

## MI<sup>2</sup>I (情報統合型物質・材料開発) と数学連携による新展開 チュートリアル 報告 – アンケートの集計を中心にした概略 –

国立研究開発法人 物質・材料研究機構  
情報統合型物質・材料研究拠点  
拠点マネージャー 石井真史

### MI<sup>2</sup>I チュートリアルセミナー (第2回) 「超基礎からのLASSO」 概要

(プログラムは最終ページに添付)

開催日時：2016年7月25日 13:00-16:30

開催場所：JST 東京本部別館 1階ホール

講師：基本編：池田思朗 (統計数理研究所 教授)、応用編：DAM Hieu Chi (北陸先端科学技術大学院大学 准教授)

受講者数：108名 (アンケート提出 86名)

アンケート回収率	満足度*	コンソ会員割合**	リピータ割合***
79.6%	72.4%	37%	31.5%

\*満足度の定義：(「とても満足」の回答数 + 「満足」の回答数) / (アンケート提出者数 86名)

\*\*全出席者中。受講登録名簿より算出

\*\*\*リピータ割合定義：(第一/第二回 両チュートリアル出席者) / (全出席者数 108名)

#### 受講者像

年齢層：30-50代 (平均は40代後半)

専門：物理・化学・情報数理などの基礎科学に近い材料分野

仕事の内容：化学・自動車・電気機器・IT

受講者像は、第一回・第二回チュートリアルで差は全くない (付録データ参照)。

アンケートの自由回答を見ると受講者の予備知識にはかなりの差がある。しかし、上記の満足度を考えると、期待した講義内容と実際の内容には大きな差はなかったといえる。

以下にアンケートの自由回答の代表的なものを分類して例示する。

#### ○自由回答

##### 「難しい」と評した回答例

- ・ 難しい内容を手短かに説明していたので、理解できない。
- ・ あまり馴染のない分野なので、参考書を教示していただきたい。
- ・ 解析手法の勉強にはなったが、材料開発への活用はすぐにはできない。

##### 「適切」と評した回答例

- ・ 材料への応用についても具体例として理解が進められた。
- ・ Lassoの数学的背景がコンパクトに理解できた。
- ・ 今後も同様の難易度での開催を期待する。

### 「易しい」と評した回答例

- ・Ridge 回帰や Elastic net などの手法と LASSO とでどのような違いが生まれるかを知りたかった。
- ・もう一段技術的に細かい話があってもありがたい。最先端の論文等も紹介してほしい。

○チュートリアルで取り上げて欲しい話題や技術分野

#### 基礎理論・応用に分類できるもの

- ・カオス理論、PCA、カーネル法、Bayes 推定
- ・位相幾何学による構造から記述子の抽出。記述子の抽出
- ・Support Vector Machine ・ Gaussian Mixture Model ・ Neural Network
- ・ deep learning, Quantum annealing

#### 演習・実習に分類できるもの

- ・実際の計算、解析のやり方に関する講演。
- ・ベイズ最適化 Scikit-Learn を使った演習など
- ・講話で教わったことを、実際に手を動かしながら体得できるような企画

