

「材料およびプロセス開発のためのインフォマティクスの基礎と研究開発最前」 目次

第I編 基礎 (理論)

第1章 マテリアル・インフォマティクスに向けたデータベースの活用法

山野仁詩, 清水宏明, 小野直亮, Altaf-Ul-Amin, 黄銘, 森田 (平井) 晶, 金谷重彦

1. はじめに
2. 公開データベースを活用したマイニング法
3. ホモポリマー物性相関
 - 3.1 物性量の相関
 - 3.2 ホモポリマーの構造物性相関
4. ポリマーブレンドデータの活用
5. マテリアルズ・データベース

第2章 Rではじめるケモ・マテリアル・インフォマティクス：社内データの活用法！

金谷重彦

1. はじめに
2. 多変量データ解析
3. Rパッケージ reshape
4. Rパッケージ reshape2
5. 多変量解析法を進めるためのRパッケージ

第3章 マテリアルズインフォマティクスの動向

知京豊裕, 木野日織, 小山幸典

1. はじめに
2. マテリアルインフォマテックス黎明期
3. 新しいマテリアルズインフォマティクスの登場
 - 3.1 アメリカにおけるデータ駆動型材料開発とハイスループット実験
 - 3.2 欧州におけるデータ駆動型材料開発研究
 - 3.3 アジアにおけるデータ駆動型材料開発
 - 3.4 日本におけるデータ駆動型材料開発
4. マテリアルズインフォマティクスのビジネス展開
5. 今後のマテリアルインフォマテックスマテリアルインフォマテックスの将来に関するキー
6. まとめ

第II編 最新研究・開発事例 (MI 向け AI/DB 技術)

第1章 スパースモデリングによる物質・材料設計のための基盤技術の構築

五十嵐康彦

1. マテリアルズインフォマティクスとスパースモデリング
2. スパースモデリングの基礎
3. スパースモデリングによる物質・材料設計への展開
4. スパースモデリングを用いた計測インフォマティクスによる新規材料・物質の探索

第2章 化学物質名の NER 研究の現状と課題

田中るみ子, 中山伸一

1. はじめに
2. 化学物質名の NER 研究の概要
3. 日本語文章における化学物質名の NER 研究
 - 3.1 日本語の特許公開公報に対する化学物質名の NER 研究

(1) 化学文章コーパスの作成

(2) 形態素解析による化学物質名を含む単語の切り出し

(3) 化学物質名の識別

3. 2 日本語文章における化学物質名の NER 研究の今後の展望

4. おわりに

第3章 インフォマティクス計算に適した計算機環境

白井泰博

1. はじめに
2. スケールアップ型サーバ
3. スケールアウト型システム
4. まとめ

第4章 AI の技術を活用する IT ソリューションとしてのマテリアルズインフォマティクス

浅原彰規

1. はじめに
2. 機械学習の技術と MI
3. IT ソリューションとしての MI
4. 材料特性を改善するためのバーチャルスクリーニング
5. 材料データを分析するための IT 環境が要する機能
 - 5.1 システムの構成
 - 5.2 分析と可視化
6. おわりに

第5章 データ解析と数理モデル〜マイクロとマクロをつなぐ〜

西浦廉政, 赤木和人

1. はじめに
2. 静的記述子
3. 動的記述子
4. まとめ

第6章 拡張 OCTA : 高分子複合材料のマテリアルズ・インフォマティクスを志向した OCTA の機能拡張

齋藤 健

1. はじめに : OCTA と拡張 OCTA
2. 拡張 OCTA の構成と機能
 - 2.1 拡張 GOURMET
 - 2.2 Image Loader
 - 2.3 AI Tool
3. 拡張 OCTA の入手方法
4. まとめ

第III編 最新研究・開発事例 (ケモインフォマティクス, 有機低分子/医薬)

第1章 旭化成ファーマにおける AI/機械学習の創薬研究への活用

芹沢貴之

1. はじめに
2. AI を活用する創薬プロセス
3. 創薬プロジェクトへの活用事例
 - 3.1 ジェネレーターのパフォーマンス検証
 - 3.2 Ligand Based Drug Design (LBDD) への応用事例

