

# マテリアルズインフォマティクス(MA3915L1)

担当教員：渡邊 聡 教授, 澁田 靖 教授

対象：第3学年	単位数：2.0	バイオ	環境・基盤	ナノ・機能
		限定	限定	限定

実施時期：S1S2 セメスター 火曜日 5 時限 場所：ECCS(大演習室 1)

## 講義目的

AI や機械学習に知られるデータサイエンス手法の習得は、これからの時代の工学の実験と理論の両面において必要とされる実践的な課題のひとつである。前半では、計算機演習を通じて代表的なプログラミング言語である Python の文法を初歩から学ぶとともに、表計算ソフト Excel の基礎知識を習得する。後半では、回帰分析や機械学習などの典型的な基礎問題を通じ、マテリアル工学におけるデータサイエンス・機械学習の活用法について理解することを目指す。

## 講義項目

1. イントロダクション
2. シミュレーションツールの基礎
  - 2.1 Python によるプログラミングの基礎
  - 2.2 Python による数値計算の基礎
  - 2.3 表計算ソフトの基礎知識
3. データサイエンスと機械学習の実習
  - 3.1 回帰分析と汎化問題
  - 3.2 パーセプトロン
  - 3.3 ロジスティック回帰
  - 3.4 クラスタリング
  - 3.5 ニューラルネットワーク

## 理解すべき事項

- Python によるプログラミングの基礎
- Python と表計算ソフトによるデータ処理
- データの可視化
- 代数方程式の数値解法の基礎
- 行列計算を用いた補間の基礎
- 数値積分・微分の基礎
- 機械学習の基礎
- ニューラルネットワークによる最適化

## 関連する講義

事前履修：なし

並行履修：なし

事後履修：マテリアルシミュレーション

参考書 (テキスト)：配付資料、「確かな力が身につく Python 「超」入門」(出版社:SB クリエイティブ)、「Python で始めるプログラミング入門」(コロナ社)、「IT エンジニアのための機械学習入門」(技術評論社)、「東京大学のデータサイエンティスト育成講座」(マイナビ出版)

参考書 (演習書)：

講義ノートのリンク先：ITC-LMS にアップロードする

成績評価：レポート

備考：