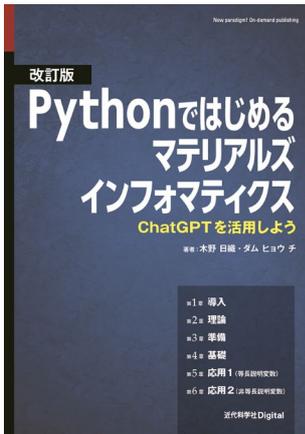


ChatGPT を使ってマテリアルズインフォマティクスを実践しよう！
『改訂版 Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス
—ChatGPT を活用しよう—』
発行

インプレスグループで理工学分野の専門書出版事業を手掛ける株式会社近代科学社は、2025 年 1 月 31 日に、近代科学社 Digital レーベル(※)より、『改訂版 Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス』(著者:木野 日織, ダム ヒョウ チ)を発行いたしました。

(※近代科学社 Digital とは : 近代科学社が著者とプロジェクト方式で協業する、デジタルを駆使したオンデマンド型の出版レーベルです、詳細はこちらもご覧ください、<https://www.kindakagaku.co.jp/kdd/scheme/>)



●書誌情報

【書名】改訂版 Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス ChatGPT を活用しよう

【著者】木野 日織, ダム ヒョウ チ

【仕様】B5 判・並製・印刷版モノクロ/電子版一部カラー・本文 260 頁

【印刷版基準価格】3,600 円(税抜)

【電子版基準価格】3,600 円(税抜)

【ISBN】(カバー付き単行本)978-4-7649-0735-5 C3004

【ISBN】(POD)978-4-7649-6100-5 C3004

【商品 URL】https://www.kindakagaku.co.jp/book_list/detail/9784764961005/

●内容紹介

本書では Python を使ったマテリアルズインフォマティクスの手法として、物質科学に関するデータ(特に無機物質)を主に扱い、データ解析学の基礎から非等長説明変数を用いるアルゴリズムまでをまとめています。

物質科学の世界では物質ごとに収集できる変数の数が異なる(非等長説明変数)場合が多く、実践でも苦労することを考慮して対応策を詳述。改訂にあたっては「ChatGPT」を使った Python コード作成の補助、データ解析の構築方法などを各章に取り入れることで、Python を扱ったことがない初学者にとっても挑戦しやすい内容になっています。

●著者紹介

木野日織(きのひおり)

1991 年 東京大学理学部物理学科卒

1996 年 東京大学大学院理学系研究科博士課程卒(理学博士)

1996 年 東京大学物性研究所物性理論部門助手などを経て 2002 年から(国)物質・材料研究機構に勤務する。
2015 年からの国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)イノベーションハブ構築支援事業の一環として(国)物質・材料研究機構に情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI2I) 発足時からデータマイニングを行う。データ駆動 AI では物性物理の知識を活かした説明・解釈可能な AI 技術、第一原理計算によるデータ生成、そのための知識駆動 AI 技術などに興味を持つ。

DAM Hieu-Chi (だむ ひょう ち)

1998 年 東京大学理学部物理学科卒

2003 年 北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科物性科学専攻博士号

2005 年 10 月から北陸先端科学技術大学院大学知識科学研究科講師。2011 年 4 月から同テニュア付准教授。

2020 年 10 月から北陸先端科学技術大学院大学知識科学系教授。

学位は材料科学で取得。2005 年から材料科学とデータマイニングの融合に身を投じている。専門分野は材料科学、知識科学、計算材料科学、データサイエンス、マテリアルズインフォマティクス。データ駆動型アプローチを用いた知識抽出など、証拠理論を用いた類似度評価に興味があり、材料科学研究のための説明・解釈可能な AI 技術の開発に取り組む。

●目次

第1章 導入

- 1.1 本書の目的その 1
- 1.2 本書の目的その 2
- 1.3 本書の目的その 3
- 1.4 本書の目的その 4

第2章 理論

- 2.1 予測問題
- 2.2 データ解析学手法の紹介
- 2.3 回帰・分類モデルの性能評価
- 2.4 データ解析学手法の四過程
- 2.5 説明変数の特徴の見い出し方
- 2.6 予測問題(再び)
- 2.7 新帰納法の世界
- 2.8 LLM の利用
- 2.9 LLM を用いた知識の取得例
- 2.10 LLM を用いたコード生成

第3章 準備

- 3.1 可視化可能な Python インタラクティブ環境
- 3.2 Python 環境のインストール
- 3.3 サンプルコードとデータファイルの取得とインストール
- 3.4 物質データ
- 3.5 データ解析の事前準備

第4章 基礎

- 4.1 はじめに
- 4.2 回帰

- 4.3 次元圧縮
- 4.4 分類
- 4.5 クラスタリング

第5章 応用1(等長説明変数)

- 5.1 はじめに
- 5.2 次元圧縮を併用したクラスタリング
- 5.3 トモグラフ像の復元
- 5.4 説明変数重要性の定量評価
- 5.5 モデル全探索による回帰モデル評価
- 5.6 ベイズ最適化
- 5.7 次元圧縮を利用した推薦システム
- 5.8 画像のノイズ削除

第6章 応用2(非等長説明変数)

- 6.1 はじめに
- 6.2 頻出パターンマイニング
- 6.3 証拠理論

付録A

- A.1 LLM に対する質問事項例
- A.2 Jupyter Notebook/Lab での Notebook ファイルの Python ファイルへの変換方法

【近代科学社 Digital】 <https://www.kindaikagaku.co.jp/kdd/index.htm>

近代科学社 Digital は、株式会社近代科学社が推進する 21 世紀型の理工系出版レーベルです。デジタルパワーを積極活用することで、オンデマンド型のスピーディで持続可能な出版モデルを提案します。

【株式会社 近代科学社】 <https://www.kindaikagaku.co.jp/>

株式会社近代科学社（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：大塚浩昭）は、1959 年創立。数学・数理科学・情報科学・情報工学を基軸とする学術専門書や、理工学系の大学向け教科書等、理工学専門分野を広くカバーする出版事業を展開しています。自然科学の基礎的な知識に留まらず、その高度な活用が要求される現代のニーズに応えるべく、古典から最新の学際分野まで幅広く扱っています。また、主要学会・協会や著名研究機関と連携し、世界標準となる学問レベルを追求しています。

【インプレスグループ】 <https://www.impressholdings.com/>

株式会社インプレスホールディングス（本社：東京都千代田区、代表取締役：松本大輔、証券コード：東証スタンダード市場 9479）を持株会社とするメディアグループ。「IT」「音楽」「デザイン」「山岳・自然」「航空・鉄道」「モバイルサービス」「学術・理工学」を主要テーマに専門性の高いメディア&サービスおよびソリューション事業を展開しています。さらに、コンテンツビジネスのプラットフォーム開発・運営も手がけています。

【お問い合わせ先】

株式会社近代科学社

TEL:03-6837-4828

電子メール: kdd-qa@kindaikagaku.co.jp