算が可能、②パラメータ開発の困難さからの脱却が可能、③8元素種を越えるような多元素系への適用が可能、④複雑な化学反応への対応が可能、⑤二次元材料への応用が可能、などニューラルネットワーク分子動力学法はこれまでの分子動力学法に比較して多くの長所を有することから、その産業応用が加速度的に広がっています。しかし、その進捗が非常に速すぎるために、ニューラルネットワーク分子動力学法を基礎から学ぶ機会が十分に提供されていない現状があります。そこで本セミナーでは、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法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。なお、各聴講者の方からの質問についても、可能な範囲で回答します。

【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、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、令和7年度 計算物質科学協会 代表

開催日時	2026年5月20日（水）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。★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。
受講料	57,200円（税込）※資料作成費込（資料は冊子で配布） *メルマガ登録者 51,700円（税込） *アカデミック価格 28,600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。  
\*配布資料は「冊子」のみとなります。事前に送付いたしますが、当日までに間に合わない場合には、開催後の送付となりますことをご承知ください。  
★【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】：最近大きな注目が集まっている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これから活用してみたいと思っている方・ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションに対して興味があり、従来の分子動力学シミュレーションと比較してどのような特徴・長所があるかを勉強したい方・現在、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活用しているが、うまく計算できなかった時に対応できないので、その基礎を最初から勉強してみたいとお考えの方・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得意な計算対象や課題は何か、さらには不得意な計算対象や課題は何かについて勉強したい方・企業において、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どのように活用していけば良いかの方向性と将来戦略について知見を得たい方 などを特に対象としていますが、ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションに少しでも興味がある方は、是非。  
★【得られる知識】：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活用したこれまでの成功例・従来の分子動力学シミュレーションと比較して、ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションの特徴・長所・ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションの基礎・方法論・計算手順  
ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションでうまく計算できなかった場合の対処方法・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得意な計算対象や課題に加えて、不得意な計算対象や課題・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、企業においてどのように活用していけば良いかの方向性と将来戦略

## 【本ウェビナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>[1] 計算科学の企業における意義と活用方法</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 計算科学シミュレーションの企業における意義</li> <li>2. 計算科学シミュレーションの応用例</li> <li>3. 計算科学を活用した高速スクリーニング</li> <li>4. 計算科学シミュレーションによる特許戦略</li> <li>5. 計算科学シミュレーションを活用した産学連携</li> </ol> <p>[2] ニューラルネットワーク分子動力学 (NNMD) 法の特徴</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 従来の分子動力学法との違い</li> <li>2. 第一原理分子動力学法との比較</li> <li>3. Tight-Binding 量子分子動力学法との比較</li> <li>4. ReaxFF 反応力場分子動力学法との比較</li> <li>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</li> <li>6. NNMD 法の特徴②：パラメータ開発の困難さからの脱却</li> <li>7. NNMD 法の特徴③：多元素系への応用が可能</li> <li>8. NNMD 法の特徴④：複雑な化学反応への応用が可能</li> <li>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</li> </ol> <p>[3] ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎</p> | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 分子動力学法の基礎理論</li> <li>2. ニューラルネットワークの材料設計への応用例</li> <li>3. ニューラルネットワーク分子動力学法の概要</li> <li>4. ニューラルネットワークの基礎理論</li> <li>5. ニューラルネットワーク分子動力学法の歴史</li> <li>6. ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎理論</li> <li>7. ニューラルネットワーク分子動力学法の計算手順</li> </ol> <p>[4] ニューラルネットワーク分子動力学 (NNMD) 法の応用例</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>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</li> <li>2. NNMD 法のマルチフィジックス現象への応用</li> <li>3. NNMD 法の多元素系への応用</li> <li>4. NNMD 法の複雑な化学反応への応用</li> </ol> <p>[5] 計算科学シミュレーションの今後の発展</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. マルチフィジックス計算科学</li> <li>2. マルチスケール計算科学</li> <li>3. スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム</li> </ol> <p>[6] 質疑応答・個別相談</p> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

弊社記入欄	<b>セミナー申込書</b>		
セミナー名	ニューラルネットワーク分子動力学法の基礎と応用：AI活用型材料設計		
所定の事項にご記入下さい	会社名（団体名）	TEL :	
メルマガ会員、登録希望の場合は○↓	住所 〒	FAX :	
会員登録済み	新規登録希望	E-mail :	
部署	役職	氏名	
お支払方法	銀行振込（請求書払い）・その他	お支払予定	2026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**

# ニューラルネットワーク分子動力学法の 基礎と応用：AI活用型材料設計

**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。
- **本セミナーの資料は、冊子のみの配布となります。PDF での配布はございません。**  
事前にご登録のご住所に送付いたしますが、開催日時に間に合わない場合には、開催後の送付となりますことをご了承ください。

## 【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、画像や音声がかかる場合があります。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。