

MI<sup>2</sup> (情報統合型物質・材料開発) と数学連携による新展開  
 第4回チュートリアル報告 –アンケートの集計を中心に–

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> チュートリアルセミナー (第4回) 「超基礎からのトポロジカルデータ解析」概要  
 (プログラムは最終ページに添付)

開催日時：2017年1月27日 13:00-16:00

開催場所：全日通労働組合 8F 大会議室 A

講師：〈基本編〉平岡裕章 (東北大学 教授) 〈応用編〉中村壮伸 (東北大学 助教)

受講者数：82名 (申込者数 106名) (アンケート提出 70名)

アンケート回収率	満足度*1	コンソーシアム会員	
85.3% (84.7%)	87.1% (77.1%)	38.7% (38.8%)	( )内は第2回～4回の平均
リピート率*2			コンソーシアム会員
第2回参加者	第3回参加者	第2・3回参加者	第2・3回参加者
48.1%	60.4%	39.6%	58.5%

\*1 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)

\*2 受講申込名簿より算出 (アンケート不回答も含む)。例：今回の申込者で第2回に参加した人は 48.1%

#### 受講者像

年齢層：30-50代 (平均はほぼ 40歳)

専門：物理・化学・無機・有機がキーワードとなる材料分野

仕事の内容：化学 (今回特に多い)・電気機器・自動車・IT

今回の受講者は、現在のスタイルを取るようになった第2回と第3回と比べて更に若年化した。「超基礎」が定着し、若手に受講を任せる傾向が強まったと思われる。前回は50代の受講者が減り20代が増えたが、今回は40代が減り30代が増えた。講義の内容を反映して、情報系が減り材料系が著しく増した。このことは、今回の極めて高い満足度 (87%) と相関があるかもしれない。

リピート率は高く (48~60%)、今年度の全チュートリアルの受講者 (第2回～4回受講) も約40%に上る。特にコンソーシアム会員の全チュートリアル受講者は約59%に上り、一般 (コンソーシアム非会員) よりも学習意欲が倍増していた。

受講申込者の地方分布は、関東 82名、中部 14名 (静岡 6名、愛知 8名)、近畿 8名となり、極めて限られた地域からの参加にとどまった。

以下にアンケートの自由回答の代表的なものをいくつかまとめておく。未掲載のものを含め、総括すると以下の通りである。

「難しい」と評した回答では、講義の時間が短すぎたとの声が聴かれ、第2、第3回ほど「お手上げ」的なコメントはなかった。先生方のご尽力と材料科学に近い内容は、多くの受講者にとって受け入れやすかったと思われる。このことは「適切」と評した回答にもはっきりと表れている。一方で数学的な厳密性や、応用上の即効性（即、役立つ）には欠けていたであろう。概念の新鮮さによる満足感があったものの「実験データとどうつなげて利用できるか考えたい」「具体的説明が改めてほしい」「(パーシステント図から)読み取れる傾向が少ない様感じた」という先行き不透明感が漂うコメントもいくつか見られた。

第2回・第3回に比べて、実習に対する要望が極端に少なかった点は特筆に値する。これはソフトの準備が進んでいるのに対して、各自の系に本手法を具体的に適用するイメージが湧いていない結果と思われる。この点では、ベイズ最適化の時のような、抽象さゆえに各自の系への適用を期待させるものとは対極的であったと言える。

## ○自由回答（文言はママ）

### 「難しい」と評した回答

- 面白かったのですが、前半知らない数学の定義があったので、少しつまりました。事前に必要な知識を教えてほしかったなと思います。あと、PDの材料への適用事例を知りたかったです。
- 大変楽しく聞けましたが、後半駆け足になっていたので、もう少し時間をとって重要な部分が説明していただけるとよいと思います。
- 超基礎とあったがまだ難しいと感じる箇所がいくつかあった。
- セミナーの前に、想定している受講者レベルを示していただけると、事前に勉強してから参加できるのでありがたいです。

### 「適切」と評した回答

- 数学的な基本概念と、物性物理に應用する立場の両面から初学者にわかり易く解説して頂き、トポロジカルデータ解析のイメージがよくつかめました。
- 初学でも分かりやすいように、とても工夫されていた。おかげさまで理解が進みました。
- 基礎から分かりやすく、講義いただいた。ソフトウェアが使えるようになるのを楽しみにしています。
- 限られた時間で不特定な聴衆に対してよくデザインされたバランス重視の話しで良好
- 平岡先生の講義は、専門性がなくても概念的に理解しやすく、ある程度理解ができたところで、正確な定義や考え方をお教え頂いたので、とてもよかったです。中村先生の話は、実験データ、計算データから構造物性相関まで学習でき、材料開発への展開を得ることができ参考になりました。

