

2020年度 マテリアルインフォマティクス特論 A (4074)

■ クラス基本情報

科目区分	専門科目	教職科目	理科
単位数	1	選択・必修・自由	選択
授業形態	講義	主な使用言語	日本語
開講時期	I	履修登録システム	使用する
履修登録期間	2020/04/13~2020/05/22	履修取消期限	2020/06/11

■ 教育プログラム別の履修区分

プログラム名	IS	CB	BS	BN	MS	CP	DS
履修区分	△	△	△	○	○	□	□
コア科目	-	-	-	-	-	C	C
履修方法	・修士論文研究又は特別課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から12単位以上履修すること。 ・課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から14単位以上履修すること。 ・コア科目の履修方法については、入学年次の教育課程表の(2)履修方法を参照すること。						

■ 授業科目概要

担当責任教員	畑中 美穂
担当教員	畑中美穂、宮尾知幸
教育目的/授業目標	マテリアルインフォマティクスに関する課題と専門知識を身に着けさせ、先端材料開発研究の現場で活用されつつある機械学習や網羅的解析の原理と実際を理解させることを目標とする。
授業概要/指導方針	マテリアルインフォマティクスの基礎となる計算化学の基盤を教授し、さらにデータ駆動型材料探索および機械学習による研究支援の方法論と現状を講義する。座学を基本とする。

■ 授業計画

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付 [時間]	担当教員	テーマ	内容
1	6/4 [4]	畑中美穂	マテリアルインフォマティクスの概念と要素技術	機械学習や深層学習・ビッグデータの活用等による新材料の開発を加速する方法論(マテリアルインフォマティクス:MI)が最近注目を集めている。MIに関する基盤概念と要素技術を概説する。
2	6/4 [5]	畑中美穂	分子構造の記述法(1)第一原理計算・量子化学計算	MIの導入には、学習に用いるデータが揃っていることが前提となる。マテリアルに関する情報として、実験結果や計算科学によるシミュレーション結果が用いられる。計算科学の要素技術の一つである第一原理計算・量子化学計算の基礎概念と課題を教授する。
3	6/18 [5]	宮尾知幸	分子構造の記述法(2)ケモインフォマティクスの方法論	コンピュータに分子構造を認識させるためには、化学者が用いる「構造式」ではなく、文字列や数字列に変換する必要がある。分子構造の表記するための様々な手法を紹介する。

4	6/25 [4]	宮尾知幸	分子構造の記述子を用いた構造の検索・構造物性相関	類似性検索や化合物をスクリーニングするために利用されるフィンガープリントを中心に、分子構造の表現方法(前回からの続き)ならびに機械学習の利用、定量的構造物性相関(活性相関)モデルを説明する。
5	6/25 [5]	畑中美穂	分子構造の予測方法	分子構造を予測する方法や、薬剤のスクリーニングを迅速に行う分子ドッキング法について論じる。また、分子構造を網羅的且つ自動的に探索するための様々な計算手法について紹介する。
6	7/2 [4]	畑中美穂	マテリアルズインフォマティクスの応用事例	MIの技術を取り入れた最近の事例を紹介し、機械学習を用いた材料探索の可能性について論じる。
7	7/16 [4]	宮尾知幸	実験計画法	効率的に実験を行うための手法の一つに、実験計画法がある。実験により有意な知見を得るために必要となる統計的な手続きや、できるだけ少ない実験回数で要求特性を満足する物質を製造するための手法として、ベイズ最適化を紹介する。
8	7/30 [4]	畑中美穂 (宮尾知幸)	講義の総括とQ&A	講義の総括ならびに、講義内容に関するQ&Aタイムとして、Webexに参加して質問に回答する。また、最終課題についても説明をする。 質問は基本的にはメールでの事前受付とするが、時間に余裕があれば当日も受け付ける。 ML address: materials-info2020@ms.naist.jp <質問する場合> メールに名前と質問事項(日英どちらでも可)を書いて、担当教員MLに送信。 受付期間は6/4~7/30とする。

■ 授業日程

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付	時間	講義室	備考
1	6/4	4	物質大講義室	
2	6/4	5	物質大講義室	
3	6/18	5	物質大講義室	
4	6/25	4	物質大講義室	
5	6/25	5	物質大講義室	
6	7/2	4	物質大講義室	
7	7/16	4	物質大講義室	
8	7/30	4	E311 (MS)	

■ テキスト・参考書

テキスト	特になし。(授業中に配布する資料を用いる。)
参考書	・"An Introduction to Chemoinformatics", A.R. Leach, V.J. Gillet, Springer ・"Introduction to Computational Chemistry", F. Jensen, Wiley

