

「データサイエンス研究の基礎と最新技術・応用展開」光機能材料研究会 25 周年記念・第 99 回講演会  
日時：2024 年 10 月 21 日（月）10：15～16：50（入室 10:00） ※**会員限定**の Zoom でのウェブ講演会  
= **申し込みは下記よりお願いいたします。（会員でない方は登録・入室できません）** 受付締め切り：10 月 18 日（金）  
= <https://touche-np.org/dsci> □法人会員（3 名まで無料） □学術（個人）会員ご本人様無料  
□学術（個人）会員研究室並びに講師研究室学生無料（**予稿集無**） ◆予稿：会報光触媒 75 号

◆この案内は会員でない方にもお送りしていますのでご注意ください。会員でない方は、この機会にHP<http://pfma.jp/>  
掲載の入会のご案内をご覧いただき、入会をご検討いただければ幸いです。

◆開会にあたって：研究室の責任者の方にご講演いただき、研究の全体像・コンセプトとポイントがつかめるように企画いたしました。

◆主催：光機能材料研究会事務局 〒278-8510 千葉県野田市山崎 2 6 4 1

東京理科大学スペースシステム創造研究センター光触媒国際ユニット内 <http://pfma.jp/>

「プログラム」（質疑応答 5 分） ◆**録音・録画およびそれに類する行為は禁止事項です。**

10:15 開会にあたって 光機能材研究会会長 藤嶋 昭

座長 西村 俊

第 1 講 10:20-11:15 「マテリアルズインフォマティクスの基礎」高橋啓介（北海道大学）

マテリアルズインフォマティクスは近年多くのアカデミア・企業で導入が進むが、そもそもマテリアルズインフォマティクスの環境をどう構築するのかなど基本的なところを示した情報が欠けている。

本講演ではマテリアルズインフォマティクス環境設定から、データの構築・前処理・可視化、機械学習など基礎から具体的な応用までを全て網羅する。

第 2 講 11:20-11:55

「特徴量のオープンデータベース化が加速する材料開発」畑中美穂（慶應義塾大学）

材料を入力することで物性を出力する機械学習モデルを構築する方法（マテリアルズインフォマティクスの手法）を駆使する機能性材料開発が期待を集めているが、この方法には、膨大なデータが必要とされるという難点がある。本講演では、コポリマーと遷移金属錯体触媒を例に、少数データを元に予測精度の高いモデルを作るための、材料の数値表現（特徴量）の設計方法とそのオープンデータベース化について述べる。

座長 畑中美穂

第 3 講 13:00-13:35 「ハイスループット電解液探索システムにおける自律自動実験」

松田翔一（物質・材料研究機構）

電解液材料は、蓄電池の性能を決める重要な因子であるが、液組成の組合せは膨大であり、材料の探索空間は非常に広大である。本講演では電池性能を最大化する電解液組成を効率的に発見するための自動実験技術や、自律実験の有効性について紹介する。

第 4 講 13:35-14:10 「データサイエンスを活用したペロブスカイト太陽電池の材料探索」

佐伯昭紀（大阪大学）

鉛・非鉛ペロブスカイト太陽電池の材料・プロセス探索研究におけるハイスループット実験と機械学習について紹介する。特に効率的な実験にはロボットを用いた自動化が有効であり、近年注目されている領域である。

座長 佐伯昭紀

第 5 講 14:20-14:55 「データサイエンスを活かした固体触媒開発：固体触媒インフォマティクスの実践」

西村 俊（北陸先端科学技術大学院大学）

計測技術の鍛錬による触媒機能の原理解明に基づく固体触媒技術の改良が実践されている。では、限られた材料情報の相関関係に基づくデータサイエンス技術をどのように固体触媒開発に活かすことができるのか。メタン酸化カップリング反応触媒の開発実践を基に、固体触媒インフォマティクスのこれからの可能性について考えたい。

第 6 講 14:55-15:30 「研究段階から使える機械学習と分析科学データを組み合わせた材料最適化」

—光電気化学水分解材料を例に— 片山建二（中央大学）

研究段階の試料作製では数十程度の少数の試料しかない場合が多い。そのようなときに機械学習をどう使って材料を最適化していけばよいかは自明ではない。そのような状況でも分析科学データを組み合わせた機械学習によって材料最適化の方向性を示す堅牢な機械学習方法を開発してきた。講演では、その実践方法について説明する。

座長 片山建二

第 7 講 15:40-16:15 「機械学習を活用した化粧品の感触設計支援」大久保堅三郎（ポーラ化成工業）

化粧品の感触はお客様に心地よく使っていただく上で重要な要素である。感触設計は主に開発担当者の経験を基に多数のサンプル試作と評価を必要としてきた。そこで、機械学習の手法を活用することにより、化粧品の感触を予測するモデルを構築した。これにより、開発担当者の経験や試作回数に依存しない、予測に基づく化粧品の感触設計を実現した。

第 8 講 16:15-16:50 「LSTM 深層学習のバッテリーエミュレーターへの応用」

中山将伸（名古屋工業大学）

蓄電池材料の研究において、その実用性とモデル化のしやすさからマテリアルズ・インフォマティクスが広く用いられています。この講演では、深層学習を含む機械学習技術がどのようにして蓄電池材料の研究に役立てられるか、具体的な例を交えて我々の取り組みを紹介します。