

2023 年度公益社団法人日本金属学会関東支部講習会
『機械学習と金属工学：最新動向と材料開発への応用』

日 時：2023 年 10 月 19 日, 26 日 11 月 9 日 (木) 17 日, 24 日 12 月 1 日(金)17:00-18:30

場 所：オンライン

主 催：公益社団法人日本金属学会 関東支部

開催趣旨：

公益社団法人日本金属学会関東支部では、機械学習の金属工学への最新の動向と、構造材料および機能性材料の開発への適用事例についての講習会を開催します。各分野の専門家がそれぞれの領域での最新の研究成果や実践的な事例を紹介し、参加者に貴重な知識と洞察を提供します。

多くの皆さまの参加をお待ちしております。

(※タイトル、開催趣旨については、ChatGPT を用いて作成しました。)

【プログラム】

- 10 月 19 日(木) 機械学習の基礎と最近の動向：白川真一 (横浜国立大学)
- 10 月 26 日(木) 構造材料研究への機械学習の応用：井上純哉 (東京大学)
- 11 月 9 日(モック) 機械学習による材料の予測・理解・発見：高分子材料・準結晶研究への応用事例：吉田亮 (統計数理研究所)
- 11 月 17 日(金) X線顕微鏡で得られたビッグデータの解析への機械学習の応用：木村正雄 (高エネルギー加速器研究機構)
- 11 月 24 日(金) スモールデータで始めるデータ分析：柳生進二郎 (NIMS)
- 12 月 1 日 ChatGPT の材料研究への活用事例および活用に伴う規制：講習会実行委員会

【講演概要】

機械学習の基礎と最近の動向

白川真一（横浜国立大学）

機械学習や深層学習の進展はめざましく、様々な分野での活用が期待されている。また、機械学習のライブラリやツールの登場によって、利用も容易になってきている。本講演では、機械学習の基本的な考え方を解説し、基本的なモデルや深層学習で利用されるニューラルネットワークについて概説する。さらに、機械学習や深層学習の最近の話題や各種分野への応用事例を紹介するとともに、機械学習を利用する際のポイントを議論する。最後に、講演者が最近取り組んでいる機械学習プロセスの自動化を目指した自動機械学習に関する研究を紹介する。

構造材料研究への機械学習の応用

井上純哉（東京大学）

構造材料の特性は、結晶構造や分子構造だけでなく、結晶粒や析出物のサイズや形状など、様々なスケールの組織因子によって左右される。また、これらの組織因子は、製造・加工プロセス中に生じる様々な非平衡現象が複合的／競合的に生じることで複雑に変化する。そのため、構造材料の開発では、材料の本質的な理解が重要となるだけでなく、過去のデータや経験則も活用しながらの試行錯誤も不可欠となっており、膨大な労力と時間が不可欠となってきた。この様な状況を打破すべく、近年機械学習の力を借りて所望の特性を持った材料の設計をする試みがされている。本講演では、その様な試みの一つとして深層学習モデルと物理モデルの融合による材料組織推定のための枠組みに関する研究を紹介する。

機械学習による材料の予測・理解・発見：高分子材料・準結晶研究への応用事例

吉田亮（統計数理研究所）

データ駆動型材料研究の基本的なワークフローは順問題と逆問題からなる。順問題の目的は、系の入力 X （例：組成や構造、プロセス変数）に対する出力 Y （例：物性や高次構造）の予測である。入出力のデータ集合を用いて、機械学習で順方向の予測モデル $Y=f(X)$ を構築する。一方、逆問題では、モデルの逆写像を求めて所望の特性 Y を有する X を予測する。機械学習のブラックボックスモデルに埋め込まれた暗黙のルールとその物理化学的意味を読み解き、新しい物質や材料を予測・発見する。本講演では、高分子材料研究や準結晶研究への応用事例に基づいて機械学習の方法論（生成 AI、記述子、転移学習、実験・シミュレーションの統合解析、逐次の実験計画法など）を解説しながら、データ駆動型材料研究の現状と展望を論じる。

