



「物質探索のための記述子設計」

http://www.nims.go.jp/MII-I/event/tutorial2018_9.html

2018年
日時 12月25日 火 13:00-16:30

参加無料
要申込

場所: JST東京本部別館1階ホール 東京都千代田区五番町7 K's五番町

主催: 物質・材料研究機構(NIMS)
後援: 情報・システム研究機構 統計数理研究所
協賛: 文部科学省委託事業 AIMaP (受託拠点: 九州大学 IMI) (※)
協力: 科学技術振興機構(JST)

2016年に開始した本シリーズも今回で第9回となる。今年は機械学習前のデータセット準備にフォーカスする。材料の原子、分子の組み合わせ数はほぼ無限にあり、求める材料特性は多岐にわたる。そのため物質・材料のデータ探索空間は巨大である。一方、既存データは多くの場合スパースである。そのため物質・材料の構成元素や結晶構造など、特徴量を適切に表現する記述子設計が要諦となるケースが多い。今回のセミナーでは記述子設計の基礎と実例について分かり易く解説する。さらに適切な記述子により獲得した学習モデルを有効に利用する手法としての転移学習についても触れる予定である。

13:00-15:30

「物質構造の表現と学習」

講師: 吉田 亮

情報・システム研究機構 統計数理研究所 データ科学研究系 教授
情報・システム研究機構 統計数理研究所 ものづくりデータ科学研究センター センター長
総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻 教授
物質・材料研究機構 特別研究員(NIMS MI²)



15:50-16:25

「XenonPyの紹介」

講師: Liu Chang (劉 暢)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 NIMSポスドク研究員
統計数理研究所 外来研究員



問い合わせ先:

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)

情報統合型物質・材料研究拠点

E-mail: mii-i@ml.nims.go.jp

※: AIMaP: 数学アドバンスイノベーションプラットフォーム/Advanced Innovation powered by Mathematics Platform
IMI: マス・フォアインダトリ研究所/ Institute of Mathematics for Industry