

スパースモデリングのマテリアルズインフォマティクスへの活用 (Python ハンズオンあり)

講師：Lee Unseo (イ ウンソ) 氏

株式会社 HACARUS データサイエンティスト

スパースモデリングとは、一見複雑そうに見えるデータでも本質的な部分のごくわずかであるという仮定を用いて、データからその少数の本質を抽出するための方法論です。スパースモデリングは少ないデータからでも、本質を抽出することができ、MRI 画像の撮像やブラックホールの撮像を始め、マテリアルズインフォマティクスでも応用されています。

本講義では、スパースモデリングとは何なのかという話から、Pythonでのハンズオンを中心に、どのようにマテリアルズインフォマティクスに活用していくかを紹介いたします。

※ハンズオンでは Google Colaboratory を使用します。Google アカウントの用意が必要になります。円滑にハンズオンを進める上で、Google Colaboratory の事前準備と簡単な使い方の予習をお願いいたします。

【経歴】同志社大学生命医科学部卒業。在学中に株式会社 HACARUS にインターンとして参加。画像解析や信号処理のプロジェクトに取り組む。大学卒業後、HACARUS に正社員として入社し、地中レーダ AI の開発やマテリアルズ・インフォマティクスの研究開発に従事する。

【活動】同志社大学院 脳科学研究科 システム脳科学分野 研究インターン、同志社大学 脳神経行動工学研究室にてコウモリの行動原則の研究、共著書「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」(4章4節)

開催日時	2021年9月1日(水) 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	55,000 円(税込) * 資料付 * 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】スパースモデリングやスパースモデリングを使ったマテリアルズ・インフォマティクスに興味のある方。

★【セミナーで得られる知識】スパースモデリングの基礎知識、RDKitの簡単な使い方、スパースモデリングのマテリアルズ・インフォマティクスへの応用

【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 とは何か

- 1.1 スパースモデリング と機械学習の違い
- 1.2 スパースモデリングの応用事例

2. Lasso の基礎知識

- 2.1 Lasso とは
- 2.2 Lasso を実データで使うときのポイント
- 2.3 Lasso の基本的な使い方
(Python ハンズオン)

3. 化合物の重要な部分構造を特定

- 3.1 Rdkit と Lasso を用いた化合物の特性値予測
- 3.2 予測に重要な部分構造の抽出方法
- 3.3 Python ハンズオン

4. スクリーニングモデルのための実験計画法

弊社記入欄		ウェビナー申込書			
セミナー名		スパースモデリングのマテリアルズインフォマティクスへの活用(Python ハンズオンあり)			
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。⇒ <https://cmcre.com>

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

2021年9月1日（水）開催

スパースモデリングのマテリアルズインフォマティクスへの活用 (Python ハンズオンあり)

講師：Lee Unseo(イ ウンソ)氏

株式会社 HACARUS データサイエンティスト

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](#)

- 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。