

マテリアルズ・インフォマティクス オンライン講習会 (2024 年度開始)

担当： 名古屋工業大学 中山研究室

<講義内容>

実際に論文に掲載された蓄電池材料（無機固体）に関するデータを用いて、基本的な機械学習の手順を学習します。実習は、あらかじめ指定のソフトウェアをインストールした個人 PC を使用します。見るだけの参加も歓迎します。主な講習内容は下記の通りです。情報学の知識・経験が少ない学生を対象にした初級的な内容です。

★今回はコーディングスキルを目的としたものではなく、出来合いのスクリプトを使ったデモが中心です。

<開催概要>

開催日時：2025 年 1 月 9 日（木）、1 月 10 日（金） どちらも 13:00～17:00 を目途
プログラムは次のページ

申し込み：<https://forms.gle/RqWYTkEQL78Spq2bA>（12月20日12:00 仮締切）

参加費：無料

<ハンズオンを希望する参加者>

事前に下記のプログラムをダウンロード、インストールしてください。（既にインストール済の方は新たにインストールする必要ありません）

・VESTA <https://jp-minerals.org/vesta/jp/download.html>

・JMP（無料試用版 1 か月間使用可能）

https://www.jmp.com/ja_jp/download-jmp-free-trial.html

・Anaconda3（その中にある **Jupyter-notebook** を使います）

<https://www.anaconda.com/products/distribution>

インストールガイド：仕様がよく変わるので、最新の情報を検索エンジンを使って解説を検索してください。たくさんの解説サイトが見つかります（注：記事作成日ができるべく最新のものを選んでください） **Anaconda のパッケージの一つである Jupyter Notebook が起動することを確認してください。**

<免責事項>

本セミナーで提供される情報を使用することにより生じるいかなる損害についても、主催者は一切の責任を負いません。

<プログラム>

Day1 1月9日

時間	内容
～12:50	Zoom 立ち上げ
13:00-14:00	・VESTA を使った記述子の抽出 ・JMP による回帰分析デモ ・ハンズオン (20-30 分間) ・
14:00-14:40	・機械学習アルゴリズムの座学 ・LASSO, PLS, ランダムフォレスト ・k 分割法/ハイパーパラメーター ・診断プロット、重要因子解析
15:00-15:30	休憩
15:30-17:00	Python Script を用いた回帰分析 ・LASSO, PLS, ランダムフォレスト ・ハンズオン (30-45 分間)

Day2 1月10日

時間	内容
～12:50	Zoom 立ち上げ
13:00-15:00	・機械学習アルゴリズム (分類分析) のデモと座学 ・Python Script を用いた分類分析 (ハンズオン) ランダムフォレスト
15:00-15:30	休憩
15:30-17:00	・ ベイズ最適化 の座学 ・Python Script を用いたベイズ最適化 (デモ) ・ データテーブル作成 のハンズオン Materials Project からのデータ一括ダウンロード Matminer などを使った組成情報の記述子変換

講師・アシスタント (予定) :

中山将伸 (名工大・教員) および 名工大・学生

マテリアルズ・インフォマティクス講習会 FY2024 予定

担当： 名古屋工業大学 中山研究室

概要： 本拠点の目標である、「メンバー全員がデータサイエンティスト」をめざして、特に初心者向け講習会と教材開発を行う。

<講義内容>

講習日	内容
Day1 1月9日	機械学習の基礎（用語解説）、機械学習回帰分析の実習（JMPとあらかじめ作成した python script）
Day2 1月10日	ベイズ最適化、分類学習、記述子の作り方、Materials Project からのデータ抽出法
Day3 3月ころを予定	機械学習力場による材料シミュレーション フリーの機械学習力場 MatGL(M3GNet)と、原子シミュレーターASEを用いた、材料シミュレーション
Day4-5 8月ころ予定	Python の機械学習コーディング入門 ・データハンドリング Pandas, Numpy の利用法 ・データのグラフ表示 Matplotlib ・機械学習回帰分析 sklearn ・ハイパーパラメーターチューニング optuna ・ベイズ最適化 sklearn ・深層学習初歩 pytorch

※ 注意事項：

1. 基本的に講義内容は毎年同じ内容（少しずつ進化はさせたいが）。
ただし Day3 は新しい内容
2. Day1-2 は、用意したスクリプトを使って利用することを想定（Python のコーディングまでの学習は想定しない）
3. Day3 は、前半は python コーディング能力までは必要としないが、後半は一定程度必要。
4. Day4-5、ある程度 Python のコーディングができる（if, for などの制御文やファイル入出力などを知っている）人向け。自分で script を用意する、あるいはネットなどに掲載されているコードを読み取り、自分のために使えるように修正できる力を身に着けることを目標にする。