

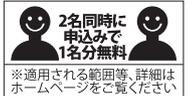
シミュレーションや機械学習などに馴染みのない実験研究者に必要な  
MI研究、及び、シミュレーション研究を始めるための計算環境やプログラミング環境についても解説



# 【Live配信(リアルタイム配信)】 第一原理計算とベイズ統計を融合した マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と実践

～材料開発の加速&全く新しい高機能材料の開発を実現に向けて～

- 第一原理計算手法の枠組みと計算実務の基礎知識
- MI、特に物性予測モデルとしての機械学習と入力としての記述子
- 物質スクリーニング/ベイズ構造探索法の枠組みと研究実務の基本知識



日時	2021年2月19日(金) 10:30～16:30	会場	Live配信セミナー ※会社・自宅にしながら学習可能です※
受講料	49,500円 ⇒テレワーク応援キャンペーン 【Live配信/WEBセミナー受講限定】 1名申込みの場合:受講料 定価:35,200円/S&T会員 33,440円 ※ 同一企業から複数名S&T会員で受講される場合は本割引ではなく、「2名同時申込みで1名分無料」割引を適用させて頂きます。	資料付	

講師 北陸先端科学技術大学院大学 情報社会基盤研究センター 准教授 博士(工学) 本郷 研太 氏

**趣旨** 近年、物質・材料科学分野において、第4の科学として知られるデータ科学との融合展開であるマテリアルズ・インフォマティクス(MI)研究が進展している。MI研究は、機械学習やベイズ統計などのインフォマティクス技術を応用することで、材料開発を加速させるとともに、全く新しい高機能材料の開発を目指している。  
本セミナーでは、MI研究分野の動向を示し、そこで利用されている要素技術である機械学習やベイズ統計についての基礎的内容を概説する。さらに、データ駆動型研究に必要となるデータ生成技術として、第3の科学として知られる計算科学の必要性を解説し、その基本事項について概説する。特に、第一原理計算とMI研究の融合としての「第一原理MI」を中心に応用例を紹介する。また、シミュレーションや機械学習などに馴染みのない実験研究者に向けて、実際に、MI研究、及び、シミュレーション研究を始めるための計算環境やプログラミング環境について解説する。

<b>プログラム</b>	1. マテリアルズ・インフォマティクス(MI)概観	<ul style="list-style-type: none"> <li>・インフォマティクス/AI分野の発展</li> <li>・研究分野の動向/研究拠点</li> <li>・インフォマティクスの成功事例/触媒探索/マテリアル・レポジショニング</li> <li>・コンピュータによる物質探索/ベイズ統計</li> <li>・MI研究分野の研究事例/ハイスループットヴァーチャルスクリーニング、ベイズ探索</li> <li>・インフォマティクスだけで十分か?/データの問題:量と質</li> <li>・データ生成エンジンとしてのシミュレーション</li> </ul>
	2. MI研究の基礎	<ul style="list-style-type: none"> <li>・スパコン:シミュレーション研究のための必須アイテム</li> <li>・物質科学シミュレーションの階層性/連続体系・分子系・電子系</li> <li>・第一原理計算とは何か?</li> <li>・第一原理計算研究の研究事例/電子物性、フォノン(熱)物性</li> </ul>
	3. 第一原理計算の基礎	<ul style="list-style-type: none"> <li>□質疑応答□</li> </ul>

本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信となります。予め「Zoom」のインストールが可能か、接続可能か等をご確認ください。セミナー資料は電子ファイルでの配布、郵送のいずれかになります。詳細はホームページをご確認下さい。

■ 2名同時申込みで1名分無料 ■  
(1名あたり定価半額の24,750円)

※2名様ともS&T会員登録をしていただいた場合に限りです。 ※他の割引は併用できません。  
※同一法人内(グループ会社でも可)による2名同時申込みのみ適用いたします。  
※3名様以上のお申込みの場合、左記1名あたりの金額で受講できます。  
※受講券、請求書は、代表者にご郵送いたします。  
※請求書および領収書は1名様ごとに発行可能です。(通信欄に「請求書1名ごと発行」と記入ください。)

※講師、プログラムの内容が変更になる場合もございます。最新の情報はHPにてご確認ください。※申込用紙が複数枚必要な場合等は、本用紙をコピーしてお使いください。

セミナー申込用紙 B210289 (マテリアルズ・インフォマティクス)

会社名 団体名			
部署			
役職	〒		
ふりがな	住所		
氏名			
TEL	FAX		
E-mail	※申込みに関する連絡に使用するため、可能な限りご記入ください。		

※太枠の中をご記入下さい。 ※□にチェックをご記入ください。  
※E-mailアドレスまたはFAX番号を必ずご記入下さい。

<b>今後のご案内</b>	
<input type="checkbox"/> E-mail希望・登録済み <input type="checkbox"/> 郵送希望・登録済み <input type="checkbox"/> 希望しない	S&T会員価格を 適用いたします。 (E-mailアドレス必須)
<b>お支払方法</b>	
<input type="checkbox"/> 銀行振込 (振込予定日 月 日)	
<b>通信欄</b>	
※ご記入ください。	

●受講料について  
「2名同時申込みで1名分無料」については上記の注意事項をお読みください。  
●お申込みについて  
申込用紙に必要事項をご記入のうえ、FAXでお申込みください。  
また、当社ホームページからでもお申込みいただけます。  
お申込みを確認次第、請求書・受講券・会場案内図をお送りします。  
●お支払いについて  
受講料は、銀行振込(原則として開催日まで)、もしくは当日現金にてお支払いください。  
銀行振込の場合、原則として領収書の発行はいたしません。  
振込手数料はお客様がご負担ください。

●個人情報の取り扱いについて  
ご記入いただいた個人情報は、事務連絡・発送の他、情報案内等に使用いたします。  
詳しくはホームページをご覧ください。  
●キャンセル規定  
開催日から逆算(営業日:土日・祝祭日等を除く)いたしまして、  
・開催7日前以前のキャンセル: キャンセル料はいただきません。  
・開催3～6日前でのキャンセル: 受講料の70%  
・開催当日～2日前でのキャンセル・欠席: 受講料の100%  
※ご注意※ 参加者が最少催行人数に達しない場合など、事情により中止になる場合がございます。

**S&T サイエンス & テクノロジー**  
研究・技術・事業開発のためのセミナー/書籍  
サイエンス&テクノロジー株式会社  
TEL 03-5733-4188 FAX 03-5733-4187  
〒105-0013  
東京都港区浜松町1-2-12 浜松町F-1ビル7F  
http://www.science-t.com