

# マテリアルズインフォマティクス概論

## 講師：吉田 亮氏

情報・システム研究機構 統計数理研究所 データ科学研究系 教授  
同研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長博士（学術）

本セミナーでは、機械学習の入門的コンテンツ、材料研究におけるデータ科学の活用事例、解析ツール等の紹介を行いながら、マテリアルズインフォマティクスの全体像を示す。物質構造記述子、構造物性相関解析、材料設計、実験計画法、転移学習によるスモールデータ解析、ディープラーニング等の話題を中心に講義を行う。

【活動】統計数理研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長  
JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型 物質・材料開発イニシアティブ」物質・材料記述基盤グループ

開催日時	2021年4月15日（木）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。
受講料	50,000円 + 税 ※資料付 *メルマガ登録者 45,000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名以上同時申込かつ申込者全員がメルマガ会員登録していただいた場合、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。★【セミナー対象者】製薬・化学・素材企業等の実務担当者等

★【得られる知識】マテリアルズインフォマティクスのデータ科学の基本知識、最新の研究事例・ツール等、参考文献

### 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

#### 1. 機械学習に基づく物性予測

- 1.1 教師あり学習の基礎
- 1.2 転移学習によるスモールデータからの予測
- 1.3 適用例
  - 1.3.1 高分子物性の予測
  - 1.3.2 合成反応の予測
  - 1.3.3 プロセスから材料組織の予測
  - 1.3.4 無機化合物の物性と構造の予測

- 2.2.2 合成経路の設計
- 2.2.3 結晶構造予測
- 2.2.4 深層生成モデルによるプロセス制御

#### 3. 物質・材料の数値表現（記述子）

- 3.1 分子記述子
- 3.2 組成記述子
- 3.3 結晶構造記述子

#### 2. 材料探索のための機械学習技術

- 2.1 機械学習による仮想ライブラリの作製
- 2.2 機械学習による材料の生成と予測
  - 2.2.1 分子設計

#### 4. 適応的実験計画法（ベイズ最適化）

#### 5. 適用事例の紹介（論文）

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概論	
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 2021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**

2021年4月15日（木）開催

# マテリアルズインフォマティクス概論

## 講師：吉田 亮氏

情報・システム研究機構 統計数理研究所 データ科学研究系 教授  
同研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長博士（学術）

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。
- 講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみのご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固く禁じます。
- 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->

[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。