

具体的な事例からマテリアルズインフォマティクスの最先端を学ぶ！

事例でわかる マテリアルズインフォマティクス

— 深層学習ケーススタディ —

著者：船津 公人・井上 貴央

仕様：A5判・並製・モノクロ・本文 108 頁

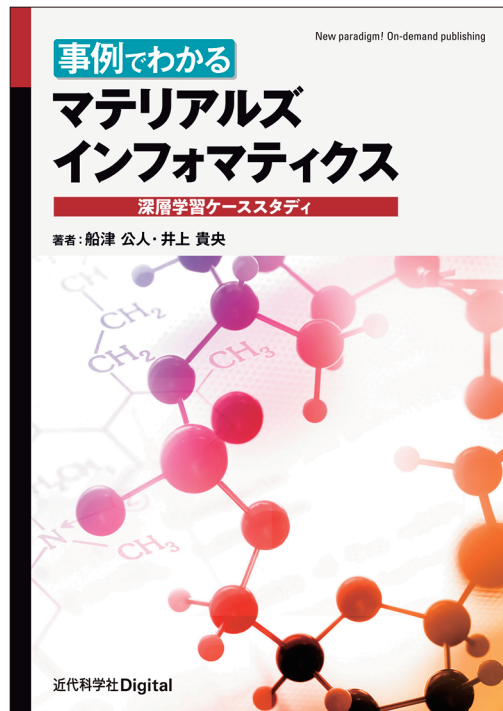
印刷版・電子版価格：2,100 円(税抜)

ISBN(カバー付単行本)：978-4-7649-0659-4 C3043

ISBN(POD)：978-4-7649-6049-7 C3043

発行：近代科学社 Digital

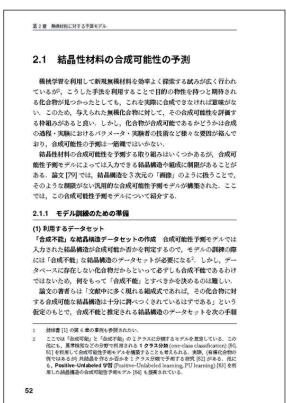
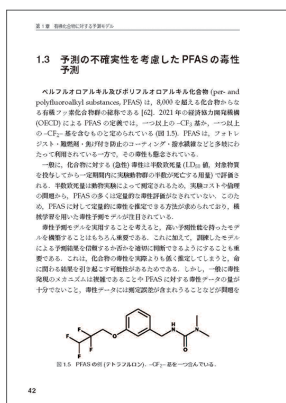
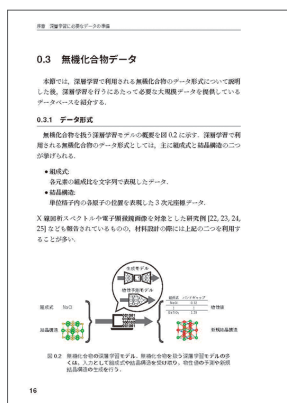
発売：近代科学社



内容紹介

深層学習を用いたマテリアルズインフォマティクスの実用的専門書第2弾。本書では厳選した事例を対象に、深層学習を有機化学・無機化学分野のデータに適用する場合のポイントについて解説しています。

序章では『詳解 マテリアルズインフォマティクス』でも掲載したデータセットについて詳述し、第1章から有機化合物に対する予測モデル構築、第2章で無機材料に対する予測モデル構築、第3章で生成モデルを活用した材料・医薬品の設計についてケーススタディとして紹介。具体的なテクニックを読み解くことで、材料開発における深層学習の活用を更に飛躍させることができる1冊です。



▶ 序章ではデータセットについて詳述しています。

▶ 第1章以降は、厳選した事例を対象に具体的なテクニックを紹介しています。

全国の書店・ネット書店にてお求めいただけます。お取り扱い店は以下のウェブページをご覧ください。

https://www.kindaikagaku.co.jp/book_list/detail/9784764906594/



近代科学社 Digital

<https://www.kindaikagaku.co.jp/kdd/>

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。

お問い合わせ先

株式会社近代科学社
〒101-0051 東京都千代田区神田神保町 1-105
神保町三井ビルディング
電子メール：contact@kindaikagaku.co.jp

著者紹介

船津 公人 (ふなつ きみと)

