

生成AIとToyプログラムで理解する バンド理論・データ解析

主催 D²MatE

共催 元素戦略MDX研究センター、フロンティア材料研究所、六研出島コンソーシアム

協賛 物質・情報卓越コース、物質理工学院、VI Materials Positive Society

お問い合わせ kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp

講師: 神谷 利夫 (総合研究院 元素戦略MDX研究センター／フロンティア材料研究所)

Web : <http://d2mate.mdexes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=tutorial&id=2026tutorialcourse>

参加方法: (1) https://zoom.us/webinar/register/WN_W_rIDmSsQUWpXHxe7kWqbQ#/registration
で登録してください。チュートリアル各回ごとに開催案内が届きます
(2) 開催案内で、該当チュートリアルの参加登録方法をご連絡します

開催方法: Zoom (参加登録者にご連絡します)

開催日時: 開催案内および上記Webでご連絡します。第1回: 10/30 15:00-17:00

参加費 : 無料

コース概要:

本チュートリアルでは、バンド計算とデータ解析の基礎を、簡単なToyプログラムを動かしながら理解し、材料研究に利用できるようになることを目標とします。これらの原理をプログラムを通して理解するため、最初に、生成AIの支援を利用して解析・シミュレーションプログラムやToyプログラムを作成する方法を学びます。あわせて、計算結果を研究に利用するうえで必要となる、プログラムの動作と信頼性を検証する手順を解説します。

01

生成AIプログラミング

信頼できるプログラムを作る技術

- 生成AI支援で作る解析プログラム
- 科学技術プログラムの検証と改善、チューニング

02

バンド理論・第一原理計算

物理モデルを理解し、計算する技術

- バンド理論の基礎
- Toyプログラムで理解するバンド計算
- 第一原理バンド計算で何がわかるか

03

データ解析

結果から正しく情報を抽出・推定する技術

- 最小二乗法の基礎と不確かさ
- ベイズ回帰と不確かさ評価
- モンテカルロ法、情報エントロピーとベイズ自由エネルギー