

「翻訳 マテリアルズインフォマティクス」 目次

第 I 部 データ分析と最適化学習

第 1 章 マテリアルズインフォマティクスの概略：最先端と問題点

- 1.1 序論
- 1.2 統計的推定と設計：材料探索の加速化を目指す
- 1.3 進歩および結語

第 2 章 材料科学における情報駆動型実験計画法

- 2.1 序論
- 2.2 最適化実験計画法のツール
 - 2.2.1 ベイズ推定法
 - 2.2.2 情報理論の対象
 - 2.2.3 計算上の考慮点
- 2.3 最適化実験計画法の例
 - 2.3.1 膜-基板系：パラメータ推定のための実験計画法
 - 2.3.2 ヘテロ相の界面：モデル識別のための実験計画
- 2.4 展望

第 3 章 材料設計のためのベイズ最適化法

- 3.1 序論
- 3.2 ベイズ最適化法
- 3.3 ガウス過程回帰
 - 3.3.1 共分散関数の選択
 - 3.3.2 平均関数の選択
 - 3.3.3 推定
 - 3.3.4 単一の観測値を用いた推定
 - 3.3.5 ノイズの多い観測値を用いた推定
 - 3.3.6 パラメータ推定
 - 3.3.7 診断
 - 3.3.8 1つ以上の点での予測
 - 3.3.9 逆行列の回避
- 3.4 標本抽出を行う場所の選択
 - 3.4.1 期待値改善法
 - 3.4.2 知識勾配法
 - 3.4.3 ワンステップ分析を越えた方法および他の方法
- 3.5 ソフトウェア
- 3.6 結論

第 4 章 小規模標本の分類

- 4.1 序論
- 4.2 分類
- 4.3 誤差推定
- 4.4 正当性
- 4.5 最小平均二乗誤差の推定
- 4.6 最適化ベイズ分類
- 4.7 ガウスモデル
- 4.8 ガウス分布モデルにおける最適化ベイズ分類器
- 4.9 結論

第 5 章 データ可視化および構造同定

- 5.1 序論
- 5.2 理論
- 5.3 結果
 - 5.3.1 圧電データ
 - 5.3.2 P1s データ

- 5.3.3 Tree データ
- 5.4 結論

第 6 章 多重尺度クラスタリングによる物理複雑系に隠された構造の推定

- 6.1 一般的な問題
- 6.2 アンサンブル最小化
- 6.3 コミュニティ検出とデータマイニング
- 6.4 多重尺度コミュニティ検出
- 6.5 画像断片化
- 6.6 コミュニティ検出相図
- 6.7 複雑な材料と物理系をネットワークとして捉える
- 6.8 まとめ

第 II 部 データ、シミュレーション、およびハイスループット計算を用いた材料予測

第 7 章 高密度に付加製造された部品製造へのデータマイニング法の利用

- 7.1 序論
 - 7.1.1 レーザによる粉末床溶融を用いた付加製造
 - 7.2 密度のための付加製造部品最適化：現行法
 - 7.3 実験とシミュレーションを組み合わせるデータマイニング法
 - 7.3.1 変数パラメータを同定する簡単なシミュレーションの使用
 - 7.3.2 シミュレーション結果を評価するための簡単な実験の使用
 - 7.3.3 小さな柱の構築による密度の決定
 - 7.4 実験結果
 - 7.5 まとめ

第 8 章 酸化セリウムによる水の分解における最適ドーパントの選択：第一原理データの探索とスクリーニング

- 8.1 序論
- 8.2 スクリーニングの枠組み
- 8.3 第一原理研究
 - 8.3.1 方法とモデル
 - 8.3.2 3段階基準の適用
- 8.4 データ分析
 - 8.4.1 主成分分析
 - 8.4.2 ランダムフォレスト
- 8.5 まとめと展望

第 9 章 第一原理データセットと学習法による材料探索への道

- 9.1 序論
- 9.2 DFT データのハイスループットスクリーニング-リチウムイオン電池のカソード材料
- 9.3 DFT データと機械学習の組み合わせ I：融点
- 9.4 DFT データと機械学習の組み合わせ II：リチウムイオン伝導性酸化物
- 9.5 DFT データと機械学習の組み合わせ III：熱電材料

第 10 章 第一原理 (ab initio) データを使うマテリアルズインフォマティクス：MAX 相への応用

- 10.1 序論
- 10.2 MAX 相：独特な材料の部類
- 10.3 MAX 相に対するマテリアルズインフォマティクスの適用
 - 10.3.1 初期スクリーニングと MAX データベースの構築
 - 10.3.2 MAX の機械的特性と電子構造に関する典型的な結果
 - 10.3.3 データベースから得る記述子の分類およびそれら記述子間の相関
 - 10.3.4 マテリアルズインフォマティクスツールの有効性の確認
- 10.4 MAX データのさらなる応用
 - 10.4.1 高温における格子熱伝導率
 - 10.4.2 MAX 相における普遍的弾性異方性
- 10.5 他の材料系への拡張
 - 10.5.1 MAX 関連系、MXene 類、MAX 固溶液、および類似の層状構造
 - 10.5.2 CSH-セメント結晶
 - 10.5.3 他の材料系への拡張：バルク金属ガラスおよび高エントロピー合金
- 10.6 結論

第11章 マテリアルズインフォマティクスの記述子としての対称性適応歪みモード

- 11.1 序論
- 11.2 記述子としての歪みモード
- 11.3 ペロブスカイト型ニッケル酸塩
 - 11.3.1 統計的相関の解析
 - 11.3.2 主成分分析 (PCA)
- 11.4 まとめ

第12章 機械学習による金属間化合物の相安定性のための電子兆候の発見

- 12.1 序論
- 12.2 インフォマティクスの背景とデータ処理
- 12.3 インフォマティクスに基づく DOS スペクトルのパラメータ化
- 12.4 体積弾性係数のフィンガープリントの同定
- 12.5 まとめ

第III部ハイスループットな測定と解析によるコンビナトリアル材料科学

第13章 コンビナトリアル材料科学と、データの取得、解析、および表示に関する問題点の展望

- 13.1 コンビナトリアル材料科学 — 進歩の 20 年
- 13.2 コンビナトリアル材料合成
- 13.3 ハイスループット測定とハイスループット解析
- 13.4 データ分析と表示

第14章 ハイスループットコンビナトリアル実験+インフォマティクス=コンビナトリアル科学

- 14.1 材料の複雑性を介した材料機能の個別化：ハイスループットなコンビナトリアル法の有用性
- 14.2 ビッグデータの例としての材料データセット
- 14.3 ハイスループット実験パイプライン：ソーラ燃料材料の探索の例
- 14.4 具体的なデータセット：酸素発生反応のための Ni-Fe-Co-Ce 酸化物電解触媒
- 14.5 情報最大保持のための自動の標本ダウンセクション：組成-特性相関によるクラスタリング
 - 14.5.1 最大の情報量のためのダウンセクション
 - 14.5.2 情報理論による方法
 - 14.5.3 遺伝的プログラミングに基づくクラスタリング
 - 14.5.4 メンバーシップの計算
 - 14.5.5 合成ライブラリへの適用
 - 14.5.6 実験データセット
- 14.6 単体標本空間および組成データの統計解析
 - 14.6.1 閉包効果 — 誘導された相関
 - 14.6.2 具体的な例
 - 14.6.3 副組成不整合
 - 14.6.4 組成データの原則に基づいた解析
 - 14.6.5 組成スプレッドと距離
 - 14.6.6 組成データの内挿：スパッタリングからの組成プロファイル
- 14.7 まとめと結論