

★マテリアルズ・インフォマティクスの導入・運用時に生じる数々の疑問をQ&A形式で具体的に解消！

実務上の対処から今後を見据えた展開まで、幅広く網羅しています！

# マテリアルズ・インフォマティクスQ&A集

## —解析実務と応用事例—

●発行 2020年12月 ●体裁 B5判ソフトカバー 597ページ ●定価 68,000円 + 税

★「実務者」が実際に直面する130以上の疑問や課題に、「実務者」が直接回答！

★MI (マテリアルズインフォマティクス) という魔法を活かすための地道な積み重ねの大切さと具体的手順が分かる一冊！

### 【執筆者一覧(敬称略)】

東レ(株) 茂本 勇  
東レ(株) 山本 海  
コニカミノルタ(株) 佐川 正悟  
コニカミノルタ(株) 池田 祐子  
コニカミノルタ(株) 大澤 耕  
コニカミノルタ(株) 小田 一磨  
コニカミノルタ(株) 昌沢 翔太  
コニカミノルタ(株) 服部 達哉  
長瀬産業(株) 折井 靖光  
長瀬産業(株) 戸田 浩樹  
長瀬産業(株) 廣瀬 修一  
長瀬産業(株) 小林 正和  
名古屋大学 足立 吉隆  
(国)物質・材料研究機構 木野 日織

東ソー(株) 坂下 竜一  
(株)KRI 西島 主明  
(国)物質・材料研究機構/東京大学 田村 亮  
東北大学 赤木 和人  
(国)産業技術総合研究所 安藤 康伸  
JSR(株) 大西 裕也  
JSR(株) 須藤 翔太郎  
(株)日立製作所 岩崎 富生  
中央大学 黒木 菜保子  
中央大学/分子科学研究所 森 寛毅  
(株)コベルコ科研 世木 隆  
ソニー(株) 中野 博史  
三井化学(株) 向田 志保  
熊本大学 杉本 学  
アネスト岩田(株) 住谷 祐樹  
東京大学 荒井 俊人

三井化学(株) 中原 真希  
九州大学 相澤 直矢  
北海道大学 島田 敏宏  
理化学研究所 掛掛 健太郎  
慶応義塾大学 畑中 美穂  
ファインセラミクスセンター 森分 博紀  
奈良先端科学技術大学院大学 浦岡 行治  
慶応義塾大学 緒明 佑哉  
筑波大学 五十嵐 康彦  
明治大学 金子 弘昌  
東京大学 船津 公人  
富士フイルム(株) 奥野 幸洋  
金沢学院大学 野田 祐輔  
名古屋工業大学 中野 高毅  
名古屋工業大学 中山 将伸

東北大学 田中 博  
城西大学 寺前 裕之  
東京工業大学 林 智広  
花王(株) 大崎 浩二  
花王(株) 岡田 智成  
(株)本田技術研究所 岡山 竜也  
近畿大学 池庄 司 敏孝  
中央大学 難波 英嗣  
科学技術振興機構 島津 博基  
(株)アーク・イノベーション 檜貝 信一  
日本電気(株) 岩崎 悠真  
渥美坂井法律事務所 松下 外  
東京工業大学 清水 亮太  
東京工業大学 一杉 太郎

### 第1章 基礎と導入・運用

問1: MIとは？—MIの本質と限界—  
問2: MIの発展の方向性は？  
問3: MIに必要な機械学習の知識とは？  
問4: 最低限必要な数学・統計の基礎とは？  
問5: 最低限必要なプログラミングの基礎とは？  
問6: MIを利用するために必要な計算環境とは？  
問7: MIを導入に当たって必要となるものとは？  
問8: MIの導入に際してのコストとは？  
問9: MI活用の具体的手順/ステップとは？  
問10: MIを進めるためのキーポイントとは？  
問11: MIに適した人材とは？育成ポイントは？  
問13: 関連文献データの入手法とは？

問6: 用途に応じた最適なソフトウェアとは？  
問7: MIの各種プログラムの実装法とは？

第4章 MIの各手法と具体的なすすめ方  
問1: 機械学習の種類/概要とは？  
問2: 教師なし学習とは？また具体例は？  
問3: 教師あり学習の分類手法/具体例は？  
問4: 教師あり学習の回帰手法/具体例は？  
問5: ベイズ最適化/具体例は？ツールは？  
問7: 能動学習を用いたMI手法/具体例は？  
問8: 回帰モデルの予測性能を上げるには？  
問9: AI環境の構築と移行/モデルの運用法は？  
問10: 結晶構造探索の進化的手法例とは？  
問11: 機械学習のホワイトボックス化例とは？  
問12: トポロジカルデータ解析が強みとは？  
問14: スパースモデリングを用いたMI例とは？  
問15: 転移学習とは？メリット/活用状況/例とは？  
問16: 強化学習のメリット/活用状況/例とは？  
問17: ディープラーニングを用いたMI例とは？

第5章 シミュレーション等他手法との融合  
問1: 第一原理計算のMI進め方/計算環境とは？  
問3: MIと計算科学シミュレーションの融合とは？  
問4: 分子動力学によるデータ生成の仕方とは？  
問5: 有限要素法シミュレーションMI例とは？  
問6: XAFSを含む計測データの取り扱いとは？  
問7: 次世代CPU活用したMIの動向と展望とは？  
問8: MIにおける実験計画法の活用方法は？  
問9: 量子化学計算とは？  
問10: 電子状態インフォマティクスとは？  
問11: 原子間ポテンシャルを作成するには？

第6章 MIの実施・活用のポイント  
問1: 特徴抽出とはどのように行えば良い？  
問2: 記述子とは？種類/選び方は？  
問4: 構造記述子はどのようにしたら良いか？  
問5: モデルの逆解析のすすめ方は？  
問6: 多目的最適化の事例とは？

