

機械学習を用いた スペクトルデータ解析と材料開発への適用

ホームページURL : <https://www.rdsc.co.jp/seminar/260557>

◆日 時 : 2026年5月21日(木) 13:00~16:00 【アーカイブ配信(5/25~5/29)】

◆受講料 : 1名につき49,500円(税込、資料付)

※LIVE/アーカイブ配信いずれかの料金です。

※会員登録(無料)をしていただいた方には下記の割引・特典を適用します。

- ・1名でお申込みされた場合、1名につき**39,600円**
- ・2名同時にお申し込みされた場合、**2人目は無料(2名で49,500円)**

- ・LIVE/アーカイブ両方視聴する場合は、
1名で49,500円(税込)、2名同時申込で55,000円(税込)になります。

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】※ご略歴はホームページでご確認下さい。

東京科学大学 総合研究院 化学生命科学研究所
准教授 博士(理学) 安藤 康伸 氏

<ご専門> 計算物質科学; マテリアルズ・インフォマティクス

<学協会> 日本表面真空学会; 日本物理学会; 電気化学会

【受講対象】

- ・材料開発者
- ・実験データ解析手法の幅を広げたい方
- ・スペクトル解析の背後にある数理の基礎を学びたい方
- ・解析ソフトウェア開発等に携わる方

【習得知識】

- ・機械学習を利用した材料スペクトルデータ解析に関する基礎知識
- ・機械学習を活用した研究手法に関する基礎知識

【講座の趣旨】

近年では物質・材料に関するスペクトルデータを大量に取得できる装置環境が整ってきているが、複雑な形状をとるものや、フィッティングにかかる手間などから網羅的に解析を実施することが困難になってきている。

本講義では、取得したデータからの情報抽出のための機械学習活用について、機械学習の数理的な側面も交えながら基礎的な内容を紹介する。

【プログラム】※詳細内容はホームページでご確認下さい。

1. マテリアルズ・インフォマティクス概要

- 1) 機械学習の基礎
- 2) 機械学習応用の流れと課題設定の重要性
- 3) 代表的な機械学習応用事例の紹介
- 4) 物質・材料データの特徴と注意点
- 5) 「分きたい」のか「見つけたい」のか?
- 6) 情報科学市民権
- 7) 物質科学の立場として忘れてはいけないこと

2. スペクトルデータの低次元化とクラスター解析

- 1) 高次元データとしてのスペクトルと低次元化の重要性
- 2) 分類: 教師あり学習と教師なし学習
- 3) 特徴空間と類似度
- 4) 特徴空間の解釈性と表現性
- 5) 主成分解析によるスペクトルの低次元化
- 6) k-means法によるスペクトルの分類
- 7) 階層的クラスタリングによるスペクトルの分類

3. 予測(回帰): 予測モデルとモデル選択

- 1) 予測・モデル選択の応用例
- 2) モデル推定の種類(最尤法, MAP推定, ベイズ推定)
- 3) 確率的にみた回帰と正則化
- 4) 非線形モデリングの困難

4. スペクトル解析のためのEMアルゴリズムによるピーク検知

- 1) ピーク検知のための処理フロー
- 2) 非線形最小二乗法の困難
- 3) 回帰と分布推定の違い
- 4) ガウス分布の最尤推定
- 5) EMアルゴリズムによる最尤推定
- 6) スペクトル解析のための改良EMアルゴリズム
- 7) 解析事例

【WEBセミナーとは?】

- ・本講座は「Zoom」を使ったWEBセミナーです。視聴方法は「ミーティング用Zoomクライアント」をダウンロードするか、Webブラウザから参加するかの2種類がございます。
Zoom 接続テストの手順(<http://www.rdsc.co.jp/files/instruction/zoom.pdf>)をご覧ください。
- ・タブレットやスマートフォンでも受講可能ですが、機能が制限される場合があります。
- ・お申込み後は、弊社よりお申し込み内容確認メールをお送りします。
- ・LIVE配信を受講される方には、Zoom視聴URLとセミナーの資料(PDF)をメールでお送りします。開始時間の10分前にご参加下さい。
- ・アーカイブ配信を受講される方は、配信開始日までにセミナー資料と動画視聴URLをメールでお送りします。

『機械学習データ解析』セミナー申込書 ※ご希望の参加形式にチェックを入れて下さい⇒☐LIVE ☐アーカイブ

会社・大学			
住 所	〒		
電話番号		FAX	

お名前	所属	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

●Web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。上記のLIVEかアーカイブにチェックを入れて下さい。弊社から受付完了のご連絡をいたしまして請求書をお送りいたします。

セミナーお申込み後、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下さい。代理の方も見つからない場合、営業日(土日祝日を除く)で8日前まででしたらキャンセルをお受けします。

受講料の支払いに関しては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>