

★ データ収集の低コスト化、データの^前処理、記述子の設計、モデルの予測精度向上！

★ 高分子、金属、半導体、電池材料、触媒、医薬品・中間体の新材料探索、プロセス開発に向けて！

新刊書籍
2021年7月発刊

マテリアルズインフォマティクスのための データ作成とその解析、応用事例

●発刊:2021年7月30日 ●体裁:A4判 500頁 ●定価:88,000円(税込) ●ISBN:978-4-86104-854-8
※大学、公的機関、医療機関の方には割引価格(アカデミック価格)で販売いたします。詳しくはお問い合わせください。



本書のポイント

技術情報協会 マテリアルズインフォマティクス

- マテリアルズインフォマティクスにおける各国の政策、データベースの整備
- 散在したデータをデータベースとして整理、管理、抽出する仕組み
- データサイエンティスト、データエンジニアに求められるスキルと育成の取り組み
- 実験の自動化による大量のデータ取得、データの信頼性向上
- IoT技術を利用したデータ収集技術

- 特徴量を適切に表現する記述設計のポイント
- 予測モデルの構築、特徴量候補の探索
- アルゴリズムの種類、特徴と選定



- スパースモデリングを用いた少ないデータからの予測
- ニューラルネットワークによる逆問題解析
- 説明可能な機械学習を用いた材料開発
- 多目的最適化に向けたアルゴリズムの開発
- 機械学習によるスペクトルデータの解析

- 複数の物性を同時に達成する高分子材料の設計
- データ不足、欠損の克服に向けた予測モデル構築
- 金属材料の組織画像分析による特徴量抽出
- 最適な成膜プロセス条件の探索
- 新組成のリチウム導電体の効率的な探索
- 触媒活性因子の特定、活性予測
- 医薬品・中間体の合成経路設計、反応条件最適化、副反応生成物予測

執筆者(敬称略)

横浜国立大学
(国研)産業技術総合研究所
富士フイルム(株)
名古屋工業大学
奈良先端科学技術大学院大学
東京大学
コニカミノルタ(株)
富士通(株)
名古屋大学
(国研)物質・材料研究機構
住友化学(株)
(国研)理化学研究所
(国研)物質・材料研究機構

大野かおる
安藤康伸
井野雄介
鳥山昌幸
浦岡行治
榎学
押山智寛
屋並仁史
加藤竜司
岩崎悠真
金子正吾
香掛健太郎
吉武道子

三井化学(株)
東京大学
工学院大学
(国研)物質・材料研究機構
滋賀大学
(国研)物質・材料研究機構
大阪大学
横浜市立大学
(株)KRI
東京理科大学
慶應義塾大学
大阪大学
北海道大学
渥美坂井法律事務所・外国法共同事業
SETソフトウェア(株)

向田志保
荒井俊人
高羽洋充
高際良樹
高柳昌芳
佐光貞樹
佐々木勇和
寺山慧
柴原祥孝
秋津貴城
緒明佑哉
小野寛太
小林正人
松下外
松下康弘

(国研)物質・材料研究機構
(国研)物質・材料研究機構
(国研)物質・材料研究機構
伊藤忠テクノソリューションズ(株)
(株)日立製作所
広島大学
東京工業大学
北海道大学
東北大学
奈良先端科学技術大学院大学
(株)HACARUS
近畿大学
東京大学
関西学院大学
(国研)理化学研究所

松田翔一
松波成行
松本凌
森一樹
森田秀和
杉尾健次郎
山口猛史
西浦廉政
川添良幸
船津公人
増井隆治
池庄司敏孝
長藤圭介
田中大輔
田部井増生

名古屋大学
早稲田大学
昭和電工(株)
MI-6(株)
シネックスジャパン(株)
早稲田大学
日本アイ・ビー・エム(株)
コニカミノルタ(株)
北陸先端科学技術大学院大学
大阪府立大学
(国研)産業技術総合研究所
京都大学
東京工業大学
(株)メイドインフォ
岐阜大学

