

マテリアルズ・インフォマティクスにおける機械学習技術の活用： 多様な探索問題のためのベイズ最適化法

講師：烏山 昌幸氏（名古屋工業大学 情報工学科 准教授）

データの取得技術が多様化するなかで、得られた結果からどのように次の意思決定をすべきかは多くの材料研究・開発の中で問題となります。近年ではこのプロセスを「機械学習」で自動化するマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が様々な文脈で注目されています。新規材料の探索は何らかの性能指標を最適化する問題として捉えることができますが、多くの場合にこの指標の値は費用や時間のかかる実験やシミュレーションを通してしか得られないため、最適化は非常に難しいものになります。このような問題に対して「ベイズ最適化」と呼ばれる機械学習手法がMIでは頻りに用いられます。本講座では、背景となる機械学習の基本的な考え方から始め、実践上現れる多様な探索問題に対してベイズ最適化とその発展系によってどのように探索の自動化が実現できるかをお話しします。特段、前提知識は仮定せずにお話をしますので、機械学習による材料解析や、AI関連技術の導入可能性を模索されている技術者、研究者の方に有益な情報が提供できればと思います。

【講師経歴】2011年03月名古屋工業大学大学院工学研究科博士課程修了、2010年03月-2011年03月日本学術振興会特別研究員DC2
2011年04月-2011年12月日本学術振興会特別研究員PD/東京工業大学特別研究員、2012年01月-2015年03月京都大学バイオインフォマティクスセンター助教、2015年04月-2017年03月名古屋工業大学情報工学科助教、2015年12月-2019年03月科学技術振興機構JSTさきがけ研究員、2015年08月-2020年03月物質・材料研究機構特別研究員、2017年04月-現在名古屋工業大学情報工学科准教授【研究歴】統計的機械学習の基礎と応用研究に従事。基礎研究ではNeurIPS, ICML, KDDなど機械学習、データマイニング分野の最難関学会で多数論文を発表。応用では特に材料科学や生物科学データへの機械学習応用に従事。電気情報通信学会、人工知能学会所属。【著書】統計的学習の基礎-データマイニング・推論・予測-（分担執筆12章担当）、共立出版、2014。サポートベクトルマシン（機械学習プロフェッショナルシリーズ）、竹内一郎、烏山昌幸、講談社、2015。データ分析の進め方及びAI・機械学習導入の指南（分担執筆第5章第4節第2項担当）、情報機構、2020。AI・MI・計算科学を活用した蓄電池研究開発動向（分担執筆第II編6-7章担当）、シーエムシーリサーチ、2021。マテリアルズインフォマティクスのためのデータ作成とその解析、応用事例（分担執筆第4章5節担当）、技術情報協会、2021。

開催日時	2021年10月28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。
受講料	55,000円(税込) ※資料代含 *メルマガ登録者 49,500円(税込) *アカデミック価格 26,400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。★【参加対象者】マテリアルズインフォマティクスに興味のある方。機械学習を「探索」問題に活用することに興味のある方。ベイズ最適化の材料応用に興味のある方。マルチタスク最適化(多数の探索問題を協調的に最適化)や多目的最適化(競合する指標の同時最適化)など発展的な探索問題設定に興味のある方。特段、事前知識は必要ありません。★【得られる知識】機械学習(AI)の基本的な考え方、位置付けや背景。機械学習による未知関数の探索アルゴリズム(ベイズ最適化)の成り立ちと導入方法の基礎。より複雑な設定での効率化の方法、特に互いに関連のあるタスクの探索効率化や、競合する指標の同時最適化、近似的な情報源の活用など。

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- 統計的機械学習概論
 - 機械による「学習」とは
 - 人工知能と統計学
 - 実践上の留意事項
- ベイズ最適化の基礎
 - 回帰分析
 - ベイズ最適化
- コスト差のある複数探索問題での知識共有(コスト考慮型マルチタスクベイズ最適化)
 - 探索曲面の類似性とコストの多様性
 - 粒界構造探索での適用例
- 複数指標を同時に最適化する探索(多目的ベイズ最適化)
 - 多目的最適化とは
 - 伝導材料探索での適用例
- 閾値条件を満たす領域の探索(閾値領域探索型ベイズ最適化)
 - 低誤差領域の検出問題
 - Mg合金パラメータ推定での適用例1
- コストと精度のトレードオフを活用する探索(マルチフィデリティベイズ最適化)
 - ベイズ最適における観測精度の動的選択
 - Mg合金パラメータ推定での適用例2

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における機械学習技術の活用		
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いません。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: ㈱シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町2-7 TEL03-3293-7053

■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

2021年10月28日(木)開催

マテリアルズ・インフォマティクスにおける機械学習技術の活用： 多様な探索問題のためのベイズ最適化法

講師：烏山 昌幸氏

名古屋工業大学 情報工学科 准教授

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 that 乱れる場合があります。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。
万が一一部外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。