

ChatGPTを使ってマテリアルズインフォマティクスを実践しよう！

改訂版 Pythonではじめる マテリアルズ インフォマティクス

著者：木野 日織, ダム ヒョウ チ

仕様：B5判・並製・印刷版モノクロ/電子版一部カラー・
本文260頁

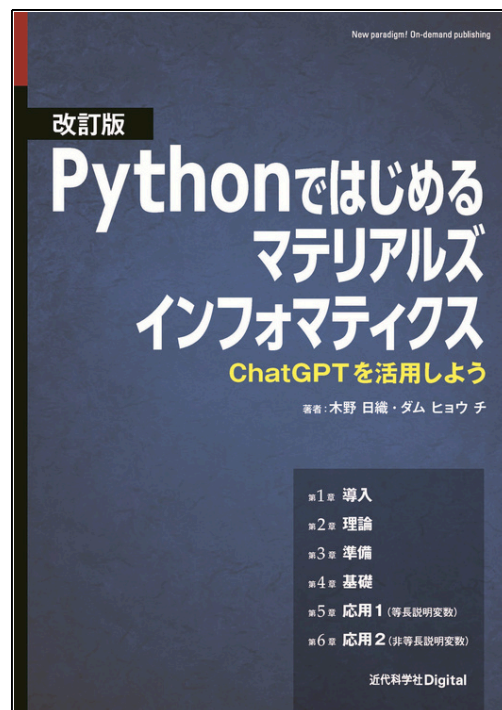
印刷版・電子版価格：3,600円（税抜）

ISBN（カバー付き単行本）978-4-7649-0735-5 C3004

ISBN（POD）978-4-7649-6100-5 C3004

発行：近代科学社 Digital

発売：近代科学社



近代科学社 Digital

<https://www.kindai Kagaku.co.jp/kdd/>

近代科学社 Digital は、株式会社近代科学社が推進する21世紀型の理工系出版レーベルです。デジタルパワーを積極活用することで、オンデマンド型のスピードで持続可能な出版モデルを提案します。

全国の書店・ネット書店にてお求めいただけます。お取り扱い店は以下のウェブページをご覧ください。

https://www.kindai Kagaku.co.jp/book_list/detail/9784764961005/



お問い合わせ先

株式会社近代科学社

〒101-0051 東京都千代田区神田神保町 1-105

神保町三井ビルディング

電子メール：contact@kindai Kagaku.co.jp

内容紹介

本書ではPythonを使ったマテリアルズインフォマティクスの手法として、物質科学に関するデータ（特に無機物質）を主に扱い、データ解析学の基礎から非等長説明変数を用いるアルゴリズムまでをまとめています。

物質科学の世界では物質ごとに収集できる変数の数が異なる（非等長説明変数）場合が多く、実践でも苦勞することを考慮して対応策を詳述。改訂にあたっては「ChatGPT」を使ったPythonコード作成の補助、データ解析の構築方法などを各章に取り入れることで、Pythonを扱ったことがない初学者にとっても挑戦しやすい内容になっています。

目次

第1章 導入

- 1.1 本書の目的その1
- 1.2 本書の目的その2
- 1.3 本書の目的その3
- 1.4 本書の目的その4

第2章 理論

- 2.1 予測問題
- 2.2 データ解析学手法の紹介
- 2.3 回帰・分類モデルの性能評価
- 2.4 データ解析学手法の四過程
- 2.5 説明変数の特徴の見出し方
- 2.6 予測問題（再び）
- 2.7 新帰納法の世界
- 2.8 LLM の利用
- 2.9 LLM を用いた知識の取得例
- 2.10 LLM を用いたコード生成

第3章 準備

- 3.1 可視化可能な Python インタラクティブ環境
- 3.2 Python 環境のインストール
- 3.3 サンプルコードとデータファイルの取得とインストール
- 3.4 物質データ
- 3.5 データ解析の事前準備

第4章 基礎

- 4.1 はじめに
- 4.2 回帰
- 4.3 次元圧縮
- 4.4 分類
- 4.5 クラスタリング

第5章 応用1（等長説明変数）

- 5.1 はじめに
- 5.2 次元圧縮を併用したクラスタリング
- 5.3 トモグラフ像の復元
- 5.4 説明変数重要性の定量評価
- 5.5 モデル全探索による回帰モデル評価
- 5.6 ベイズ最適化
- 5.7 次元圧縮を利用した推薦システム
- 5.8 画像のノイズ削除

第6章 応用2（非等長説明変数）

- 6.1 はじめに
- 6.2 頻出パターンマイニング
- 6.3 証拠理論

付録A

- A.1 LLMに対する質問事項例
- A.2 Jupyter Notebook/LabでのNotebookファイルのPythonファイルへの変換方法

著者紹介

木野 日織（きのひおり）

1991年 東京大学理学部物理学科卒
1996年 東京大学大学院理学系研究科博士課程卒（理学博士）
1996年 東京大学物性研究所物性理論部門助手などを経て2002年から（国）物質・材料研究機構に勤務する。
2015年からの国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）イノベーションハブ構築支援事業の一環として（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（MI2I）発足時からデータマイニングを行う。データ駆動AIでは物性物理の知識を活かした説明・解釈可能なAI技術、第一原理計算によるデータ生成、そのための知識駆動AI技術などに興味を持つ。

DAM Hieu-Chi（だむひょうち）

1998年 東京大学理学部物理学科卒
2003年 北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科物性科学専攻博士号
2005年10月から北陸先端科学技術大学院大学知識科学研究科講師。2011年4月から同テニュア付准教授。
2020年10月から北陸先端科学技術大学院大学知識科学系教授。
学位は材料科学で取得。2005年から材料科学とデータマイニングの融合に身を投じている。専門分野は材料科学、知識科学、計算材料科学、データサイエンス、マテリアルズインフォマティクス。データ駆動型アプローチを用いた知識抽出など、証拠理論を用いた類似度評価に興味があり、材料科学研究のための説明・解釈可能なAI技術の開発に取り組む。