藤原幸一
藤波美起登
南拓也
入江満
白井泰博
畠山敏
武田征士
北弘志
本郷研太
麻田俊雄
矢田陽
林博之
鈴木耕太
寄山陽二郎
澤田敏彦

第1章 マテリアルズ・インフォマティクスの研究動向と今後の課題
1節 マテリアルズ・インフォマティクスをめぐる各国の政策
 1. マテリアルズ・インフォマティクスとは
 2. MIに関する各国の政策
2節 マテリアルズ・インフォマティクスの現状、課題、発展
 1. MIの基礎概念および潜在性
 2. MIの発展背景
3節 マテリアルズ・インフォマティクスで知っておくべき特許戦略
 1. 特許とは
 2. 特許戦略とは
 3. MIの特許戦略
 4. 出願動向等
第2章 マテリアルズ・インフォマティクスの社内整備と人材育成
1節 インフォマティクスにおけるAI人材の獲得、育成の取り組み
 1. 当社におけるAI人材
 2. AI人材の獲得と育成
2節 「データ駆動型」研究開発の実現に向けた住友化学における人材育成の取り組み
 1. 研究開発におけるデジタル革新の取り組み
 2. MI戦略
 3. MI人材の定義と育成ターゲット
 4. データサイエンティスト/データエンジニア育成の取り組み

5. 今後の課題
3節 マテリアルズ・インフォマティクスの社内展開・技術開発
 1. MI人材の確保
 2. MI人材の育成
 3. MI解析事例の社内適用及びデータベース構築
 4. MIの技術開発
4節 計算科学やインフォマティクス研究の推進に求められる計算環境
 1. CPU
 2. キャッシュ
 3. メモリ
 4. キャッシュとメモリのエラー訂正機能
 5. SSD (Solid State Drive)とNVMe (Non-Volatile Memory Express)
 6. HDD (Hard Disk Drive)
 7. GPU
 8. サーバ内部の環境管理 (温度、ファン、電源、エラーログ、セキュリティ)
 9. ソフトウェアの並列化
 10. HPCクラスターシステム (スケールアウト型システム)
第3章 データ駆動材料開発に向けたプラットフォーム構築とその応用事例
1節 マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発とそのプラットフォーム
 1. MIプラットフォームのシステム
 2. プラットフォームを使用したMI事例

2節 研究開発でのDX化に向けた材料開発ソリューション
 1. 材料開発ソリューション
 2. 今後の展望
3節 マテリアルズインテグレーションによる構造材料の性能予測と材料開発
4節 科学法則に基づき材料の特性を結びつけるマテリアルキュレーション
 1. 材料探索の範囲
 2. マテリアルキュレーションによる材料探索例
 3. 物性間の関係を蓄積したデータベース作成と関係性の探索
第4章 マテリアルズ・インフォマティクスのためのデータ解析の進め方とその事例
1節 予測モデルとモデル選択、モデル推定の種類
 1. 回帰モデル
 2. 損失関数と正則化
 3. 交差検証
2節 静的記述子から動的記述子へーアモルファス材料における一つの試みー
 1. 静的記述子
 2. 動的記述子