- 3.3 Structure Based Drug Design (SBDD) への応用事例
- 3.4 逆合成解析ツールの開発
- 4. 現状のAI創薬における課題
 - 4.1 予測モデルの精度
- 5. おわりに

第2章 深層学習による溶解度予測と深層学習モデルの化学的解釈

船津公人

- 1. 序論
- 2. 手法
 - 2.1 ニューラルネットワークと深層学習
 - 2.2 高次元データの可視化
 - 2.3 提案手法
- 3. 結果と考察
 - 3.1 データセット
 - 3.2 モデルのパラメータ
 - 3.3 予測精度の比較
 - 3.4 Isomap を用いた可視化
- 4. 結論

第IV編 最新研究・開発事例（無機材料開発）

第1章 機械学習を用いた超狭帯域熱放射多層膜の開発

櫻井 篤, 津田宏治, 塩見淳一郎

- 1. はじめに
- 2. COMBO による超狭帯域熱放射デバイスの設計
 - 2.1 最適化条件
 - 2.2 COMBO で予想された最適構造とその実証実験について
- 3. 現象の考察
- 4. まとめ

第2章 説明可能AIを用いた熱電材料開発

岩崎悠真

- 1. 説明可能AIとマテリアルズ・インフォマティクス
- 2. スピン熱電材料
- 3. 説明可能AIを用いたスピン熱電材料開発
- 4. おわりに

第3章 無機材料の組成式を元にした物性予測のための記述子開発

船津公人

- 1. 緒言
- 2. 手法
 - 2.1 Random Forest
 - 2.2 モデル評価指標
- 3. 記述子
 - 3.1 元素の個数および割合に関する記述子
 - 3.2 各元素に付随する要素に関する記述子
 - 3.3 組成比に関する記述子
- 4. ケーススタディ
 - 4.1 生成エネルギー予測
 - (1) データセットと前処理
 - (2) モデル構築に寄与する記述子
 - (3) 予測結果
 - 4.2 密度の予測
 - (1) データセットと前処理
 - (2) モデル構築に寄与する記述子
 - (3) 予測結果

- 4. 3 屈折率の予測
 - (1) データセットと前処理
 - (2) モデル構築に寄与する記述子
 - (3) 予測結果
 - (4) 各サンプルの予測
- 5. 結論

第4章 機械学習を用いた低コストかつ無害な新規熱電材料の出力向上

高際良樹

- 1. 背景
- 2. FAST 材料
- 3. 機械学習を用いたFAST材料の出力特性向上
- 4. 今後の展望

第5章 計測インフォマティクスの登場と期待

宮里一旗, 高橋啓介

第6章 多目的最適化アルゴリズムを用いた化学気相堆積法における自動実験計画法の開発

高橋崇宏

- 1. 緒言
- 2. 提案する自動実験計画法の概要
- 3. 自動実験計画法の例証
 - 3.1 仮想的なCVD装置と実験結果
 - 3.2 自動実験計画策定過程の例証

第7章 マテリアルズ・インフォマティクスによる新超伝導物質の発見

松本 凌, 高野義彦

- 1. はじめに
- 2. 高圧力印加による物質の電子状態エンジニアリング
- 3. 新規超伝導候補物質のスクリーニング
- 4. 高効率な高圧力下電気抵抗測定
- 5. 第一候補物質 SnBi₂Se₄ における圧力誘起超伝導の発見
- 6. 第二候補物質 PbBi₂Te₄ における圧力誘起超伝導の発見
- 7. おわりに

