開催報告

表面科学セミナー 2018 (実践編)
実践! マテリアルズインフォマティクス
実際の作業を通して身につける
材料データ科学

近 藤 剛 弘*

筑波大学数理物質系
☎ 305-8573 つくば市天王台 1-1-1

(2019 年 2 月 28 日受理)

Surface Science Seminar 2018 (Practice)
Practice! Materials Informatics, Material Data
Science Studied Through Actual Work

Takahiro KONDO*

University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8573

(Received February 28, 2019)

本セミナーは参加者一人一人に PC が割り当てられ、マテリアルズインフォマティクスの基礎と応用について、座学だけではなく実際に PC を触って体験しながら学ぶ実践型のセミナーです。本セミナーと同様のセミナーが昨年度、初めて開催され、大好評であったため、本年度は関西と関東でそれぞれ 1 回ずつ合計 2 回開催いたしました。1 回目は平成 30 年 11 月 1 日と 2 日に大阪大学豊中キャンパス基礎工学国際棟セミナー室で実施され、データ駆動表面科学研究部会との共催で開催されました。2 回目は平成 31 年 1 月 22 日と 23 日に東京理科大学葛飾キャンパス講義棟 605 教室で実施され、データ駆動表面科学研究部会および東京理科大学 MI 懇談会との共催で開催されました。参加者はそれぞれ合計 13 名と 21 名であり、学生はこのうち 1 名、2 名と全体の約 1 割でした。参加者の多くは研究開発を職種とする 30-50 代の社会人でした。

関東でのセミナーの様子を Fig. 1 に示します。参加者一人一人に PC を用意するため、現場では PC トラブルに対応する十分なサポート体制を持って臨む必要がありましたが、大きなトラブルも無く進めることができました。参加者は稀に生じる PC トラブルやその対応方法も

Fig. 1. (color online). Photo image of the seminar.

含め、マテリアルズインフォマティクスのソフトの使用
方法、原理、注意点などを総合的に全てその場で学べる
というのがセミナーの大きなメリットとなりました。

セミナー初日は基礎という位置づけで、松下康弘先生
(SET ソフトウェア) が配布テキストに沿って Excel 線
形解析 (重回帰分析/主成分分析/実験計画法)、ニュー
ラルネットワーク非線形解析 (予測/分類/自己組織
化マップ)、逆問題への適用 (Excel ソルバー/遺伝的ア
ルゴリズム) を実践的に講義してくださいました。2 日
目は応用という位置づけで、安藤康伸先生 (産総研) が
配布テキストに沿って線形モデルの正則化によるモデル
選択 (least absolute shrinkage and selection operator,
LASSO, Ridge 回帰, 交差検定)、主成分解析による低
次元化とクラスター解析 (k-means 法, 混合ガウスモデ
ル)、混合ガウスモデルを用いたピーク検知、ベイズ最
適化の概要を実践的に講義してくださいました。1 日目
と 2 日目のバランスが良く、また両日とも途中で休憩や
個別相談の時間を設けたのは大変好評で、複数の共同研
究が講師の先生と参加者との間で実現いたしました。

本セミナーは教育委員会の山本貴博 (東京理科大)、
近藤剛弘 (筑波大)、鯨島純一郎 (東レリサーチセンタ
ー) が実行委員となり、河野禎市郎 (旭化成) 副委員長
や中辻寛 (東工大) 副委員長をはじめとした多数の方
のご協力を得て開催されました。特に、関西会場では福井
賢一 (大阪大学) 委員に、関東会場では MI 懇談会の小
嗣真人 (東京理科大) 会長に多くのご協力をいただきま
した。

* E-mail : takahiro@ims.tsukuba.ac.jp