

2024年3月5日  
大学連携研究設備ネットワーク

## Python を用いたケモメトリックス演習講習会 I 報告書

【概要】分光装置等から得られるデータセットを Python で解析処理、可視化する手法を実際に演習で取得する。

【開催日時】 2024年3月1日(金)、10時00分～16時00分

【場所】 分子科学研究所研究棟 301 講義室

【講師】 森田成昭 大阪電気通信大学教授

【参加対象者】 大学等公的機関で分析装置の維持管理を行っている方で、データ処理を行おうと考えている方。

・講習会場にノートパソコンを持参でき、そのパソコンに Jupyter Notebook および anaconda がインストールされており、プログラムを実行できること。（絶対条件）

・Python プログラミング初級～中級者（参考書の例題を打ち込んで動作確認している程度でも O.K.）

・Numpy, Pandas, Matplotlib を使用したことがあること。（完全に理解できなくても O.K.）

・テキストとして使用する「Python で始める機器分析データの解析とケモメトリックス」を購入持参できること。（1章から4章までを事前に予習のこと）

【参加者数】 現地参加 10名

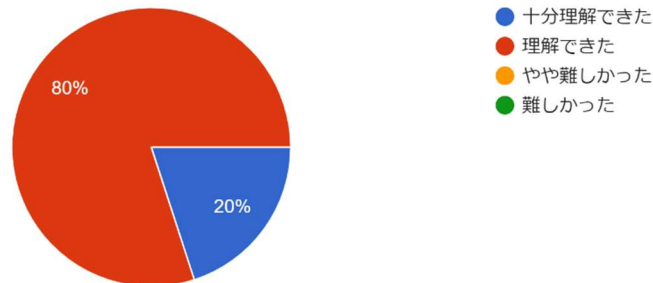
【主催】 マテリアル先端リサーチインフラ

【共催】 大学連携研究設備ネットワーク

【アンケート】 回答数 10名

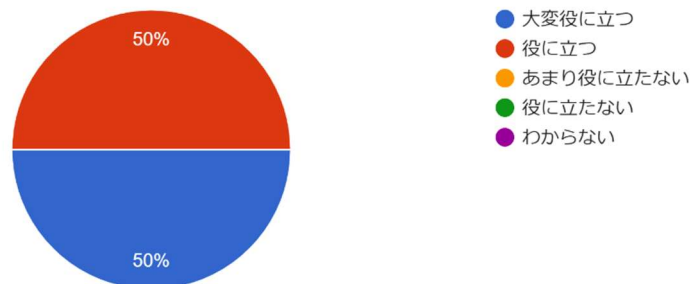
講習会のレベルはいかがでしたか

10件の回答



今回の講習会は今後の業務に役に立つでしょうか

10件の回答



## 講習会風景

### 今回の講習会の感想、改善点、良かった点、質問等

- 大変わかりやすく説明いただきありがとうございました。一部消化不良の部分もありましたので、復習いたします。
- 事前に本を読んでいたのですが、やはり実際にお聞きすると、とても発見があって、得るものが多かったです。
- 森田先生にはご負担がかかる点があるかもしれませんが、しっかりと学ぶサマースクール形式もあるのかと思いました。
- 分光データの取り扱い方が分かったのは良かった。
- 解説していただいてその内容についての理解が進んだことは言うまでもないですが、教え方という点でも勉強になりました。業務で学生などに教えることもありますので、受講する初心者の学生に合わせて環境 (Jupiter) の選択や講義の進行を行うことなどが参考になりました。いつも学生にはできるだけ負担がかからないように考えてしまうので

すが、それではトレーニングという点で不十分なのかもしれません。今回の演習の内容や時間設定は何とかついていけるくらいで、私にとってはトレーニングとしてちょうどいい負荷がかかるものでした。先生のご指導のご経験が豊富でいらっしゃるのだろうと感じました。

- 森田先生 中本様 遠山様 たいへんお世話になりました。テキストの予習の段階でそこそこ分かったつもりでしたが、実際に演習し、解説などをしていただいで、よく理解していないことが結構ありました。その部分についてもより理解できたと思います。ハンズオンはとても有意義だと感じました。多くの研究者、技術職員にとって必要な知識、技術になってくるとは思いますが、参加のためのハードルが少し高かったのが残念かな、と思いました。
- コードの説明、python の実務の使い方等を聞いた
- 予習を前提とした演習形式でしたので通常の講習会よりも深く理解できました。また森田先生が質問の時間をこまめに取って下さったので疑問点を残さずに進めることができました。解答付き ipynb ファイルを事前配布していただきましたので、python の 1.ipynb にある基本文法あたりは飛ばして後半の実用的なテクニックに時間を当てることができればなお有益かと思いました。
- 先生の解説が丁寧で非常にわかりやすかったです。特にグラフ作成は今後も業務で役に立つ内容で良かったです。残念な点として、内容をよく確認しなかったのでこちらも悪いとは思いますが、タイトルのケモメトリックスまでたどり着かなくて残念でした。
- 前からケモメトリックスが気になっていたが、何から始めたらいいか分からなかったのでとてもいい機会だった。

#### 今後、Python、データ解析、マテリアルインフォマティクス等の講習会を開催したら、どのような内容を希望されますか？

- 本講習会の第2回には是非参加したいと思います。また例えば従来のフィッティングでは収束しない非常に非線形な（あるいは次元数の多い）式のパラメータ決定への近年の機械学習の応用や、実験的に直接得られるデータと、自分が欲しいと思っている知見との距離が遠い計測についての AI による解析や、実験・測定計画の提案など、いろいろお話を伺えればと思います。
- 第二回目を楽しみにしております。
- できれば今回のテキストの最終章までお願いしたいです。
- シミュレーションとネットワーク理論に興味があります
- 個人的には小角散乱の訳のわからないデータの解析に役立てたいです。ですが、自分で処理するにはまだ壁が高そうです。
- 装置の故障検知の解析方法があれば良いと思います。
- Python を利用した論文、報告書等作成についての講習会があれば参加したいです。以

前 Web 講習会で森田先生が python でデータ解析からグラフ作成, さらに論文化? を自動化しているというようにお話しをしていらしたと記憶しています. また論文, 報告書に関連するデータをスクレイピングや生成 AI で取得, まとめる方法などについても併せて学べると良いかと思います.

-以上-