

# マテリアルズインフォマティクス(MI)の動向と 小規模データ駆動型MIのすすめ

**講師：緒明佑哉氏(慶應義塾大学 理工学部 応用化学科)**

近年、急速な発展を遂げるマテリアルズインフォマティクス(MI)は、多くの成功事例が報告されるようになってきた。そこで見えてきた課題として、小規模データの扱い方、実験科学者の経験と勘の扱い方が挙げられる。すなわち、実験科学者にはMIの浸透が十分ではない。本講座では、実験化学者である演者の研究グループで行った、小規模データへの機械学習と実験研究者の経験や考察の融合によるMIの研究事例について紹介する。具体的には、ナノシート材料の収率や高分子材料の電気化学特性を向上させた事例を中心に、MIの活用方法について紹介する。特に、小規模データに対しては、研究者の経験・勘・考察を融合することが重要であることがわかってきました。

## 【講師経歴】

2002年3月 慶應義塾大学 理工学部 応用化学科 卒業  
 2006年3月 慶應義塾大学 大学院理工学研究科 総合デザイン工学専攻 後期博士課程修了 博士(工学) 取得  
 2007年4月 日本学術振興会 特別研究員(PD) 研究機関：東京大学 大学院工学系研究科  
 2009年4月 慶應義塾大学 理工学部 応用化学科 助教 2012年4月 同 専任講師  
 2016年4月～現在 同 准教授  
 2016年10月～2020年3月 JST さきがけ研究者(兼任)  
 2018年8月～2020年7月 文部科学省研究振興局 学術調査官(兼任)

【研究分野】層状物質・ナノシート材料・二次元材料・共役高分子・マテリアルズインフォマティクス、これらを活かした機能材料の研究【所属学会】日本化学会・高分子学会・日本セラミックス協会

開催日時	2022年9月16日(金) 13:30～16:30	※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	44,000円(税込) ※資料付 *メルマガ登録者 39,600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】・実験や文献の小規模データをMIによって活用したいと思われる方・機械学習は複雑で難しいと躊躇されている方・社内でMIの導入を検討しはじめている方・MIを導入してみたものの思ったような活用につながらない方・実験系研究/技術者だがMIをこれから使ってみよう方

★【得られる知識】・小規模データへのMIへの適用方法・物質探索やプロセス最適化や性能向上のための予測モデル構築方法・研究者/技術者の熟練の知恵と機械学習の融合方法

## 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

### 1. マテリアルズインフォマティクス(MI)の動向

- 1-1 MIへの期待
- 1-2 MIでできることとできないこと
- 1-3 MIのはじまりと最近の動向
- 1-4 MIの見えてきた課題
- 1-5 小規模データに適用可能なMI

### 2. MIを活用したプロセス最適化事例：ナノシート材料合成の制御

- 2-1 MIを導入した系の紹介
- 2-2 データセットの準備
- 2-3 機械学習と考察の融合
- 2-4 予測モデル構築
- 2-5 MIで達成した成果

### 3. MIを活用した物質探索事例：新規リチウムイオン二次電池有機電極活物質の性能予測と探索

- 3-1 MIを導入した系の紹介
- 3-2 データセットの準備
- 3-3 機械学習と考察の融合
- 3-4 予測モデル構築
- 3-5 MIで達成した成果

### 4. 小規模・実験データへのMIの適用

- 4-1 ツールとしてのMIを活用する時代へ
- 4-2 明日からできるデータセットの準備
- 4-3 明日からできる機械学習と経験・勘・考察の融合

### 5. おわりに

弊社記入欄		<b>ウェビナー申込書</b>			
セミナー名		<b>マテリアルズインフォマティクス(MI)の動向と小規模データ駆動型MIのすすめ</b>			
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	2022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でもご覧いただけます。⇒ <https://cmcre.com>

**参加申込 FAX 番号**  
**03-3291-5789**

2022年9月16日（金）開催

# マテリアルズインフォマティクス (MI) の動向と 小規模データ駆動型MI のすすめ

**講師: 緒明佑哉氏**

**慶應義塾大学 理工学部 応用化学科**

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。