



# Pythonによるマテリアルズ・ インフォマティクス連続ハンズオン



講師

木野 日織

(NIMS 特別研究員)

対象：マテリアルズ・インフォマティクス初心者、  
Pythonを使いたい方

質問受付期間

2025. **9. 1** [月] - **30** [火]

## 【チュートリアル内容】

座学編：MI による材料開発を行うために必要なデータ解析の知識について解説

基礎編：Pythonでスクリプトを動かしながら

- ・ 回帰
- ・ 次元圧縮
- ・ 分類
- ・ クラスタリング
- ・ 大規模言語モデル（LLM）による知識獲得・コード生成

応用編：具体的な物質例を用いたデータ解析学手法

- ・ 次元圧縮を併用したクラスタリング
- ・ トモグラフィ像の復元
- ・ 説明変数の重要性評価
- ・ モデル全探索による回帰モデル評価
- ・ ベイズ最適化
- ・ 次元圧縮を利用した推薦システム
- ・ LLMによるニューラルネットワークモデル手法の学習（オートエンコーダー，VAE，GAN，diffusion model）

※スクリプトを動作させるにはJupyter Lab、scikit-learn、PyTorchなどのPython3環境のパッケージが必要です。

※免責事項：本セミナーのスクリプトやデータを用いて得られた結果について、主催者ならびに講師は一切の責任を持ちません。

**【参加形式】** オンラインによる自己学習セミナーです。

1. 事前に参加登録が必要です。  
右記QRコードにアクセスして参加登録をお願いします。  
参加登録締切日：2025年8月31日(日)  
9月30日まで登録可能ですが、質問期間は9月30日までです。
2. 参加登録者に動画等が含まれたレポジトリを送付します。
3. 2のレポジトリで自己学習中に質問がある方は、2で送付された質問フォームより質問をお寄せください。  
質問受付期間：9月1日(月)から9月30日(火)まで

参加登録フォーム



詳細は検索エンジンで検索

DxMT ハンズオン python

お問い合わせ先：DxMTデータ連携部会運営室 (dxmt\_office@ml.nims.go.jp)