



INNOVATOR'S
GARAGE

～次代を創る研究者による最先端の研究紹介～

アカデミックナイト 第3回

主催：一般社団法人中部圏イノベーション推進機構

中部圏の大学で生まれている数多くの技術シーズと企業とのマッチングを目的として、第3回アカデミックナイトを開催します。アカデミックナイトでは、各回テーマごとに次代を創る研究者が登壇し、最先端の研究を紹介するとともに参加者と議論することで、産学連携を深めます。今回は「**機械学習**」をテーマに、データ科学を利用して、より効率的・よりスピーディーに新材料を発見しようとする「**マテリアルズインフォマティクス**」を研究されている2名にご登壇いただきます。「勘に頼った材料開発を変革したい方」「材料開発の新たな手法に興味のある方」へ材料開発が**機械学習により劇的に効率化する事例**を紹介します。

【機械学習が切り拓く新たな材料開発の世界】

第1部

「統計的機械学習による粒界構造解析： データ駆動型材料探索に向けて」

「機械学習」は近年のAIブームを牽引する要素技術です。講演では、材料開発分野における近年の機械学習研究の動向と我々の取り組みをご紹介します。



名古屋工業大学 大学院工学研究科 情報工学専攻
准教授 烏山 昌幸 氏

第2部

「物質・材料の研究開発を効率化する機械学習」

物質・材料を評価するためのデータ計測手法は様々ありますが、その評価を正しく行うためには熟練者の経験と勘が必要とされ、解析コストが問題となります。この問題を解決するために、計測データの解釈を支援する機械学習の技術を講演します。



岐阜大学 工学部 電気電子・情報工学科
准教授 志賀 元紀 氏

第3部 交流会

日時/ 2019年10月24日(木)

18時00分～21時00分 (受付開始 17時40分)

会場/ ナゴヤ イノベーターズ ガレージ【定員30名】

参加費/ 1,000円 (交流会費込み)

※本プログラムは中部経済連合会およびナゴヤイノベーターズガレージ会員向けプログラムです

お問い合わせ先



INNOVATOR'S
GARAGE

一般社団法人中部圏イノベーション推進機構

<https://garage-nagoya.or.jp>

〒460-0008

名古屋市中区栄 3-18-1 ナディアパーク4F ナゴヤ イノベーターズ ガレージ

詳細・申込みは
こちらから！



・第1部【講演1】

鳥山 昌幸 氏

名古屋工業大学 大学院工学研究科 情報工学専攻 准教授

2011年3月 名古屋工業大学 大学院工学研究科 創成シミュレーション工学専攻博士課程 修了,2010年3月-2011年3月 日本学術振興会特別研究員DC2,2011年4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1月-2015年3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4月-2017年3月 名古屋工業大学 大学院工学研究科 情報工学専攻 助教,2015年12月-2019年3月 科学技術振興機構JSTさきがけ研究員,2015年8月-現在 物質・材料研究機構 特別研究員 2017年4月-現在 名古屋工業大学 大学院工学研究科 情報工学専攻 准教授

研究・技術シーズ概要：

データ計測技術とデータ処理技術が発達したことで、さまざまな分野の「ビッグデータ」が得られるようになりました。ビッグデータをコンピュータで分析して不確実なことを予測したり、新たな知識を発見したりするアプローチは「データ科学」と呼ばれており、理論、実験、シミュレーションに次ぐ「第4の科学」として位置付けられています。ビッグデータを分析するためのコンピュータプログラムをつくる技術は「機械学習（マシーンラーニング）」と呼ばれます。

機械学習は収集したデータから背後の法則性をコンピュータに推論させることで、人間が直接メカニズムを理解しなくてもプログラムを作ることができる。画像・音声の認識ではこのアプローチが大成功を収め、深層学習（ディープネットワーク）ではプログラマーがハンドメイドしたシステムを圧倒するパフォーマンスが実現されることは繰り返し実証されています。

私は、機械学習の基礎技術研究とその科学データ応用の2つを軸に研究をしています。講演では主に、機械学習の材料科学における粒界データ解析への応用を紹介します。材料開発や研究は、多様な候補から所望の性質を持つものを探す探索問題として解釈できます。従来は、人間の経験と勘に頼るやり方が主流でした。しかし、膨大で複雑な探索候補の空間から有望なものを勘で絞りこむことは容易ではありません。

そこで、近年では材料情報学（マテリアルズインフォマティクス）と呼ばれる分野において、それまでに収集したデータを活用して有効な探索の意思決定を行うための機械学習の理論が作られ始めています。特に、粒界と呼ばれる結晶構造の作る境界面での振る舞いは、その多様性から従来解析が難しいと考えられていましたが、機械学習が探索の効率を劇的に向上し得る事例を紹介します。

・第2部【講演2】

志賀 元紀 氏

岐阜大学 工学部 電気電子・情報工学科 准教授

2006年岐阜大学大学院にて博士号を取得後、同年京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンターにて、博士研究員に着任し、2008年から助教。2013年岐阜大学工学部助教に着任し、2017年から同大学准教授。2016年からJSTさきがけ研究者を兼任する。現在の主な研究分野は、統計的機械学習およびマテリアルズ・インフォマティクス。

研究・技術シーズ概要：

1. 網羅的な波形（スペクトル）データのクラスタ解析・予測法

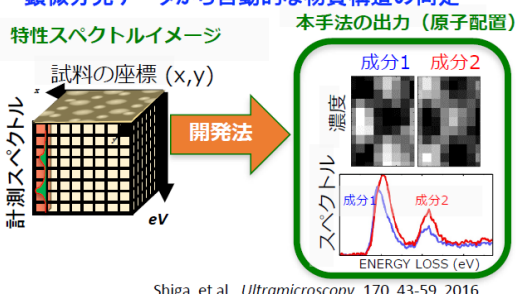
様々な実験条件・位置で計測された多数のスペクトルの波形形状を用いて、実験条件や位置をグループ分けする手法です。これによって、各計測点に含まれる化学成分などを同定でき、材料の構造を自動的に抽出できます。新たに作成した試料を客観的に（実験者の主観を除いて）評価したい場合、また、膨大な数のデータを自動処理するのに向いています。

2. 新規材料探索のための効率的な実験計画

所望の物性・材料特性を持つように化学組成を最適化するための手法です。一度の実験で最適なものを発見することは難しいので、実験を反復する回数を減らすことを目指しています。最適なものを得られる確率を少しでも増やすことを目指しており、ベイズ最適化などの機械学習技術を用います。

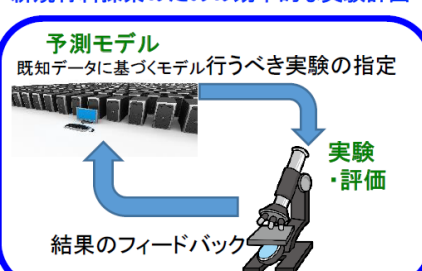
1の適用例

顕微分光データから自動的な物質構造の同定



2の概要

新規材料探索のための効率的な実験計画



本講演では、物質・材料の構造や特性を評価するための分光スペクトルなどの自動解析、異物などの自動検出につながる機械学習の技術を紹介します。