

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

(NIMS 主幹研究員)

対象：マテリアルズ・インフォマティクス初心者、
Pythonを使いたい方

質問受付期間

2025. **3. 1** [Sat] - **31** [Mon]

以下の通りセミナー開催の告知をいたします。

有意義な内容になっておりますので、ぜひ奮ってご参加下さい。

オンラインによる自己学習セミナーです。

【講義内容】

マテリアルズ・インフォマティクス基礎から応用

チュートリアル内容（予定）※内容は予告なく変更する場合があります。

データ解析学基礎：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：実際にPython スクリプトを動かして基礎的なデータ解析学手法

（回帰、次元圧縮、分類、クラスタリング、LLMによる知識獲得、コード生成を解説）

応用編：以下の項目について物質例も用いて、実際にコードを動かしてデータ解析学手法を解説

- ・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

※各自のPCでスクリプトを動作Python3環境下でのjupyter lab、scikit-learnなどのパッケージのインストールをお願いします。

※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】

1. 事前に参加登録が必要です。

右記QRコードもしくはURL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：2025年3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：3月1日(土)開始予定

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：3月1日(土)から3月31日(月)まで

4. 回答は動画もしくはスライドで受講登録者全員に送付します。

参加登録フォーム



<https://forms.office.com/r/2DAUxmSZ1g>



セミナーURL <https://dxmt.mext.go.jp/news/2780> (DxMTポータルサイト)

お問い合わせ先：DxMTデータ連携部会運営室 (dxmt_office@ml.nims.go.jp)