

スパースモデリングの基礎と新規材料・物質の探索、計測データの高度化への応用

講師：五十嵐 康彦 氏

東京大学大学院 新領域創成科学研究科 助教

近年、人工知能(AI)が新聞やメディアなどで多く報道され、その応用先は爆発的に広がりを見せている。特にこのAI技術を日本の基盤産業である素材産業においても適用するマテリアルズインフォマティクスは、研究機関だけでなく、民間企業においても注目を集めており、材料開発にAI革命が訪れようとしている[2019年2月17日、日経新聞日曜版]。

本講演では、マテリアルズインフォマティクスの有効なアプローチの一つであるスパースモデリングの基礎について講義する。スパースモデリングは、大量の高次元データから恣意性なしにそのデータの背後にある仮説(モデル)を系統的に導くデータ解析を可能にし、2000年代より爆発的に応用が進んでいる統計学/機械学習の枠組みである。本講演では、マテリアルズインフォマティクスにおけるスパースモデリングの応用事例を紹介し、先の日経新聞等でも報道されたナノシートの高効率収集やリチウムイオン電池の開発への応用などを事例に述べる。また、スパースモデリングを用いることで、ブラックホールの直接撮像などの画像処理技術への応用が進んでいる。本講演では、この基礎技術を用いることで、物質科学への計測データに対するインフォマティクスの応用(計測インフォマティクス)と、新たなマテリアルズインフォマティクスへの展開を紹介する。

【講師経歴】平成21年 東京大学工学部計数工学科 卒業 平成26年 東京大学大学院新領域創成科学研究科博士後期課程 修了
平成26年 東京大学大学院新領域創成科学研究科 特任研究員 平成29年 物質材料研究機構 NIMS ポスドク研究員 平成29年 科学技術振興機構 さきがけ専任研究員 平成31年 現職
科学技術振興機構 さきがけ(兼任)、物材研究機構 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 NIMS 外来研究員(兼任)
成城大学 非常勤講師(兼任)

開催日時	2020年1月16日(木) 10:30~16:30	【会場】	ちよだプラットフォームスクウェア 会議室 〒101-0054 東京都千代田区神田錦町 3-21
受講料	47,000円 + 税 ※資料・昼食付 * メルマガ登録者 42,000円 + 税 * アカデミック価格 24,000円 + 税		

*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名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2名目は無料、3名目以降は半額です。
★【セミナー対象者】マテリアルズインフォマティクス、ケモンインフォマティクスなど、インフォマティクスに興味のある研究開発企画、技術企画、新事業企画などの担当者(化学や材料系で研究系・技術系)・放射光データや画像データなど、計測技術へのインフォマティクス応用に興味のある研究者・技術者 ★【得られる知識】スパースモデリングの基礎、機械学習の基礎:分類と回帰、スパースモデリングの新規材料・物質の探索、開発への応用方法、スパースモデリングによる画像処理、ブラックホールの直接撮像から物質・材料を対象にした計測インフォマティクスまで。

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

1 スパースモデリングの基礎

- 1.1 データ駆動科学とスパースモデリング
 - ・マテリアルズインフォマティクスとは?
 - ・マテリアルズインフォマティクスとデータ駆動科学
 - ・データ洪水がもたらす科学の質的变化
 - ・スパース化による仮説・検証ループ
- 1.2 機械学習の基礎:分類と回帰
 - ・機械学習入門—分類を例として—
 - ・汎化性能と交差検定法による評価
- 1.3 スパースモデリングの基礎
 - ・スパースモデリング=変数選択
 - ・データのスパース化の難しさ
 - ・全状態探索法によるスパースモデリング
 - ・スパースモデリング(変数選択)に関する二つの戦略
- 2 スパースモデリングによるマテリアルズインフォマティクス
 - 2.1 マテリアルズインフォマティクスとスパースモデリング
 - ・スパースモデリングによる機能を予測する記述子抽出

- ・線形回帰におけるスパースモデリングの定式化
- ・線形回帰における全状態探索(ES-LiR)法
- 2.2 リチウムイオン電池の電解液材料探索への応用
 - ・マテリアルズインフォマティクスによる蓄電池研究の現状
 - ・計算科学による電解液探索へのアプローチ
 - ・記述子をコントロールした機能予測
- 2.3 高収率なナノシート合成開発への応用
 - ・高収率ではなく離を実現する指針の確立
 - ・未知な系で最少実験数による高収率合成の実証
- 3 計測インフォマティクスによる新規材料・物質の探索への新たな展開
 - 3.1 スパースモデリングによる画像処理
 - ・フーリエ計測とスパースモデリング
 - ・ブラックホールの直接撮像への応用
 - 3.2 放射光データ解析におけるスパースモデリングの応用
 - 3.3 計測インフォマティクスによるマテリアルズインフォマティクスの今後の展開について

弊社記入欄		セミナー申込書			
セミナー名		スパースモデリングの基礎と新規材料・物質の探索、計測データの高度化への応用			
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 :	
お支払方法		部署		役職	
		氏名		氏名	
		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(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