X線顕微鏡で得られたビッグデータの解析への機械学習の応用

木村正雄（高エネルギー加速器研究機構）

材料研究に機械学習を適用していくには、材料の諸物性や組織・構造等の階層構造を“適切に記述する”ことが最重要になる。本講演で、X線顕微鏡のビッグデータ解析をとりあげ、記述法と機械学習の関係について紹介する。X線顕微鏡を用いると材料中の組織や化学状態の不均一性に関する多次元のビッグデータが得られ人力での解析には限界がある。そこで応用数学（パーシステントホモロジー）を用いて不均一性の幾何学的特徴記述することによりビッグデータに埋もれた特徴量の抽出を試みた。そして機械学習を行うことにより材料のマクロ量を支配する反応起点（“trigger sites”）を特定することができるアプローチについて紹介する。

スモールデータで始めるデータ分析

柳生進二郎（NIMS）

Python や R など高度な解析（機械学習）ツールを無料で簡易に誰でも利用できるようになった。さらに ChatGPT の登場により、効率よく簡単にプログラミングができるようになった。これらのツールを利用することで、データを俯瞰する（可視化する）、相関を見る、グループ分けする、次元を圧縮する、予測するなどが可能になる。

これらのツールを使って、2つの系統の異なる実験データを題材に分析した事例について紹介する。1つは、大気腐食のデータを気象庁から配信されている気象データとを結び付けて説明・予測することを目的とした事例について、もう1つは、材料のイオン化ポテンシャルを求めるスペクトルの手動解析を自動解析に変更する目的で利用した事例について紹介する。

ChatGPT の材料研究への活用事例および活用に伴う規制

講習会実行委員会

ChatGPT は、対話型 AI として近年注目を集めるデジタルツールである。適切な対話を繰り返すことで、簡単なプログラムや産業界の動向調査、作文時の文章言い換えなどが可能であり、我々の仕事効率を高めることができる。しかしながら、適切な対話を行わなければ、望むような結果を得ることができなかつたり、検索ワード自体が web 上に公開されてしまうなどの諸問題も内包している。本稿では、本講習会では初めての試みとして、この新たなツールの活用事例を講習会実行委員会のメンバーから紹介いただく。同時、各組織で ChatGPT の利用に関してどのような対応がとられているかを紹介し、受講者の皆さんとともに、今後の活用方法について議論を行う。

【2023 年度講習会実行委員会】

実行委員長：中尾 航（横浜国大）

稲邑朋也（東京工業大）、梅澤 修（横浜国大）、大出真知子(NIMS)、木村正雄(高エネ機構)
小林由紀子（日本製鉄）、長谷川 寛(JFE)、錦織貞郎（IHI）、藤田敏之(東芝)、船川義正(JFE)、
御手洗容子(東大)

企画世話人：公益社団法人日本金属学会関東支部

支部長：藤居俊之(東工大)、幹事：林幸（東工大）

事務局：福島彩(東工大)

【受講申込】

参加費：会員 10,000 円（協賛学会会員も同額）、非会員 20,000 円、学生 3,000 円

参加申込方法：

講習会に参加をご希望の方は10月19日(金)16：30までに氏名、所属、E-mailなどを下記
リンクの登録フォームからお申込み、参加費のお支払いを完了させて下さい。

参加登録フォーム

<https://forms.gle/u6Zwhri2ZbBQ3vUr9>

参加登録フォームへの入力後、参加費のお支払いをお願いします。以下のフォームを使って
のクレジットカード支払いをお願いします。クレジットカード支払いが難しい場合には、以
下の振込先へ銀行振り込みをお願いします。尚、請求書払いも可能です。

クレジットカード決済申込サイト：

<https://peatix.com/event/3699454/view>

銀行振込先：

(株)三菱 UFJ 銀行 仙台中央支店 普通預金 口座番号 1505249
口座名義 公益社団法人 日本金属学会 関東支部 事務局長 山村 英明
シヤダンハウジン ニッポンキンゾクガツカイ カントウシブ

問合せ先：〒113-8656 東京都目黒区大岡山 2-12-1 南 8 号館 312 号室

東京工業大学物質理工学院材料系林研究室 日本金属学会関東支部事務局 福島宛

E-MAIL：fukushima.a.ad@m.titech.ac.jp TEL/FAX：03-5734-3141