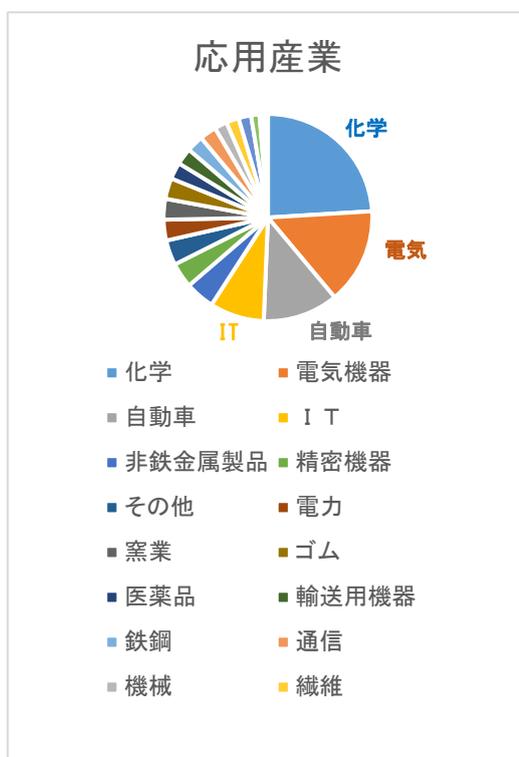
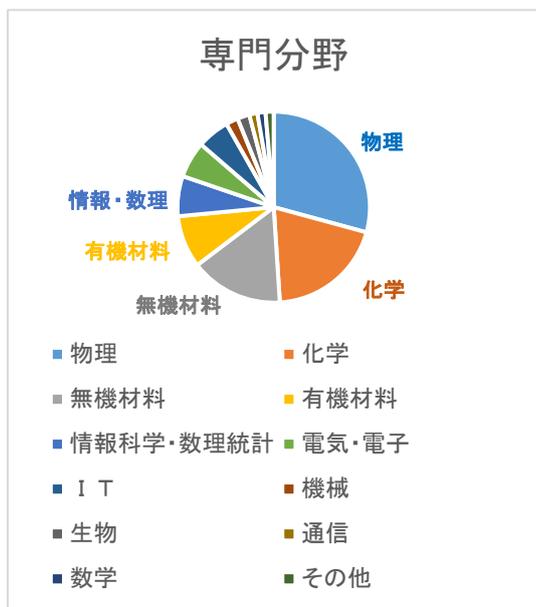
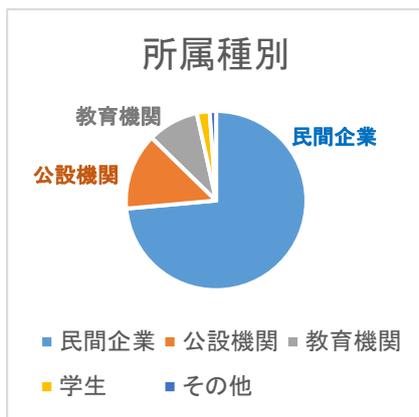
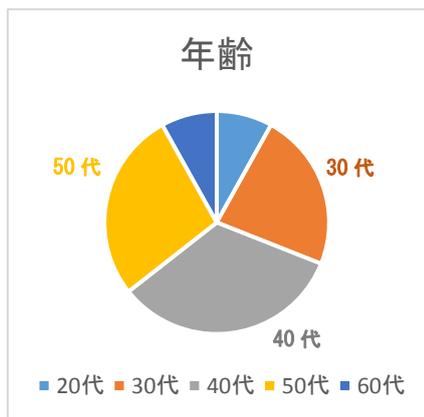
#### 実例紹介に分類できるもの

- ・実際どのように活用されていくのか。機械学習、AI などの応用を含めて具体的な内容。
- ・Material Informatics への具体的応用例についての講演。
- ・LASSO 等の実習（実例をあげて） 成功事例をたくさん教えてほしい。

○MI2（情報統合型物質・材料開発）に企画・開催して欲しいイベントやセミナー等

- ・Python や R を使った機械学習のチュートリアル、ワークショップ
- ・理工学部大卒レベルから始めるチュートリアルや研究会。非数学者向けのものが欲しい。
- ・インタラクティブな少人数スケールの講義の場

付録：第二回チュートリアル受講者の統計データ



## MI<sup>2</sup> チュートリアルセミナー (第 2 回)

### 「超基礎からの LASSO」

物質・材料研究機構 科学技術振興機構 共催

統計数理研究所\* 後援

北陸先端科学技術大学院大学 協賛

開催日：2016 年 7 月 25 日 (月)

会場：JST 東京本部別館 1 階ホール

物質・材料開発は、研究者の閃き・経験・勘に頼ることが多く、昨今の製品ニーズの多様化、ユースの急変に対応できなくなっている。世界各国が共通の課題を抱える中で、国際競争の主導権を得るには、これまでと異なる客観的・系統的判断に基づく新しい研究手法が必須である。

本チュートリアルは、この新手法として期待される MI<sup>2</sup> を使う上で必要な情報・数理を解説する公開講座であり、現場で MI<sup>2</sup> の手法を浸透させる核となる研究者を育成することを目的とする。難解な数式はできるだけ避け、平易な統計手法を出発点として、手法の理解を一步進める内容である。

本年度中に、第 3 回と第 4 回チュートリアルとして、いくつかの手法の「超基礎からの」セミナーを開催し、更に各回をビデオ教材化する予定である。

#### プログラム

13:30 –	主旨説明 寺倉 清之 (物質・材料研究機構 拠点長)
13:40 – 15:40	「スパース性を用いた情報処理とその方法—LASSO を中心として—」 池田 思朗 (統計数理研究所 教授) 質疑・応答
15:40 – 16:00	休憩
16:00 – 16:30	「LASSO の適用事例：材料物性の予測及び関係構造」 DAM Hieu Chi (北陸先端科学技術大学院大学 准教授) 質疑・応答
16:30	閉会

\*本チュートリアルセミナーは「文部科学省委託事業 数学協働プログラム (受託機関: 統計数理研究所)」に基づくものである。

- ・ JST さきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」
- ・ 計算物質科学人材育成コンソーシアム、東北大学金属材料研究所からの協力も得ている。