### 難易度不確定の回答・意見を記した回答

- 高分子材料 (劣化)、複合材 (コンポジット) への応用例も紹介してほしい。(参考文献: URL などリストして頂いただけでもありがたいです) ガラス転移点で何がおきているか、具体的説明が改めてほしく思いました。
- PD 以外にもこのような手法があるか俯瞰的に知りたかった。
- 高分子の成果に期待しています。

## ○チュートリアルで取り上げて欲しい話題や技術分野、講師 (文言はママ)

### 基礎理論・応用に分類できるもの

- データベース
- カーネル法やガウス
- ・主成分解析 (PCA) ・独立成分解析 (ICA) ・カーネル法 ・サポートベクトルマシン ・ニューラルネット
- データに基づく機械学習から、新たな物理パラメータ (記述子) をどのように発見できるのかを例を交えて講演してほしいです。
- 第一原理計算の超入門・データベース構築のためのデータフォーマット

### 演習・実習に分類できるもの

- ソフトウェア演習や、特定計算適用対象についてコンサルティングがあるとよいと思います。

### 実例紹介に分類できるもの

- ・画像データ (電子顕微鏡、CT 等) のインフォマティクス活用例 ・プロセス設計、最適化 ・分析データの総合解釈
- Material Informatics 成功例を沢山紹介する
- データ科学の材料分野への適用例

## ○チュートリアル以外に企画・開催して欲しいイベントやワークショップ等 (文言はママ)

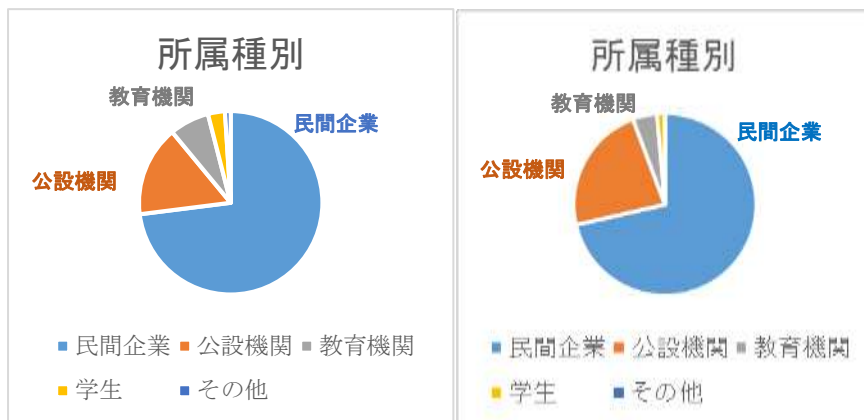
- 少人数グループでの質疑応答
- ソフトウェア試用体験
- 機械学習の座学と実習
- シミュレーションプログラムの実演、実材料への応用展開

