

講義題目	マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用		
担当講師	第 1, 2 回 木野日織 第 3, 4 回 藤井幹也 第 5, 6 回 三宅隆 第 7, 8 回 吉見一慶	教室	Zoom を利用したオンライン講義
定員	200名程度	言語	日本語
単位数	なし	授業の形式	講義および議論
開講日時 2024 年 11 月開講 (90 分 × 8 回)	11 月 22 日(金): 第 1 回 14:00-15:30、第 2 回 15:45-17:15 11 月 29 日(金): 第 3 回 14:00-15:30、第 4 回 15:45-17:15 12 月 06 日(金): 第 5 回 14:00-15:30、第 6 回 15:45-17:15 12 月 13 日(金): 第 7 回 14:00-15:30、第 8 回 15:45-17:15		
講義概要	「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の基礎と応用」をテーマにしたオンライン講義シリーズを開催する。このシリーズでは、近年、発展の著しいMIの現状を踏まえ、その基礎から段階を追って、最新動向までを議論する。機械学習の基礎、実験の自動化・自律化の最新動向、MIの重要な手段である第一原理計算とMIへの活用、そして計算物質科学における大規模言語モデル(LLM)の活用など、物質科学の新しい地平を開くための基礎から応用事例を体系的に提供する。		
講義内容	<p>【第1回】マテリアルズ・インフォマティクスの基礎(1): 方程式が存在する物理学の世界において機械学習を行う意味と機械学習手法、特に回帰手法を解説する。物質科学の題材を用いたPythonスクリプト例を実行する。</p> <p>【第2回】マテリアルズ・インフォマティクスの基礎(2): (1)に続いて次元圧縮・分類・クラスタリング手法を解説する。物質科学の題材を用いたPythonスクリプト例を実行する。</p> <p>【第3回】実験自動化・自律化の世界的な動向について: 近年、機械学習や深層学習を材料研究に応用するマテリアルズ・インフォマティクスの分野では、ベイズ最適化などの真の関数が明示的に不明な場合において活用可能なブラックボックス最適化が盛んに使われており、さらには実験の自動化・自律化が世界的な潮流となっている。本講義では、自律化の基礎であるベイズ最適化から紹介し、クローズドループの概念や最新の自動化・自律化の研究動向を紹介する。</p> <p>【第4回】クローズドループによるプロセス・材料探索: 本講義では、第一回目の内容をうけて、AIを用いたクローズドループの研究例として、我々が取り組んでいる高分子重合の例や無機結晶材料の例を取り上げる。高分子重合については実験自動化例を紹介し、材料科学の視点のみではなく、材料開発システムを設計する際の考え方などをふまえて講義する。さらに、自動化・自律化が盲目的な行為にならないために可視化の重要性も議論する。</p> <p>【第5回】データ駆動型材料開発の進展: 過去10数年間のマテリアルズ・インフォマティクスの進展を概観するとともに、材料開発に用いられる機械学習手法の基礎的事項を解説する。</p> <p>【第6回】第一原理電子状態計算: マテリアルズ・インフォマティクスの重要な手段である第一原理計算について、密度汎関数理論を中心に初学者に向けて解説する。</p> <p>【第7回】計算物質科学におけるLLMの活用～基礎編:LLMの基礎と環境構築: LLMの概念やそのアルゴリズム的背景を理解することで、応用編に備えた基礎力を養う。また、ChatGPTやGitHub Copilotを使用した実践的な環境構築の手順を紹介し、日常の研究や開発にすぐに役立てるための具体的な設定方法を学ぶ。</p> <p>【第8回】計算物質科学におけるLLMの活用～応用編:知識習得・コーディング効率化への適用事例の紹介: 計算物質科学分野において、LLMがどのように知識の習得を支援し、コーディングの効率化に寄与するか、研究プロセスや教育における活用例を通じて紹介する。</p>		
受講対象	1)「高度人材育成事業」にご入会の企業(=連携機関)に所属の方(有料) 2)学部学生、修士・博士課程学生、大学・国立研究機関等に所属する研究者等(無料)		
履修にあたり必要な知識	学部4年生程度の量子力学及び固体物理学の知識		
履修上の注意	受講生が定員を大幅に上回る場合は、1)連携機関としてお申込みの企業の方、2)博士課程学生、3)修士課程学生および学部生、4)大学・国立研究機関等に所属する研究者等の優先順位とする。		
講義資料	指定の URL からダウンロード		
参考書	Pythonではじめるマテリアルズインフォマティクス 木野日織(著), ダムヒョウチ(著). 物質の電子状態 上・下, R.M. マーチン(著), 寺倉清之(翻訳), 寺倉郁子(翻訳), 善甫康成(翻訳).		