

# 材料開発のためのデータ解析入門

～マテリアルズインフォマティクス、ケモインフォマティクス、プロセスインフォマティクス～

**講師：金子 弘昌 氏**

**明治大学 理工学部 応用化学科 専任講師**

近年、化学の分野や産業全般においてデータが蓄積されつつあり、そのデータを解析する動きが活発になっている。例えば高機能性材料を開発する際、化合物データを用いて化学構造と物性・活性・特性との間の関係をモデル化することで、化合物を合成したり合成後に物性値を測定したりする前に、化学構造から物性値を推定でき、逆に良好な物性値をもつ化学構造の設計もできる。さらに、製造条件とその製造の結果としての製品品質との間の関係をデータからモデル化することで、望ましい品質を達成するための製造条件を探索できる。高機能性材料を製造する際、センサー等で容易に測定可能なプロセス変数と測定が困難な製品品質との関係をデータからモデル化することで、製品品質の値をリアルタイムに推定し、迅速かつ安定に制御・管理ができる。このように、高機能性材料などの開発データ、化学・産業プラントにおける運転データなど、蓄積されたデータは非常に有用であるが、十分に活用しきれていない。本セミナーでは、化学・産業データの使い方・解析の仕方を基礎から解説する。情報科学・データサイエンスに基づき、データから種々の材料の機能を予測するモデルを構築したり、構築したモデルを活用することで新たな構造・実験条件・材料・装置を設計したりする方法を説明する。さらに、ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス分野を中心に豊富な応用事例も紹介する。

**【講師経歴】** 2011年9月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 博士課程 修了 2009年4月～2011年9月 日本学術振興会特別研究員DC1 2011年10月～2011年12月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 特任助教 2012年1月～2017年3月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 助教 2017年4月～現在 明治大学理工学部応用化学科 専任講師 2018年12月～現在 国立研究開発法人理化学研究所 客員主幹研究員(兼任) 2019年4月～現在 大阪大学太陽エネルギー化学研究センター 招聘准教授(兼任) 2019年4月～現在 広島大学大学院工学研究科 次世代自動車技術共同研究講座 客員准教授(兼任)

開催日時	2019年6月27日(木) 10:30～17:30	【会場】	中央大学駿河台記念館 4階 410教室 〒101-8324 東京都千代田区神田駿河台 3-11-5
受講料	49,000円(税込) ※資料付・昼食付 *メルマガ登録者 44,000円(税込) *アカデミック価格 25,000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。  
 \*【メルマガ会員特典】2名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をさせていただいた場合、2名目は無料、3名目以降は半額です。  
 \*【セミナー対象者】・化学・産業界において、インフォマティクスを活用して材料開発(および化学品開発)に従事している研究者・技術者・材料開発(および化学品開発)にインフォマティクスを今後活用しようと考えている研究者・技術者  
 \*【得られる知識】・ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス・データ解析・機械学習・分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理の基礎知識 ・ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス分野の最新の研究事例 ・データ解析の一般的なすすめ方・活用の仕方 ・データ解析の応用事例 ・最新のデータ解析手法・モデリング手法 ・モデルの予測精度向上の方法 ・モデルの逆解析の方法

## 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

1. ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクスの基礎知識	2.6. 回帰分析
1.1. 機械学習・人工知能	2.6.1. 最小二乗法による重回帰分析 (Multiple Linear Regression (MLR) or Ordinary Least Squares (OLS))
1.2. 定量的構造物性相関・定量的構造活性相関	2.6.2. 部分的最小二乗法 (Partial Least Squares, PLS)
1.3. 化学構造生成 1.4. 分子設計 1.5. 材料設計	2.6.3. 決定木 (Decision Tree, DT)
1.6. プロセス設計 1.7. プロセス管理	2.6.4. ランダムフォレスト (Random Forest, RF)
1.8. ケモインフォマティクス	2.6.5. サポートベクター回帰 (Support Vector Regression, SVR)
1.9. マテリアルズインフォマティクス	2.7. モデルの予測性能の向上
1.10. プロセスインフォマティクス	2.7.1. アンサンブル学習 2.7.2. 半教師あり学習 (半教師付き学習)
2. 化学・産業データ解析の進め方・活用方法	2.8. モデルの適用範囲
2.1. データの形式、記述子	2.8.1. データ範囲 2.8.2. データ中心からの距離
2.2. データの前処理	2.8.3. データ密度 2.8.4. アンサンブル学習
2.2.1. 標準化 2.2.2. 変数選択 2.2.3. スムージング (平滑化)	2.9. モデルの逆解析
2.3. データの可視化・低次元化	2.9.1. グリッドサーチ 2.9.2. サンプリング 2.9.3. ベイズの定理
2.3.1. 主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA)	2.10. 実行するためのプログラム紹介
2.3.2. Generative Topographic Mapping (GTM)	3. 分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理に関する最新の研究事例
2.3.3. 多様体学習 2.3.4. 可視化の性能を検討するための指標	3.1. 化学空間の可視化に基づく分子設計
2.4. クラスタリング	3.2. 定量的構造物性 (活性) 相関モデルの逆解析に基づく分子設計
2.4.1. 階層的クラスタリング 2.4.2. k平均法 (k-means)	3.3. 定量的構造物性 (活性) 相関モデルの適用範囲を考慮した分子設計
2.4.3. 混合ガウスモデル (Gaussian Mixture Model, GMM)	3.4. 実験計画法による材料設計?目標達成確率に基づく適応的実験計画法?
2.5. クラス分類	3.5. シミュレーションとインフォマティクス技術を活用したプロセス設計
2.5.1. 線形判別分析 (Linear Discriminant Analysis, LDA)	4. まとめ・質疑応答
2.5.2. 決定木 (Decision Tree, TD)	
2.5.3. ランダムフォレスト (Random Forest, RF)	
2.5.4. サポートベクターマシン (Support Vector Machine, SVM)	

弊社記入欄		<b>セミナー申込書</b>	
セミナー名		材料開発のためのデータ解析入門	
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・その他	お支払予定	2019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。⇒ <http://www.cmcre.com>

**参加申込 FAX 番号**  
**03-3291-5789**