## ○数学協働プログラムに企画・開催して欲しいイベントやセミナー等 (文言はママ)

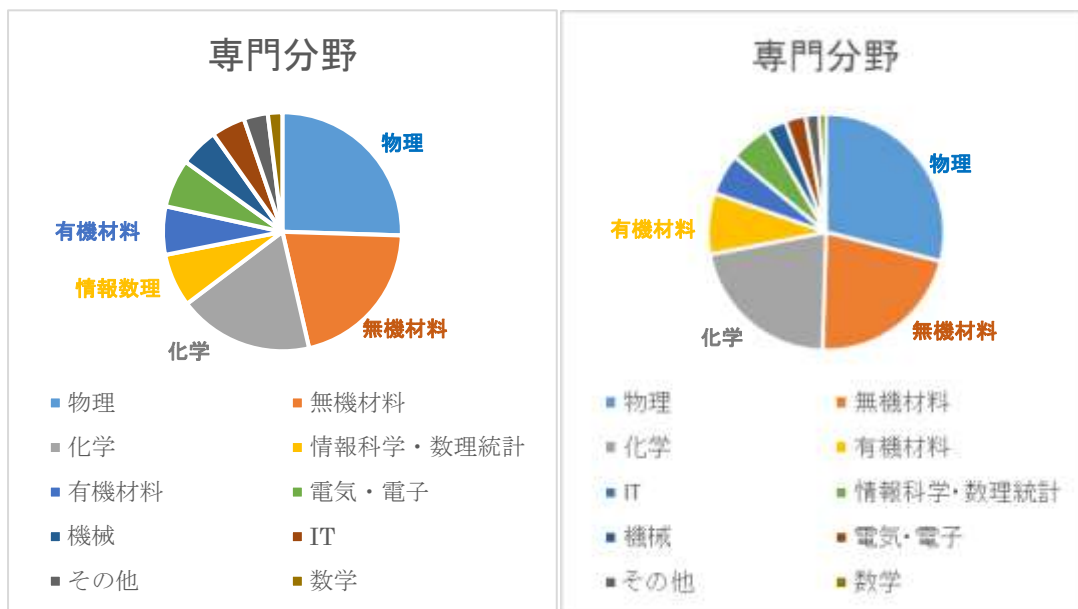
- データベースに関連する分野
- 幾何学全般
- 第一原理計算
- 圏論

付録：受講者の第3回と第4回チュートリアルと比較（左が第3回 右が第4回）

所属業種

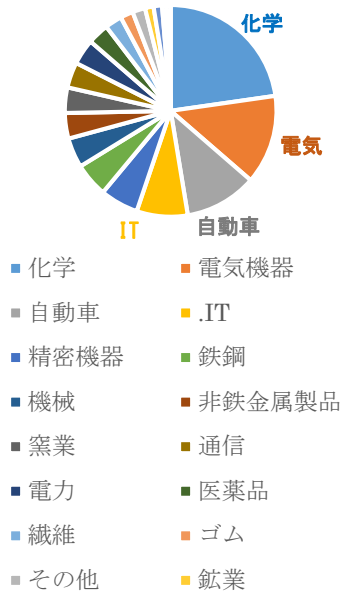


専門分野

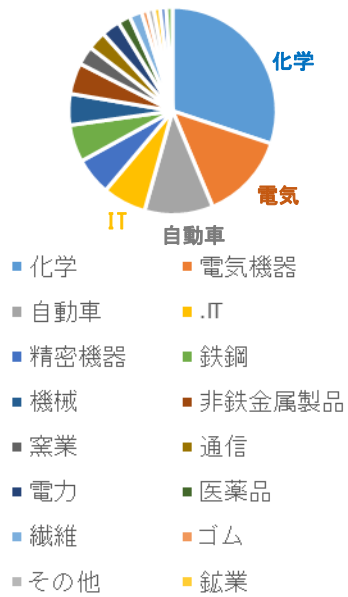


応用産業

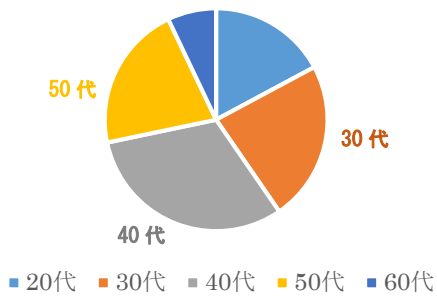
### 応用産業



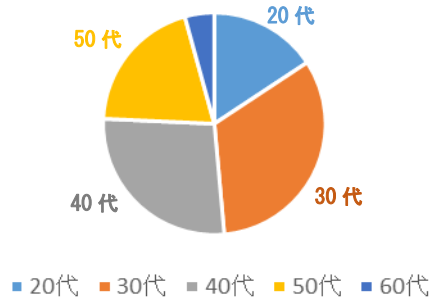
### 応用産業



### 年齢



### 年齢



### 会場の様子



## MI<sup>2</sup>I チュートリアルセミナー (第4回)

### 「超基礎からのトポロジカルデータ解析」

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：2017年1月27日(金)

会場：全日通労働組合 8F 大会議室 A

(〒100-0013 東京都千代田区霞が関3丁目3番地3号)

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。

第1～3回と同様に、本チュートリアルセミナーは、ビデオ教材化して頒布する予定である。

#### プログラム

12:30	受付開始
13:00-13:10	趣旨説明 寺倉 清之 (NIMS 拠点長)
13:10-14:25	「超基礎からのトポロジカルデータ解析 数学的基礎固めとソフトウェア紹介」 平岡 裕章 (東北大学 教授) 質疑・応答
14:25-14:45	休憩
14:45-16:00	「超基礎からのトポロジカルデータ解析 典型例を通じたデータの読み方と材料科学への展開」 中村 壮伸 (東北大学 助教) 質疑・応答
16:00	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。また

- ・ JST イノベーションハブ構築支援事業
- ・ 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の協力も戴いている。