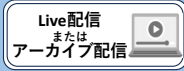


マテリアルズインフォマティクスのための データ解析



◎ケモインフォマティクス・プロセスインフォマティクスにも役立つ
◎分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理に関する最新の研究事例を紹介

- 日時：2026年6月19日(金) 10:00~17:00 ●聴講料：1名につき 55,000円（消費税込、資料付）
- 会場：Zoomを使用したLive配信セミナーです。 (1社2名以上同時申込の場合のみ1名につき49,500円（税込）
※アーカイブ配信は6/30~7/10に実施 [大学、公的機関、医療機関の方には割引制度(アカデミック価格)があります。])

講師：明治大学 理工学部 応用化学科 教授 博士(工学) 金子 弘昌 氏

【講座の趣旨】 近年、化学・産業においてデータが蓄積されつつあり、そのデータを解析する動きが活発になっている。しかし、実験結果、高機能性材料などの開発データ、化学・産業プラントにおいて様々な製品を製造する際のデータなど、蓄積されたデータを十分に活用しきれていない状況も存在する。本セミナーでは、そのような化学・産業データの使い方・解析の仕方を基礎から解説する。情報科学・データサイエンスに基づき、データから種々の材料の機能を予測するモデルを構築したり、構築したモデルを活用することで新たな構造・実験条件・材料・装置を設計したりする方法である。さらに、ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス分野を中心に豊富な応用例も紹介する。

【習得できる知識】

- (1)ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス・データ解析・機械学習・分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理の基礎知識
- (2)ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクス分野の最新の研究事例
- (3)データ解析の一般的なすすめ方・活用の仕方 (4)データ解析の応用例
- (5)最新のデータ解析手法・モデリング手法 (6)モデルの予測精度向上の方法 (7)モデルの逆解析の方法

1. ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス・プロセスインフォマティクスの基礎知識

- 1.1 機械学習・人工知能
- 1.2 定量的構造物性相関・定量的構造活性相関
- 1.3 化学構造生成 1.4 分子設計
- 1.5 材料設計 1.6 プロセス設計
- 1.7 プロセス管理 1.8 ケモインフォマティクス
- 1.9 マテリアルズインフォマティクス
- 1.10 プロセスインフォマティクス

2. 化学・産業データ解析の進め方・活用方法

- 2.1 データの形式、記述子
- 2.2 一般的なデータの前処理
- 2.3 データの可視化・低次元化
 - (1) ヒストグラム・散布図・箱ひげ図・相関行列
 - (2) 主成分分析
 - (3) 可視化の性能を検討するための指標
 - (4) [発展] Generative Topographic Mapping
 - (5) [発展] 多様体学習
- 2.4 クラスタリング
 - (1) 階層的クラスタリング (2) [発展] 混合ガウスモデル
- 2.5 クラス分類
 - (1) 線形判別分析 (2) 決定木
 - (3) ランダムフォレスト (4) [発展] サポートベクターマシン
- 2.6 回帰分析

- (1) 最小二乗法による重回帰分析 (2) 部分的最小二乗法
- (3) 決定木 (4) ランダムフォレスト
- (5) [発展] サポートベクター回帰
- 2.7 モデルの予測性能の向上
 - (1) 予測性能の評価 (2) アンサンブル学習
 - (3) [発展] 半教師あり学習 (半教師付き学習)
- 2.8 モデルの適用範囲
 - (1) データ範囲 (2) データ中心からの距離
 - (3) データ密度 (4) アンサンブル学習
- 2.9 モデルの逆解析
 - (1) モデルの適用範囲を考慮した逆解析 (2) グリッドサーチ
 - (3) サンプリング (4) [発展] ベイズの定理
- 2.10 実行するためのプログラム紹介

3. 分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理に関する最新の研究事例

- 3.1 化学空間の可視化に基づく分子設計
- 3.2 定量的構造物性(活性)相関モデルの逆解析に基づく分子設計
- 3.3 定量的構造物性(活性)相関モデルの適用範囲を考慮した分子設計
- 3.4 適応的実験計画法による材料設計
- 3.5 シミュレーションとインフォマティクス技術を活用したプロセス設計

4. まとめ・質疑応答

「マテリアルズインフォマティクス」セミナー申込書

(Live配信/アーカイブ配信 下記のいずれかに☑を入れてください)

- Live配信 (No.606215) 開催日 : 6/19
- アーカイブ配信 (No.606266) 配信期間 : 6/30~7/10

- ・申込書に必要事項をご記入の上、FAX (03-5436-7745) にてお申込みください。
- ・ホームページからも申込できます。 <https://www.gijutu.co.jp/>

会社名	事業所・事業部		
住所	〒		
TEL	携帯電話		
	所属部課	氏名(フリガナ)	E-mail
受講者1			
受講者2			
今後ご希望しない案内方法に×印をしてください(現在案内が届いている方も再度ご指示ください) [郵送(宅配便)・ショートメッセージ(携帯電話)・e-mail]			
個人情報の利用目的			
・セミナーの受付、事務処理、アフターサービスのため		・今後の新商品、新サービスに関するご案内のため	
・セミナー開催、運営のため講師へもお知らせいたします			



TECHNICAL INFORMATION INSTITUTE CO.,LTD.

申込専用FAX 03-5436-7745

●申込方法

- 1. 申込書が届き次第、請求書・聴講券・会場案内図をお送りいたします。
- 2. お申し込み後はキャンセルできません。
受講料は返金いたしませんので、ご都合の悪い場合は代理の方がご出席ください。

- 3. 申込み人数が開催人数に満たない場合等、状況により中止させて頂く場合がございます。
- 4. 定員になり次第、申込みは締切となります。