

電池・半導体・高分子・医薬品など材料開発の最前線！
AI・機械学習等データ科学が物質・材料研究にもたらすものとは？
各種企業、大学、研究開発法人の第一線で活躍する執筆陣が送る必読の書！

マテリアルズ・インフォマティクス

～データ科学と計算・実験の融合による材料開発～

●発行 2018年3月 ●定価 54,000円 + 税 ●体裁 B5判ソフトカバー 237ページ

★今までの材料探索とはどう異なるのか？何ができるのか？どうやればいいのか？
豊富な視点、豊富な具体的事例を網羅し活用のヒントを提示！

★機械学習、ベイズ最適化、スパースモデリング、第一原理計算やシミュレーション技術等
基盤となるデータ科学、計算化学の基礎知識をしっかりと理解

★記述子の選択法は？各種スクリーニング技術は？データベースの種類は？
材料開発にデータ科学を活用する場合の具体的内容も幅広く網羅

★国内外の研究の進展状況は？今後の材料開発研究に必須の最新動向を掲載
特許戦略等今まで触れられなかったビジネス展開にも言及！新潮流をしっかりと把握しよう！

★注目のリチウムイオン電池材料への応用から半導体、電子部品、高分子、
バイオマテリアル、医薬品など有機無機それぞれの材料探索への応用事例を幅広く掲載

☆☆内容の詳細は裏面に掲載しております！ご確認ください☆☆

HPでも詳細内容を掲載。お申込みも簡単！「情報機構 BC180301」と検索！

執筆者一覧【敬称略・順不同】

- 科学技術振興機構 島津 博基
- 奈良先端科学技術大学院大学 畑中 美穂
- 産業技術総合研究所 永田 賢二
- 東京工業大学 大場 史康
- 東ソー株式会社 坂下 竜一
- 株式会社リガク 小澤 哲也

- 物質・材料研究機構 伊藤 聡
- 東京大学 船津 公人
- 名古屋大学 足立 吉隆
- イノベンティア東京事務所 松下 外
- 大阪大学 佐伯 昭紀
- 物質・材料研究機構 野田 祐輔
- 名古屋工業大学 中山 将伸
- 富士フイルム株式会社 奥野 幸洋

- 富士フイルム株式会社 後瀉 敬介
- 物質・材料研究機構 館山 佳尚
- 物質・材料研究機構 袖山 慶太郎
- 日本電気株式会社 岩崎 悠真
- 株式会社日立製作所 岩崎 富生
- 東レ株式会社 茂本 勇
- 東京工業大学 林 智広
- 理化学研究所 種石 慶

★書籍申込書

FAX : 03-5740-8766、または、→<http://www.johokiko.co.jp> にて
※FAX番号はくれぐれお間違えの無い様お願い致します。

(書籍申し込み要領)

- ◎右記記入の上、FAXでお申込を承ります。
- ◎お申込書を確認次第、書籍、請求書および振込要領をお送りいたします。
- ◎未発刊の書籍をお申込の場合、申込書を確認次第、受領書をお送りいたします。発刊時に弊社より書籍、請求書および振込要領をご送付いたします(送料は弊社負担)
- ◎お支払いは請求日翌月末日までに、銀行振込にてお願いいたします。原則として領収証の発行はいたしません。
- ◎振り込み手数料はご負担ください。
- ★ <http://www.johokiko.co.jp/> の申込みフォームからも承ります！

書籍名 HP【BC180301】マテリアルズ・インフォマティクス 書籍		冊数	___冊	※記入の無い場合は1冊
会社名				
所属部課・役職等				
申込者氏名		TEL	FAX	
E-MAIL			上司役職・氏名	
住所〒				
備考				
ご案内をご希望の場合は今後の案内方法にシ印を記入下さい(複数回答可) <input type="checkbox"/> e-mail <input type="checkbox"/> FAX <input type="checkbox"/> 郵送				

