

# データ同化とベイズ最適化を 組み合わせた物質探索手法＜演習付き＞

1名分料金で  
2人目無料セミナーURLはこちら→ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/260392>

- ◆日時：2026年03月23日（月）13:00～16:00  
 ◆【アーカイブ配信受講：3/24（火）～3/31（火）】の視聴を希望される方は、  
 ⇒ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/260341A> こちらからお申し込み下さい。  
 ◆受講料：1名につき49,500円（税込、資料付）

会員（案内）登録していただいた場合、通常1名様申込で49,500円（税込）から  
 ・1名で申込の場合、**46,200円（税込）**へ割引になります。  
 ・2名同時申込で両名とも会員登録をしていただいた場合、**計49,500円（2人目無料）**です

## セミナーお申込みFAX

03-5857-4812

※お申込み確認後は弊社よりご連絡いたします。

●講師：奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科  
 物質創成科学領域 マテリアルズ・インフォマティクス研究室 准教授 博士（理学） 原嶋 庸介 氏

### 【受講対象】

材料研究者の方で第一原理計算や分子動力学などのシミュレーションを実験と組み合わせることに興味がある方  
 スモールデータでのマテリアルズ・インフォマティクスの実施にお困りの方

### 【必要な予備知識】

演習（デモ）で実際に講演者が開発したデータ同化プログラム（CLAUDE）を使用予定で、基本的にGoogle Colaboratoryを使ったクラウド上で実施いたしますので、事前に演習に利用可能なGoogleアカウントをご用意いただけましたら、プログラムのインストールの説明から演習を行います。ご用意が難しい場合は講演者の画面でプログラムの動作をご覧ください。データ同化プログラムの動作をご確認いただくために、こちらで用意したトイデータを使用する予定です。

### 【講演の趣旨】

本講演では、講演者が取り組んでいる実験とシミュレーションの融合に関する研究事例を紹介するとともに、講演者自身が開発したデータ同化手法について解説し、簡単な演習を行う。近年、触媒や永久磁石をはじめとする材料開発の効率化を目的として、データ科学の応用が急速に進展している。実際、データ科学に基づく物質探索により、200万件を超える新規結晶が発見されたとの報告もある。一方で、このようなデータ科学的手法は一般に膨大なデータ量を必要とするが、触媒活性や自発磁化といった特定の材料特性に関する実験データは十分に蓄積されていない場合が多い。そのため、物質科学へデータ科学を適用するには、少数データを効果的に扱う手法が不可欠となる。データ同化は、シミュレーションデータを実験データと統合することで高精度な予測モデルを構築する手法であり、少数データ問題に対する有力なアプローチの一つである。材料特性の制御変数は多次元かつ広範な空間にわたるため、データの欠測が生じやすいという問題もある。本講演では、これらの点を踏まえ、物質科学に適したデータ同化手法について解説する。

### 【プログラム】

- 物質科学におけるデータ同化手法の基礎
  - 多変量Gauss分布モデル
  - 欠測データと完全尤度
- 永久磁石化合物の有限温度磁化予測モデルの構築
- Perovskite型水分解光触媒化合物のバンドギャップ狭窄化
  - Multi-Layer Perceptronによる表現学習を用いた特徴量生成
- データ同化を用いたBayes最適化
  - Bayesの定理と事後分布
  - 獲得関数
- 光触媒化合物の焼成プロセスインフォマティクス
  - SrTiO<sub>3</sub>の焼成プロセスに関する特徴量生成
  - 焼成プロセスのDynamic Monte Carloシミュレーション
  - 実験・シミュレーション・機械学習の統合による触媒活性予測モデル構築
  - 高い触媒活性が得られる焼成プロセスの導出
- 演習
  - データ同化プログラムCLAUDEのインストール
  - 入力パラメータの説明
  - 1次元系でのデモンストレーション
  - 2次元系でのデモンストレーション

『データ同化【WEBセミナー】』セミナー申込書 < ☐LIVE ☐アーカイブ > ※いずれかにチェックしてください

会社・大学			
住所	〒		
電話番号		FAX	

お名前	所属・役職	E-Mail
①		
②		

会員登録（無料） ※案内方法を選択してください。複数選択可。

☐Eメール ☐郵送

### ● セミナーの受講申込みについて ●

必要事項をご明記の上、FAXでお申込み下さい。弊社で確認後、必ず受領のご連絡いたします。受講用URLは後日お送りいたします。

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ので、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。

お申込み・振込に関する詳細はHPをご覧ください。  
 ⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/entry>

個人情報保護方針の詳細はHPをご覧ください。  
 ⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/privacy>