

マテリアルズ・インフォマティクス基礎から応用

チュートリアル連続セミナー

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト データ連携部会企画

Python と Jupyter によるマテリアルズ・インフォマティクス (MI) のチュートリアル連続セミナーを開催します。簡単な物質例を使って、MIに必要なデータ解学の基礎知識から簡単な応用までを「習うより慣れろ」を方針として解説します。

講師紹介： 木野 日織 博士 (理学)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 主幹研究員
東京大学大学院理学系研究科博士課程卒、東京大学物性研究所物性理論部門助手などを経て、2015年に始まったJST イノベーションハブ構築支援事業の一環である (国) 物質・材料研究機構に情報統合型物質・材料開発イニシアティブ発足時から MI 研究を行う。



チュートリアル内容 (予定) ※内容は予告なく変更する場合があります。

1. データ解析学基礎：
MIによる材料開発を行うために必要なデータ解析の知識について解説
2. 基礎編：
実際に Python スクリプトを動かして基礎的なデータ解析学手法 (回帰、次元圧縮、分類、クラスタリング) を解説
3. 応用編：
以下の項目について簡単な物質を例として用い、実際にコードを動かしてデータ解析学手法を解説
 - A) 次元圧縮を併用したクラスタリング
 - B) トモグラフィ像の復元
 - C) 説明変数の重要性評価
 - D) モデル全探索による会期モデル評価
 - E) ベイズ最適化
 - F) 次元圧縮を利用した推薦システム

日程：12月7日以降の毎週水曜日（12月28日、2023年1月4日を除く）全6回（予定）

時間：13：30～14：30

参加資格：どなたでもご参加いただけます

参加費用：無料

配信：ZOOM ウェビナー（日本語で解説します）

下記 URL にアクセスして事前に参加登録をお願いします。

https://zoom.us/webinar/register/WN_4drQihWBQGyi-39mYYgsfw



（なお、後日 YouTube のチャンネルにて編集したものを公開予定）

備考：チュートリアルで使用する Python のスクリプトとデータを含むレポジトリは以下に格納されていますので、事前にインストールをお願いします。

https://bitbucket.org/kino_h/python_mi_book_2022/src/master/

このコードを動作させるためには Python が実行できる PC をご準備ください。想定 Python 環境は Anaconda Distribution（<https://www.anaconda.com/products/distribution>） Python3.9 版もしくは同等のものです。スクリプトによっては追加の Python ライブラリのインストールが必要になる場合があります。

Anaconda は個人、学生、教育機関が教育活動として試用する場合は無料のようですが、それ以外の場合にかかる費用については Anaconda の Web ページでご確認ください。

（<https://legal.anaconda.com/policies/en/?name=terms-of-service>）

参考図書：本チュートリアルは以下の書籍を基に行われますが、書籍の購入を薦めるものではありません。

- [1] 木野 日織、ダム ヒョウ チ著「Orange Data Mining ではじめるマテリアルズインフォマティクス」近代科学社、ISBN:9784764906310
- [2] 木野 日織、ダム ヒョウ チ著「Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス」近代科学社 Digital、ISBN:9784764960466

問い合わせ先：

データ連携部会事務局：dtis_admin@ml.nims.go.jp