ご連絡頂いた、個人情報は弊社商品の受付・運用・商品発送・アフターサービスのため利用致します。今後のご案内希望の方には、その目的でも使用致します。今後のサービス向上のため「個人情報の取扱に関する契約」を締結した外部委託先へ、個人情報を委託する場合があります。個人情報に関するお問合せ先 policy@johokiko.co.jp

構成及び内容

第1章 マテリアルズ・インフォマティクスを取り巻く動き 1. 国内外の政策動向 2. データプラットフォームの動向 3. 研究開発動向(事例) / 3. 1 新物質探索 3. 2 ミクロな微細構造(ナノ構造)と材料物性の相関 3. 3 結晶構造から材料組織(マクロ構造)までのマルチスケール統合 3. 4 計測インフォマティクス 4. 企業の動向	第4章 実際の運用ポイント 第1節 マテリアルズ・インフォマティクスの手法 1. インフォマティクスの触媒設計への応用 2. プロセスも含めたポリマー材料設計戦略 3. プロセス・インフォマティクスの展開 4. 少ない実験データから出発して目標物性を達成するには 第2節 マテリアルズ・インフォマティクスにおける識別器選択、ハイパーパラメータのベイズ的最適化とスパース学習の重要性 1. 識別器 1. 1 ニューラルネットワーク(ANN) 1. 2 サポートベクター回帰(SVR) 1. 3 ランダムフォレスト(rf) 1. 4 識別器の精度の比較 1. 5 ハイパーパラメータの最適化(グリッドサーチ vs. ベイズ的最適化) 1. 6 アンサンブル学習の重要性 2. スパース学習の一環としての記述子の選択 2. 1 赤池情報量規準(AIC) 2. 2 lasso 2. 3 その他の記述子選択手法 第3節 マテリアルズ・インフォマティクスと特許戦略 1. 本節の検討対象 2. 特許とは何か 2. 1 特許制度とは 2. 2 特許権の効力 積極的効力 / 消極的効力 3. マテリアルズ・インフォマティクスの特許戦略 3. 1 特許戦略とは 3. 2 特許化の対象 材料データセット / 解析手法 関数 / 新材料 3. 3 特許戦略を検討する際の考慮事項 特許化 / 秘匿化 特許化と秘匿化の選択の基準 3. 4 特許化と秘匿化の選択 解析手法 / 新材料	第4節 第一原理分子動力学計算によるリチウムイオン電池界面反応の解析 1. リチウムイオン電池内の電極界面での電解液・添加剤反応 2. 計算手法と計算モデル Blue-Moon アンサンブル法 / 計算モデル 3. 負極近傍での電解液・添加剤の化学反応計算 4. マテリアルズインフォマティクスへの期待 第5節 高精度ホワイトボックス型機械学習による熱電材料開発 1. 熱電材料 / 2. スピン熱電材料 3. マテリアルズ・インフォマティクスによるスピン熱電材料開発 3. 1 材料ビッグデータの作成/ 収集 3. 2 データの前処理 3. 3 機械学習による有望な記述子の作成/ 発見 3. 4 記述子による材料スクリーニング 3. 5 材料合成 第6節 電子部品・デバイス 1. 網羅的シミュレーションによる最適材料の設計 バリア金属の選定 / 添加元素の選定 2. 直交表を用いた最適材料の高効率設計 3. 応答曲面法を用いた関数化による最適材料設計 金属材料の設計 / 添加元素の選定 第7節 高分子材料への適用 1. 計算機シミュレーションによる高分子材料設計の歴史 1. 1 企業における高分子シミュレーションの拡がり 1. 2 高分子シミュレーションの難しさ 1. 3 分子シミュレーションによる高分子材料設計の戦略 1. 4 東レにおける分子シミュレーション活用事例 1. 5 代理指標による材料設計 2. マテリアルズ・インフォマティクス概要 2. 1 計算機による物性予測の枠組み 2. 2 海外の状況 2. 3 国内の状況 2. 4 MIを構成する要素 2. 