

はじめに

良い材料を早く創りたいので、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) を活用して” いる ”。このような声はもう珍しくありません。

MI ブームに端を発して、大学・企業ともに MI の活用検討が始められて既にある程度の期間が経過しました。すでに MI に取り組んでいる大学・企業からは MI 活用の成果が多く報告されており、MI は期待に応えられるということが共通理解になりつつあります。MI とは？有効なものなのか？が大勢を占めていた数年前とは隔世の感があります。

本書を手にとっていただいた方は、材料開発者として、あるいは材料開発を支援するデータ分析者として「MI を活用して材料開発を加速したい。」という気持ちだと考えています。

著者の高原と福岡は多くの民間企業などに対して MI 活用の支援をさせて頂いています。学生時代には二人とも材料工学を専攻し、それぞれ別メーカーで MI を活用した材料開発業務を経て、現在はコンサルティング・データ分析・講演・教育・データ活用システムの提供といった様々な立場・内容で活動を行っています。

MI の普及に伴い、様々な書籍やセミナーが発刊・実施されています。しかしそれは、MI とは？という概論か、整形されたデータに対して分析アルゴリズムを適用するものが主と感じています。

材料開発の実務の中で MI を活用するには、さらに踏み込んだ情報が必要です。

例えば、データの整形方法。MI に限らず機械学習・データ分析の入門書では分析可能な形に整形されたデータから分析がスタートします。一方で、MI が普及していない材料開発の現場では、データ分析フレンドリーな形でデータが蓄積されていません。そのため、そのデータを分析可能にする手順が分からず MI の活用を断念してしまうことがあります。

次にデータや分析結果の見方という観点。本書執筆の時点では、AI にデータを丸ごと投げ込み、出てきた結果をそのまま実験すればより良い材料が出来るということは、ほとんどの場合ありません。手持ちのデータのどのような点に着目し、データ分析を適用するか。出てきた分析結果をどのように材料開発の加速に役立てていくか。こういったノウハウが必要になります。

著者らは、様々な材料系 (有機材料、無機材料、コンポジット材料、・・・etc) ・データ形式 (テーブルデータ、画像データ、テキストデータ、材料構造データ、・・・etc) を扱う MI プロジェクトの実施経験の中で、開発する材料を問わず共通的に有用なノウハウを蓄積してきました。本書籍では、その

内容をお伝えできればと思います。

本書では、MI とは？からはじまり、材料開発の実務でよくある未整形のデータから分析するまでの流れと、分析結果の材料開発への役立て方、そして読者の方が今後さらに分析力を向上させるための指針を示します。

こうした内容をまとめ、材料開発の中で MI を活用するときのお供となることを目指して、本書を “ハンドブック” と名付けています。

MI の知識ゼロから自分の材料開発データに適用できるように MI の力を身につけてほしいと考えています。

【本書の対象読者】

本書は、次のような読者を対象にしています。

- ・これから MI とは何かを学びたい人
- ・機械学習や MI に入門してみたが、実際に自分の材料開発に適用できておらず悩んでいる人

このような読者が、MI の知識ゼロから自分の材料開発データに適用できるようになり、入門以後のスキルアップの道筋に目星がつくようになるまでを目指しています。ただし、本書はプログラミングの入門書ではないため、コードを書籍の中で丁寧に追って解説することはしません。また、機械学習アルゴリズム等の数式についてもほとんど触れません。プログラミングが分からずとも、数学が苦手でも MI とはなにか？何をしているのかの雰囲気がつかめることを優先しているためです。本書で示す分析例を実行できる分析コードとして Python で作成したものを GitHub 上に公開しています。コード中に補足解説も行っているため、興味がある方は次のリンクにアクセスして内容を確認して下さい。ただし、Github 上では、コードを動作させることができないため、入出力の確認のみとなります。

コードを実際に動かしてみたい方は GitHub 上に公開しているリンクから Google Colab にアクセスいただき Google Colab 上で動作を試みてください。また、Github 上では、コードの出力結果が一部確認できません。こちらのコードについても Google Colab で内容を確認してください。Google Colab の使い方は GitHub 上に記載しています。

GitHub Link: <https://github.com/mipypf/practical-mi-guide>