問7: 実験をなるべく少なく効率的に行う方法は？  
問8: MIによる外挿領域の予測法と手順とは？  
問9: M少ないデータから行うアプローチ方法は？  
問10: 更に少ないスモールデータの解析法は？  
問11: 少データから全体像を推定するためには？  
問12: 欠損多/少データ機械学習の注意点とは？  
問13: MIをマクロスケールで用いた例とは？

第7章 材料探索/材料開発/構造解析事例  
問1: 逆解析による物質の探索手順は？  
問2: 高分子材料への応用—  
問3: 成形加工への活用とは？  
問4: 高分子物性への活用具体例とは？  
問5: 樹脂の複合化/活用事例とは？  
問6: 界面の安定構造設計例とは？  
問7: 電子状態把握と電子物性/機能の予測は？  
問8: 塗料・塗膜応用の課題・可能性は？  
問9: 塗布・乾燥工程の可能性とは？  
問10: 接着現象への適用例は？  
問11: 有機半導体材料での開発例とは？  
問12: 有機無機複合材料での開発例とは？  
問13: 半導体材料関連の開発例とは？  
問14: 触媒材料関連の開発例とは？  
問15: ソフトマター材料開発の進展や課題は？  
問16: 金属材料の開発例とは？  
問17: セラミック材料関連の開発例とは？  
問18: 材料合成プロセスへのMI 応用  
問19: ナノシート合成への応用例とは？  
問20: 鉄鋼材料の開発例とは？  
問21: 化学構造・結晶構造の解析例は？  
問22: 定量的構造活性相関とその解析例は？  
問23: 複合体の特徴量計算とその解析例は？  
問24: 逆構造解析はどう進めれば良いのか？  
問25: MIによる光反応/光学特性評価への応用は？  
問26: 発光材料設計へのMI応用とは？  
問27: MIをどう分子設計/物性予測に活用する？

問28: 外れ値検出と異常検出への応用とは？  
問29: スペクトルデータに対するM例とは？

第8章 様々な分野への応用事例  
問1: エネルギー電池のMIの研究状況は？  
問2: 固体電解質の界面解析方法は？  
問3: 高Li伝導性固体電解質の探索方法は？  
問4: 電解液の探索法とは？  
問5: Li電池正極材への応用とは？  
問6: Li電池負極材開発(有機)への応用とは？  
問7: 太陽電池への応用とは？  
問8: 太陽電池の不良診断へのMI 応用とは？  
問9: 脱炭素/他エネルギー分野の応用とは？  
問1: 半導体材料関連での研究とは？  
問2: ナノカーボン・グラフェンへの応用とは？  
問1: 医薬品/原薬材料関連での研究とは？  
問2: 医薬品候補物質の探索例とは？  
問3: 生体高分子や中分子への適用例とは？  
問4: 薬物の物性予測への応用例とは？  
問5: 生体材料の解析へのMI 具体例は？  
問6: 材料と生体物質との相互作用解析法は？  
問7: MIによる材料のスクリーニングは可能？  
問1: 化粧品・シャンプー・洗剤等の研究とは？  
問2: 抗菌剤探索への応用とは？  
問1: 自動車材料関連の研究状況とは？  
問2: 3D プリント構造物への応用とは？  
問3: CFRP への応用とは？  
問4: 自然言語解析のMI への応用とは？

第9章 MIの動向・課題  
問1: 現状・最新動向と技術課題・有望分野は？  
問2: 今後MI が活用されるための要件とは？  
問3: MI による活用成果の検証・評価法とは？  
問4: 開発者が解釈可能なMIとは？  
問5: MI の特許動向はどのような状況か？  
問6: MI の先端的な取り組みは？(その1)  
問7: MI の先端的な取り組みは？(その2)  
問8: 機械学習とロボット導入による取組とは？  
問9: 国の取り組み概要と今後の方向性とは？

### ★書籍申込書

FAX : 03-5740-8766、または、→<https://www.johokiko.co.jp> にて

※FAX番号はくれぐれもお間違えの無い様お願い致します。

### (書籍申し込み要領)

- ◎右記記入の上、FAXでお申込を承ります。
- ◎お申込書を確認次第、書籍、請求書および振込要領をお送りいたします。
- ◎未発刊の書籍をお申込の場合、申込書を確認次第、受領書をお送りいたします。発刊時に弊社より書籍、請求書および振込要領をご送付いたします(送料は弊社負担)
- ◎お支払いは請求日翌月末日までに、銀行振込にてお願いいたします。原則として領収証の発行はいたしません。
- ◎振り込み手数料はご負担ください。
- ★ <https://www.johokiko.co.jp/> の申込みフォームからも承ります！

書籍名 H P 【BC201201】		マテリアルズ・インフォマティクスQ&A集 書籍		冊数	___冊	※記入の無い場合は1冊
会社名						
所属部課・役職等						
申込者氏名			TEL		FAX	
E-MAIL			上司役職・氏名			
住所〒						
備考						
ご案内をご希望の場合は今後の案内方法にレ印を記入下さい(複数回答可) <input type="checkbox"/> e-mail <input type="checkbox"/> FAX <input type="checkbox"/> 郵送						

ご連絡頂いた、個人情報は弊社商品の受付・運用・商品発送・アフターサービスのため利用致します。今後のご案内希望の方には、その目的でも使用致します。今後のサービス向上のため「個人情報の取扱に関する契約」を締結した外部委託先へ、個人情報を委託する場合があります。個人情報に関するお問合せ先 [policy@johokiko.co.jp](mailto:policy@johokiko.co.jp)