5 MIの“成功”を支えているもの 3. 高分子材料設計へのMI活用に向けて 3. 1 高分子材料設計への適用の難しさ データ量 / 記述子 3. 2 高分子材料設計への適用に向けて 代理指標の活用/シミュレーションの活用 第8節 MIを用いたバイオマテリアルの設計の現状と今後の展開 1. バイオマテリアル研究の現状 2. 情報科学を利用したバイオマテリアルの研究における課題 3. 生体分子・細胞応答データのハイスループットな取得方法の現状 4. 生体分子・細胞の応答決定のメカニズム 第9節 医薬品 1. 探索の数理的枠組み 2. 新規医薬品の設計 3. 人工知能によるアプローチ
第2章 マテリアルズ・インフォマティクスの各要素 第1節 データの取り扱い 1. データベースの種類 2. データベースの効率的活用とデータの処理 3. データの作成・スクリーニング技術 第2節 統計・人工知能的技術 1. データ解析・機械学習の基礎 2. モデル選択手法 / 3. モデル選択の実例 3. 1 ベイズ推定 3. 2 ベイズ推定の適用結果の紹介 第3節 第一原理計算とマテリアルズ・インフォマティクス 1. 第一原理計算の理論的背景 2. 第一原理計算における近似と計算精度 3. 格子欠陥のモデリング 4. 計算結果のデータベース化	第3章 材料とインフォマティクス 第1節 材料のシミュレーションとインフォマティクス 1. ソフトマテリアルのインフォマティクスの課題とシミュレーション 2. ブロック共重合体の弾性率推算 2. 1 背景 2. 2 手法 一次構造の生成 / 散逸粒子動力学(DPD) 有限要素法(FEM) / 機械学習 2. 3 結果 / シミュレーション結果 入力データ表現の最適化 / 系の対称性の利用 各ファクターの感度の検証 ランダム生成組成の推算と実行速度 第2節 物性の計測とインフォマティクス 1. 材料開発における分析技術の役割について 思考(直感・経験則) / 実験(合成) 計算(シミュレーション) / 各過程のつながり 2. 分析技術の課題 2. 1 測定データの統合化 2. 2 測定データのシミュレーション機能 3. X線による分析技術の場合 3. 1 マルチプローブによるデータの統合 3. 2 測定データのシミュレーション技術 スクリーニングへの適用 3. 3 課題 第3節 新規材料の探索とインフォマティクス 1. 回帰解析 / 2. バーチャルスクリーニング 3. 効果的な探索	第5章 マテリアルズ・インフォマティクス適用事例と提案 第1節 新規化合物半導体の探索 1. 第一原理計算データベース内での物質探索 2. 新物質探索 第2節 有機半導体 1. 有機半導体の歴史と現状 2. 有機太陽電池材料の マテリアルズ・インフォマティクス 3. 有機EL・有機FET 材料のMI 第3節 データ科学と第一原理計算を活用した蓄電池用固体電解質の物性評価 1. 固体電解質の材料設計指針 2. データ科学を活用した固体電解質の電気化学的安定性の評価 2. 1 固体電解質中のリチウムイオン配列の最適化 2. 2 固体電解質の電気化学的安定性評価 2. 3 過剰リチウムに伴う固体電解質の還元分解反応式の予測

一部内容を簡略化しております。目次の完全版はHPをご参照ください！

「情報機構 BC180301」と検索！

URL: <http://www.johokiko.co.jp/publishing/BC180301.php>

・E-MAIL: ダイレクトメール等によるご案内希望の方は

…弊社HP (<http://www.johokiko.co.jp/>) 案内登録にてお受けしております。

★★★書籍の申込書・申込要領等は裏面にございます★★★

(株)情報機構 TEL:03-5740-8755 FAX:03-5740-8766 〒141-0032 品川区大崎3-6-4 トキワビル3階