<p>3節 インフォマティクス・機械学習精度向上のための Pythonによるデータ解析</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. インフォマティクス・機械学習とは 2. インフォマティクス・機械学習で最近注目されているプログラミング言語Python 3. Pythonを用いた機械学習の事例 -アンサンブル学習- <p>4節 スパースモデリングの基本とマテリアルズインフォマティクスへの活用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. スパースモデリングの基礎 2. Lassoを用いた化合物の物性値予測 3. スパース性を活用した実験計画 <p>5節 精度と観測コストのトレードオフを考慮したベイズ的探索法: 材料パラメータ推定での適用事例</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 問題設定 2. 異なる信頼性レベルの観測を統合するガウス過程回帰 3. 低誤差パラメータ領域推定のためのサンプリング規準 4. 実行例 <p>6節 ニューラルネットワーク非線形解析の基礎と逆問題への応用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 人工ニューラルネットワーク(ANN)による非線形解析 2. マテリアルズインフォマティクス(MI)に対するANNの応用 3. ANNの弱点とその回避 4. トイモデルにANNを適用して理解を深める 5. 条件最適化(逆問題)へのアプローチ 6. ANNと業務課題改善プロジェクト <p>7節 物質探索における深層学習とその事例</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 物質探索における深層学習の重要性 2. 深層学習の基礎技術 3. 物質探索における深層学習技術の紹介 4. 物質探索における深層学習の応用事例およびツール <p>8節 単一モデルによる多彩な材料科学データの学習技術</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. MIにおける非構造化データの問題 2. グラフ型データベースの導入と機械学習の概要 3. グラフデータを使った機械学習の実例 4. グラフ型データの深層学習に関する技術概要 <p>9節 機械学習による例外的材料探索の効率化</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 背景と既存研究 2. 例外的材料探索手法BLOX 3. BLOXによる例外的光吸収特性を持つ分子の探索 <p>10節 大規模化合物データベースの類似度検索技術</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 問題設定 2. 大規模化合物データベースの類似度検索技術 3. Weisfeiler-Lehman手続き 4. 簡潔マルチビット木 <p>11節 説明可能な機械学習による材料開発</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 説明可能な機械学習 2. スピン熱電材料 3. マテリアルズ・インフォマティクスによるスピン熱電材料開発 <p>12節 実験主導マテリアルズインフォマティクスの確立</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. はじめに 2. 実験主導MIによるナノシート材料の収率向上 3. リチウムイオン二次電池有機負極活性物質の探索 <p>13節 マテリアルズ・インフォマティクスの基盤としての 第一原理計算法の確実な理解</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. バンドギャップエンジニアリングは可能か? 2. 現状の物性計算の問題点と解決策 3. 化学反応過程の時間追跡 <p>14節 第一原理マテリアルズ・インフォマティクス物質探索</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. AIMI物質探索の基本事項 2. AIMI物質探索の適用事例 <p>15節 機械学習によるスペクトルデータ解析とその事例</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. X線吸収スペクトルの解析における国内外の研究動向 2. 筆者らの研究から: データの類似度に着目したXASデータ解析 	<p>4節 マテリアルズインフォマティクスを活用した 高分子多孔体の構造解析と材料開発</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 高分子多孔体の産業利用とMI研究への期待 2. 3次元構造の特徴量抽出 3. 少数マテリアルデータの機械学習 <p>5節 機械学習による ポリメタクリル酸メチル立体規則性のab initio予測効率化</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. グリッドサーチによる全TS配座のDFT計算によるメソ比解析 2. 重回帰・正則化回帰モデリングによる安定TS配座の探索 3. ガウス過程回帰モデリングによる安定TS配座の探索 <p>6節 ソフトマター科学におけるシミュレーションやインフォマティクスの活用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. ソフトマターの数値シミュレーション 2. ソフトマターとインフォマティクス <p>7節 機械学習を利用したMOF合成</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. MOF合成とその課題 2. MOFや類似化合物の合成実験研究への機械学習の応用 3. 新規ランタナイトMOFの合成条件最適化研究 <p>8節 マテリアルズ・インフォマティクスを応用した気体分離膜の設計</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 膜分離工学におけるマテリアルズ・インフォマティクス 2. 二酸化炭素分離用の最適膜構造の設計 3. 透過理論に基づく膜材設計 4. 有機溶媒系分離用の高分子膜設計 <p>9節 計算科学・マテリアルズインフォマティクスの 機能性色素、有機EL材料開発への応用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 計算科学が主導したカラー写真用機能性色素の研究開発 2. 計算科学が決め手となった高難度有機EL材料の研究開発 <p>10節 計算機シミュレーションと機械学習による 高効率有機ホール輸送材料の設計</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 計算機シミュレーションを用いた*電荷移動度の算出方法 (理論的アプローチ) 2. 機械学習による電荷移動度の予測(経験的アプローチ) 3. 