1978年 九州大学理学部化学科卒
1983年 九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了(理学博士)
1984年 豊橋技術科学大学物質工学系助手、1992年 同知知識情報工学系助教授
2004年 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授
2011年 ストラスブール大学招聘教授
2017年10月 奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター 教授を兼務
2021年 3月 東京大学定年退職
2021年 4月 奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター 特任教授
2021年 6月 東京大学名誉教授
2022年 奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター長、特任教授

学位は有機反応機構研究で取得。専門分野はケモインフォマティクス。1984年からケモインフォマティクスの分野に身を投じている。ケモインフォマティクス利用による分子・薬物設計、材料設計(プロセス条件も含む)、構造解析、合成経路設計、化学プラントなどを対象とした監視と制御のためのソフトセンサー開発に取り組む。

著書に『コンピュータ・ケミストリーシリーズ1 CHEMICS—コンピュータによる構造解析—』(共著、共立出版)、『コンピュータ・ケミストリーシリーズ2 AIPHOS—コンピュータによる有機合成経路探索—』(共著、共立出版)、『ソフトセンサー入門 基礎から実用的研究例まで』(共著、コロナ社)、『ケモインフォマティクス 予測と設計のための化学情報学』(共訳、丸善・Wiley)、『実践マテリアルズインフォマティクス—Pythonによる材料設計のための機械学習—』(共著、近代科学社)、『詳解マテリアルズインフォマティクス有機・無機化学のための深層学習—』(共著、近代科学社 Digital)など。

日本科学技術情報センター丹羽賞・学術賞(1988年)、日本コンピュータ化学会学会賞(2003年)、2019年8月アメリカ化学会より、当該分野のノーベル賞とされる Herman Skolnik 賞を受賞。2021年3月日本化学会学術賞「データ駆動型化学の開拓」を受賞。

井上 貴央 (いのうえ たかひろ)

2017年 京都大学工学部情報学科卒業
2022年 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻博士課程修了、博士(工学)
2022年4月 株式会社 Elix リサーチエンジニア(現職)

学部時代は離散数理を専門とする研究室に所属し、分子グラフの数え上げアルゴリズムに関する研究に従事。修士課程から分野をケモインフォマティクスに移し、小規模化学データを利用した分子グラフ構造生成に関する研究に従事。現在は、株式会社 Elix で AI 創業に携わっている。

著書に『詳解マテリアルズインフォマティクス有機・無機化学のための深層学習—』(共著、近代科学社 Digital)がある。

目次

序章 深層学習に必要なデータの準備

- 0.1 化学データに対する機械学習
- 0.2 有機化合物データ
 - 0.2.1 データ形式
 - 0.2.2 データベースの紹介
- 0.3 無機化合物データ
 - 0.3.1 データ形式
 - 0.3.2 データベースの紹介

- 2.1.3 性能評価
- 2.2 材料の局所構造の安定性予測と新規材料の予想
 - 2.2.1 モデル訓練のための準備
 - 2.2.2 利用する手法
 - 2.2.3 性能評価
- 2.3 合金のガラス形成能の予測
 - 2.3.1 モデル訓練のための準備
 - 2.3.2 利用する手法
 - 2.3.3 性能評価

第1章 有機化合物に対する予測モデル

- 1.1 マルチタスク学習を利用したポリマーの物性予測
 - 1.1.1 モデル訓練のための準備
 - 1.1.2 利用する手法
 - 1.1.3 性能評価
- 1.2 物理情報付きニューラルネットワークの転移学習を利用したポリマーの物性予測
 - 1.2.1 モデル訓練のための準備
 - 1.2.2 利用する手法
 - 1.2.3 性能評価
- 1.3 予測の不確実性を考慮した PFAS の毒性予測
 - 1.3.1 モデル訓練のための準備
 - 1.3.2 利用する手法
 - 1.3.3 性能評価

第4章 生成モデルを活用した材料・医薬品の設計

- 3.1 フラグメント構造生成器を利用したリードジェネレーション
 - 3.1.1 モデル訓練のための準備
 - 3.1.2 利用する手法
 - 3.1.3 性能評価
- 3.2 半教師あり学習を利用した分子構造生成
 - 3.2.1 モデル訓練のための準備
 - 3.2.2 利用する手法
 - 3.2.3 性能評価
- 3.3 変分オートエンコーダを用いた四元系複合アニオン化合物の発見
 - 3.3.1 モデル訓練のための準備
 - 3.3.2 利用する手法
 - 3.3.3 性能評価

第2章 無機材料に対する予測モデル

- 2.1 結晶性材料の合成可能性の予測
 - 2.1.1 モデル訓練のための準備
 - 2.1.2 利用する

付録