■ その他

履修条件	特になし
------	------

オフィスアワー	E-mailで連絡の上、日時を決める。(E-mail (宮尾): miyao@dsc.naist.jp)
成績評価の方法と基準	<ul style="list-style-type: none"> ・5段階(秀・優・良・可・不可)で評価する。 ・演習と最終レポートにより評価する。ただし、最終レポート65%、演習課題25%、授業への参加度10%とする。 ・マテリアルインフォマティクスの基本概念の理解、専門知識の習得を基準とする。
関連科目	特になし
関連学位	工学、理学、バイオサイエンス。
注意事項	特になし

2020年度 マテリアルインフォマティクス特論 B (4074)

■ クラス基本情報

科目区分	専門科目	教職科目	理科
単位数	1	選択・必修・自由	選択
授業形態	講義	主な使用言語	英語
開講時期	本年度不開講	履修登録システム	【使用しない】
履修登録期間	—	履修取消期限	—

■ 教育プログラム別の履修区分

プログラム名	IS	CB	BS	BN	MS	CP	DS
履修区分	△	△	△	○	○	□	□
コア科目	—	—	—	—	—	C	C
履修方法	・修士論文研究又は特別課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から12単位以上履修すること。 ・課題研究を履修する場合は、基盤科目及び専門科目から14単位以上履修すること。 ・コア科目の履修方法については、入学年次の教育課程表の(2)履修方法を参照すること。						

■ 授業科目概要

担当責任教員	畑中 美穂
担当教員	畑中美穂、河合壯、宮尾知幸
教育目的／授業目標	マテリアルインフォマティクスに関する課題と専門知識を身に付けさせ、先端材料開発研究の現場で活用されつつある機械学習や網羅的解析の原理と実際を理解させることを目標とする。
授業概要／指導方針	マテリアルインフォマティクスの基礎となる計算化学の基盤を教授し、さらにデータ駆動型材料探索および機械学習による研究支援の方法論と現状を講義する。

■ 授業計画

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付 [時間]	担当教員	テーマ	内容
1	—	—	マテリアルインフォマティクスの概念と要素技術 (畑中)	機械学習や深層学習・ビッグデータの活用等による新材料の開発を加速する方法論(マテリアルズインフォマティクス)が最近注目を集めている。マテリアルズインフォマティクスに関する基盤概念と要素技術を概説する。
2	—	—	分子構造の記述法 (宮尾)	コンピュータに分子構造を認識させるためには、化学者が用いる「構造式」ではなく、文字列や数字列に変換する必要がある。分子構造の表記するための様々な手法を紹介する。
3	—	—	分子構造の記述法(2) (宮尾)	類似性検索や化合物をスクリーニングするために利用されるフィンガープリントを中心に、分子構造の表現方法(前回からの続き)ならびに機械学習の利用、定量的構造物性相関(活性相関)モデルを説明する。

4	—	—	第一原理計算・量子化学計算の基礎 (畑中)	マテリアルズインフォマティクスの導入には、学習に用いるデータが揃っていることが前提となる。マテリアルに関する情報として、実験結果や計算科学によるシミュレーション結果が用いられる。計算科学の要素技術の一つである第一原理計算・量子化学計算の基礎概念と課題を教授する。
5	—	—	分子構造の予測方法 (畑中)	分子構造を予測する方法や、薬剤のスクリーニングを迅速に行う分子ドッキング法について論じる。また、分子構造を網羅的且つ自動的に探索するための様々な計算手法について紹介する。
6	—	—	実験計画法 (宮尾)	効率的に実験を行うための手法として、実験計画法は開発された。実験により有意な知見を得るために必要となる統計的な手続きや、できるだけ少ない実験回数で要求特性を満足する物質を製造するための手法として、ベイズ最適化を紹介する。
7	—	—	マテリアルズインフォマティクスの応用事例 (畑中)	マテリアルズインフォマティクスの技術を取り入れた最近の事例を紹介し、機械学習を用いた材料探索の可能性について論じる。
8	—	—	講義の総括と試験	本講義の総括と総まとめテストを行う。

■ 授業日程

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

表示可能なデータがありません。

■ テキスト・参考書

テキスト	配布資料
参考書	"Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods", T. Engel, J. Gasteiger, Wiley-VCH "Introduction to Computational Chemistry", F. Jensen, Wiley

■ その他

履修条件	特になし
オフィスアワー	Eメールで連絡の上、日時を決める
成績評価の方法と基準	・5段階(秀・優・良・可・不可)で評価する。 ・演習と試験により評価する。 ・マテリアルインフォマティクスの基本概念の理解、専門知識の習得を基準とする。
関連科目	特になし
関連学位	理学、工学、バイオサイエンス
注意事項	特になし