第V編 最新研究・開発事例（有機高分子）

第1章 構造用高分子材料の実用型最適設計・総合評価支援ツールの開発

藤元伸悦

- 1. 高分子材料を対象としたマテリアルズインテグレーション
- 2. 研究開発の概要と主な成果
- 3. 研究開発成果の活用と展望

第2章 分子設計・材料設計・プロセス設計のためのデータ駆動型化学材料設計・プロセス設計・品質管理と制御の連動

船津公人

- 1. 材料設計の現状と課題
- 2. プロセスも含めたポリマー材料設計戦略
- 3. プロセス・インフォマティクスの展開

第3章 ベイズ最適化を活用した耐熱性ポリマーの効率的設計

南 拓也

- 1. 緒言

2. 手法
 - 2.1 機械学習モデルの構築
 - 2.2 ポリマー設計効率の評価方法
3. 結果
 - 3.1 ポリマー物性予測モデルの性能評価
 - 3.2 ポリマー設計効率の評価
4. 結言

第VI編 最新研究・開発事例 (触媒開発)

第1章 触媒インフォマティクスの創成に向けた実験・理論・データ科学研究

日沼洋陽, 蒲池高志, 鳥屋尾隆, 清水研一

1. TiO₂ 表面における分子吸着のフロンティア軌道理論
2. 酸化物表面における酸素欠陥生成エネルギーの第一原理計算
3. 機械学習による吸着エネルギーの予測

第2章 合金表面上におけるメタン活性化の触媒インフォマティクス

吉田将隆, 斎藤雅史, 辻雄太, 蒲池高志, 吉澤一成

1. 序論
2. 計算方法
 - 2.1 結果と考察 (1) 学習データセットの作成
 - 2.2 結果と考察 (2) 回帰モデルを利用した触媒探索
3. 総括

第3章 日本触媒におけるキャタリストインフォマティクスの適用事例

右田啓哉

1. はじめに
2. 選択性向上のための調製条件の最適化
 - 2.1 背景
 - 2.2 データ
 - 2.3 解析手法
 - 2.4 結果と考察
 - 2.5 結論
3. 触媒組成と性能への影響の推定
 - 3.1 背景
 - 3.2 データ
 - 3.3 解析手法
 - 3.4 結果と考察
 - 3.5 結論
4. おわりに

第4章 マテリアルズ・キャタリストインフォマティクスの概要と展望

高橋啓介, 高橋ローレンニコール

1. データ
2. データから知識
3. プラットフォーム
4. 今後の展望

第VII編 最新研究・開発事例 (電池・電解質・電解液関連)

第1章 ペロブスカイト太陽電池用ホール輸送材料のキャリア移動度予測のための計算科学インフォマティクス研究

杉本 学, 田中大佑生

1. はじめに
2. キャリア輸送特性のための予測モデルの構築
 - 2.1 記述子の導入に関する理論的考察
 - 2.2 エネルギー記述子の数値的評価
3. 回帰モデルの構築と予測性能
4. まとめと今後の展望

第2章 リチウム導電体探索手法の発展と現状

鈴木耕太

1. はじめに
2. リチウム導電性固体電解質の探索
 - 2.1 古典的な探索手法
 - (1) 元素置換による探索
 - (2) 構造に基づく探索
 - (3) 組成に基づく探索
 - 2.2 理論計算やインフォマティクスを使ったアプローチ
 - (1) 計算化学による構造を基にした探索
 - (2) 機械学習を活用した組成に基づく探索
3. おわりに

第VIII編 今後の展望ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクスの将来展望

船津公人

第IX編 参考資料データ解析の進め方

船津公人

1. データセットの表現
2. 前処理
3. シグマ法
4. Hampel identifier
5. Savitzky-Goley (SG) 法
6. 主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA)
7. 独立成分分析 (Independent Component Analysis, ICA)
8. 最小二乗法による線形重回帰分析
9. Partial Least Squares (PLS)
10. Support Vector Machine (SVM)
11. Support Vector Regression (SVR)
12. Online SVR (OSVR)
13. Least Absolute Shrinkage and Selection Operator (LASSO) 法
14. ステップワイズ法による変数選択
15. Genetic Algorithm-based PLS (GAPLS)
16. Genetic Algorithm-based WaveLength Selection (GAWLS)
17. k-nearest neighbor (k-NN) 法
18. One-Class SVM (OCSVM)
19. 各種統計量