



Pythonによるマテリアルズ・ インフォマティクス連続ハンズオン



講師

木野 日織(統計数理研究所 教授
/NIMS 特別研究員)**対象者**

- 機械学習およびマテリアルズインフォマティクスの基礎を学びたい方
- Python の基本文法を理解しており、これから scikit-learn や PyTorch を用いて機械学習を実践したい方
- 大規模言語モデル (LLM) を活用して Python による可視化や機械学習コードを効率的に書きたい方

質問受付期間2026. **8. 1** [土] - **31** [月]**【講義内容】**

座学編：MI による材料開発を行うために必要なデータ解析の知識について解説

基礎編：Pythonでスクリプトを動かしながら

- 回帰
- 次元圧縮
- 分類
- クラスタリング
- 大規模言語モデル (LLM) による知識獲得・コード生成

応用編：具体的な物質例を用いたデータ解析手法

- 次元圧縮を併用したクラスタリング
- トモグラフィ像の復元
- 説明変数の重要性評価
- モデル全探索による回帰モデル評価
- ベイズ最適化
- 次元圧縮を利用した推薦システム
- 表現学習と生成モデル (オートエンコーダー、変分オートエンコーダー (VAE)、

Diffusion Model、Flow Matching)

※スクリプトを動作させるにはJupyter Lab、scikit-learn、PyTorchなどのPython3環境のパッケージが必要です。

※免責事項：本セミナーのスクリプトやデータを用いて得られた結果について、主催者ならびに講師は一切の責任を持ちません。

【参加形式】 オンラインによる自己学習セミナーです。

1. 事前に参加登録が必要です。

右記QRコードにアクセスして参加登録をお願いします。

参加登録締切日：2026年8月31日(月)

2. 参加登録者に動画等が含まれたレポジトリを送付します。

動画公開：8月1日(土)開始予定

*公開終了日は設けておりませんが、9/1以降に予告なく終了することもあります。

3. 2のレポジトリで自己学習中に質問がある方は、2で送付された

質問フォームより質問をお寄せください。

質問受付期間：8月1日(土)から8月31日(月)まで

参加登録フォーム



詳細は検索エンジンで検索

DxMT ハンズオン Python