計算機シミュレーションと機械学習を融合した分子設計スキームの確立 (理論と経験的アプローチの融合) 	<ol style="list-style-type: none"> 1. リチウム導電性固体電解質の探索 <p>2節 実験自動化ロボットによる次世代蓄電池用電解質探索の ハイスループット化とマテリアルズインフォマティクス</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 次世代蓄電池用電解質開発の世界動向 2. マテリアルズインフォマティクスによる電池材料開発 3. 電解液探索の実験自動化ロボットの開発 4. 電解液添加剤のコンビナトリアル探索 5. データ科学的手法を用いた電解液添加剤の探索 <p>3節 モデル計算と第一原理計算を活用した 燃料電池および水分解デバイスの触媒層・電解質膜の設計開発</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. モデル計算を活用した燃料電池触媒層の設計 2. 第一原理計算を活用した固体高分子形燃料電池用電解質膜の開発 3. 量子化学計算による 固体アルカリ燃料電池用高耐久アニオン伝導膜の設計 4. 第一原理計算による 水分解用電極触媒の新規な触媒反応メカニズムの解明 <p>4節 マテリアルズ・インフォマティクスにおけるTOMBOの優位性</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. TOMBOについて 2. C60へのLi衝突内包 3. CO₂+2H→HCOOH反応
<p>第8章 触媒開発への応用事例</p>		
<p>1節 量子化学計算とインフォマティクスによる触媒開発への応用</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. スパースモデリングを用いた金属クラスター触媒活性因子の抽出 2. 表面吸着計算データベースを利用した不均一触媒活性予測 <p>2節 人工知能を用いた触媒反応収率の予測</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 1種類の反応条件を検討した 実験データの機械学習による触媒反応収率予測 2. 複数の反応条件を検討した実験データの機械学習による収率予測 3. 機械学習による反応条件の自動最適化技術(ベイズ最適化) 		
<p>第9章 合計経路、反応条件、プロセス設計への応用事例</p>		
<p>1節 反応副生成物予測システムの開発事例</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 合成デザイン 2. 反応生成物予測 		
<p>2節 AIによる有機化合物の分子デザイン</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. はじめに 2. グラフ理論を基礎とする分子デザイン手法 3. 活用事例 4. Webアプリケーション <p>3節 物質探索における合成実験と計算材料学の連携</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 可視光における光触媒活性を示す新規二価スズ複合酸化物の発見 2. 並列合成実験と実験条件推薦システムを活用した 未知物質の合成条件予測 <p>4節 機械学習と電子状態情報を用いた反応予測</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 合成経路設計と反応予測の概要 2. 量子化学的記述子を用いた反応予測 		
<p>5節 データ駆動型プロセスインフォマティクスによる パラメータ探索の高効率化</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. マテリアルズインフォマティクスとプロセスインフォマティクス 2. 粉体成膜プロセスの現状 3. データ駆動型パラメータ探索 4. 実験に基づいた最適化手法を用いたハイスループット自律探索の事例 5. データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究開発手法の将来 <p>6節 “新”化合物設計のための、機械学習を用いた毒性予測</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 機械学習を用いた化合物の毒性予測モデルの開発 2. 毒性予測モデルが開発でき、運用に至った際の化合物開発計画 3. 染料/顔料、モノマー、重合開始剤等の毒性予測 		
<p>第10章 医薬品の開発、製造への応用事例</p>		
<p>1節 AIを使用した計算およびデータ駆動型化学と バイオインフォマティクス</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 単分子磁石の分子設計とデータ統計 2. 人工金属蛋白質と構造ベースのドッキング計算 3. 人工知能やデータベースを利用した研究例 <p>2節 インフォマティクスを応用した細胞接着制御界面デザイン</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 細胞接着制御を目指した足場材料開発 2. 機能性ペプチドと材料をつなぐリンカーの影響 3. 高分子材料の物性値の影響 4. 周囲のペプチドが持つ物理化学的環境の影響 5. 良質なデータ取得を目指した実験自動化の有効性 <p>3節 機械学習によるスペクトル検査線構築とスペクトル波数選択</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 部分的最小二乗法(PLS) 2. 様々な変数選択手法 3. NCスペクトラルクラスタリング(NCSC) 4. NCSC型変数選択(NCSC-VS) 5. 医薬品製造プロセスにおける検査線設計 		
<p>6節 熱電材料におけるマテリアルズ・インフォマティクスの応用事例 -Fe-Al-Si系新規材料(FAST材料)の性能向上-</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 背景 2. FAST材料の現状と課題 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 <p>7節 データ駆動的手法を用いた圧力誘起超伝体の高効率探索</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. データ駆動的アプローチ 2. 様々な物質における圧力誘起超伝導の発見 3. 関連物質への波及効果: Sn(Sb,Bi)2Te4およびTiGeTe6の圧力誘起超伝導 <p>8節 3Dプリンタ造形プロセスパラメータの最適化</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. AM技術の分類 2. PBF-LBでの最適条件探索 3. PBF-LBでのプロセスパラメータ探索でのMI手法 		
<p>第7章 電池材料開発への応用事例</p>		
<p>1節 インフォマティクス手法を活用したリチウム導電体探索</p>		

