

2024年8月19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 II 報告書

【概要】 演習講習会 I に引き続き、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ことを目的として開催した。

【開催日時】 2024年8月2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。（5章以降を事前に予習のこと）

【参加者数】 現地参加 9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 9名

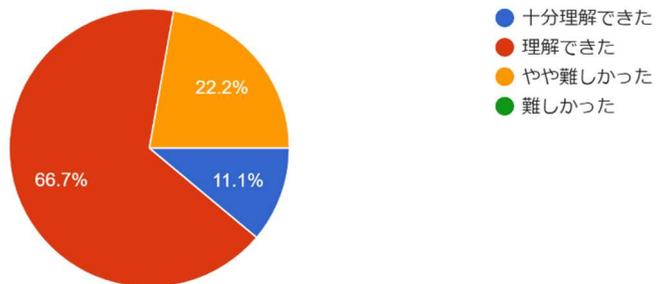
【講習会風景】



講習会風景

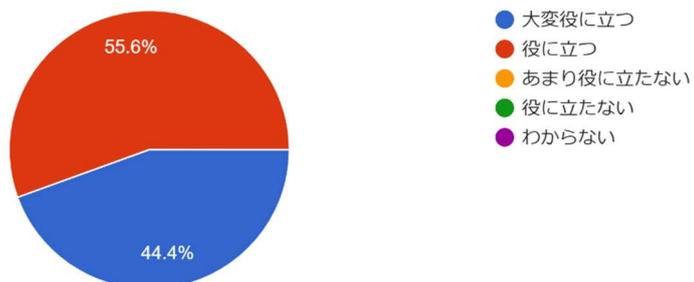
講習会のレベルはいかがでしたか

9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

9件の回答



## 今回の講習会の感想、改善点、良かった点、質問等

- 今回の講習の範囲は機械学習で、とても有意義な講習会でした。予習の時間が足りずに少し追いつけない部分もありましたが、しっかりと復習をしたいと思います。
- 研究計画にすぐ活用できる内容を知ることができたのが良かったです。従来研究計画を立てる際には主に実験方法についての検討のみで、データの取り扱いについてはとても単純な方法しか念頭にありませんでした。この講習会で、研究においてケモメトリックスの観点を持てるようになったこと自体、とても有益でした。また、実際に自分の手で、とにかく計算できることが実感できたので、研究に機械学習の手法を導入するハードルが下がりました。このような講習会を行っていただけて大変ありがとうございます。
- 途中、集中力が切れて少し迷子になりましたが、何とか理解できました。課題内容がちょうどよく、充実した研修になりました。これからの研究支援に役立てていきたいと思っています。ありがとうございました。
- 前回の内容を踏まえ、より実践的な知識を身につけられたのが良かったです。
- ありがとうございました。いままで「機械学習」と聞いただけで思考停止していましたが、実際の業務（機器分析）と関連付けて学べたのでわかりやすかったです。今後に生かしていきたいです。
- 前回今回と森田先生、中本様、遠山様には大変お世話になりました。ありがとうございました。

教科書と事前配布資料（ipynb ファイル）が準備されているため、予習と復習に取り組みやすく、理解が深まりました。また、固有値、特異値などの基礎概念についても説明頂けたのが私には良かったです。その他、機器分析においては線形データの範囲内でPLSを使用してモデル化するのが良いなど、具体的な応用例についてもお話し頂けたのが勉強になりました。

- プログラミングの内容が非常にわかりやすかったです。
- 分析機器から得たデータ以外にも応用ができそうです。Python を使ったデータ処理の手法を学びました。サンプルコードも豊富で動かすことはできました。あとは自分の問題にうまく適用できるかどうか。
- 実際に演習しながら学べたので、理解が進んだ。

## 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するとしたら、どのような内容を希望されますか？

- ケモメトリックスで用いられる手法についての、発展的な内容（手法の詳細や他の方法など）をさらに知ることができればと思います。また実際に測定を行う側からの活用事例や、困っていることについての発表など、ケモメトリックスの専門家と私共と、年1～2回でも継続的に交流できる機会があれば、とても有意義と思います。別な方向性と

しては、最近では装置の制御についても Python を用いるのが望ましい状況になってきているように思いますので、そのようなプログラミングについての講習会もあれば是非参加したいと思います。

- ネットワーク解析
- ベイズ最適化
- いろいろな人にとっての最初の一步になる講習会がよいと思います。私にとっても最初の一步になりました。
- Python による機械学習プログラミングをテーマに、実データを用いた演習講習会があると嬉しいです。
- お任せします。
- 何か、参加者の抱えている実データ（開示可能なもの）で演習するとよい。

-以上-