

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  
 第三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3回) 「超基礎からのベイズ最適化」概要

(プログラムは最終ページに添付)

開催日時：2016年10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：津田宏治 (東京大学 教授)

受講者数：112名 (アンケート提出 100名)

アンケート回収率	満足度*	コンソ会員割合**
89.3% (79.6%)	72.0% (72.4%)	27.7% (37%)

第一回参加者	第二回参加者***	第一・二回参加者
19.6% (–)	50.9% (31.5%)	18.8% (–)

( )内は第2回 (7/25) の結果

\*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)

\*\*全出席者中 (アンケート不回答も含む)。受講登録名簿より算出。名前を把握できていないコンソーシアム活動員を含めると、更に高いものと思われる (40%程度?)

\*\*\* ( )は前回参加者として比較

受講者像

年齢層：30-50代 (平均は40代前半)

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、今回若干低年齢化 (付録データ参照のこと)。

統計を見る限り、現在のスタイルを取るようになった第二回と第三回で、受講者像や感想に大きな差はない。年齢層が若干低下したのは「超基礎」を謳ったセミナーとして定着したためと思われる。実際、50代の受講者が減り20代が増えている。

第二回参加者のリピート率が高く (50.9%)、このスタイルへの支持が高いことを示している。

受講申込者の地方分布は、関東 86名、中部 15名、関西 8名、九州 3名、中国・四国 1名、北海道 1名となり、前回同様に北部からの参加者が少ない。

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」と評した回答には、初学者への救済策を求める声は高い。また、スライドへのタイトル挿入や、用語の定義の明確化など、ちょっとしたケアで（熟練者の足を引くことなく）初学者の満足度が上がりそうな意見も見られた。一方「適切」と評した回答には、「(津田先生の話)を繰り返して聞くことでようやくわかってきた」との意見があり、チュートリアルを続ける意義を認識した。同様な意見は「易しい」と評した回答にもみられた。また今回初めて、講義の最初に「データ科学」全般の実情や進め方を講師にお話しいただいたが、これに対して「よかった。毎回（講師ごとに）取り上げてほしい」という好意的な意見が寄せられた。

チュートリアルで取り上げて欲しい話題や技術分野、講師としては、やはり演習・実習・事例紹介への要望は高い。基礎からの積み上げより、事例から真似る方向が好まれている。上手く言い表した表現に「超具体的ベイズ」というものが見られたが、この一言に多くの人の望みが集約されているように思える。一方で主催者側からすると、実技については企画と準備に段違いの手間がかかることは否めない。

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に関しては、レビュー的な研究・手法紹介を望む声が見られた。全体を俯瞰したい気持ちは多くの人が持っていると思われる。特に、受講者の年齢層が下がったとはいえ40代、50代の多さを考えると、もっともな意見と言える。

#### ○自由回答（文言はママ）

##### 「難しい」と評した回答

- 原理的な部分をつかめなかった。分かってない人に分からせる説明を期待します。
- 各数式について、もう少し詳しく説明していただきたいかった。
- あとで復習したときに、分かるように配布スライドは少なくとも、タイトル明記、可能であれば要点をコメントで記述頂けると助かります。
- 用語の説明（意味・概念）があるとよりよかった。
- 「ベイズ最適化」の本質、限界、適用方法についてもう少し具体的な説明が欲しかった。

##### 「適切」と評した回答

- 判りやすい講演だった。是非 combo を実装したいと思う。
- とても面白かったです。DBの中にある構造から、有望な構造を見つけることができたのがよかったです。また、探策速度を210倍はやくできたのが、すごいと思いました。
- 基礎的な話と具体例が盛り込まれていて分かりやすかった。資料としてはより理論的な具体的内容が書かれたものがあっても良かったと思う。
- 意思決定に助けとなるベイズ最適について、参考になる書籍も少なく、理解の助けにすることができました。応用例もうかがえたので、すぐに使用してみたいと思います。
- データ科学の実用に関する考え方の説明・紹介がありよかった。毎回（講師ごとに）取り上げてほしい。

- 津田先生の講演をきくのは今回が3回目くらいだが、ようやく何を言っているのか理解できるようになってきた。

### 「易しい」と評した回答

- ベイズの魅力である誤差範囲をもった最適化の部分があまり伝わってこなかった。(GAとかでも同じ結果になる?)
- GPR の詳細に入るまでが長かった。ガウス分布の基礎の説明は不要、Feature Map 等の詳細に時間を使って欲しい。

### 不確定・意見を記した回答

- 応用編でベイズ最適化と他手法との比較などがあるともっと良かったと思います。

○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

- 記述子の選択 (AI による)
- モンテカルロ木探索
- カーネルトリック・ニューラルネット・SVM 回帰
- 深層学習
- 第一原理計算

### 演習・実習に分類できるもの

- Tensor flow 等の実装例等 NN。python の周辺ライブラリの紹介等。
- 記述子の目的変数に対する変換を知りたいため、自分の持ってきたデータを講師に指導してもらいながら解析したいです。
- シンプルな手法の組み合わせ (eg: PIS+PCA) の方法、コツ ・実際に機械学習するとき直面する問題点とその克服の仕方 (実体験)
- 講義の他に、実際に手を動かせるようなセット (プログラム、データ) があれば、嬉しいです。(具体的な手法について理解も進みますし・・・)

### 実例紹介に分類できるもの

- 動画データの情報処理
- 機械学習・多変量解析の解析、分析への応用
- 簡単でもすぐ使えそうな分野と、物質・材料の分野でなくても、すでにビッグデータを使って成果を出している分野と、両方とりあげてほしい。
- 今回の COMBO のように Python や R におけるデータ科学に役立つライブラリの紹介・説明。データベースをどのように活用するか。
- 実際に利用した例を企業の方からききたい。

○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）

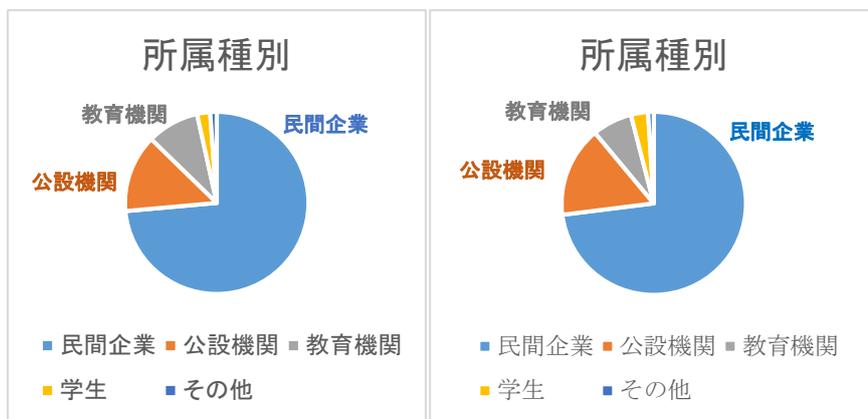
- 少人数グループでの質疑応答
- データの扱いよろず相談。超具体的ベイズ
- 小勉強会を組織できるような親睦の場。自習できるテキスト・本の紹介。
- まだ評価は十分には定まってないが、専門家に注目されてる最新手法のレビュー
- （Global な）先行研究の整理・レビュー・勉強会

○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）

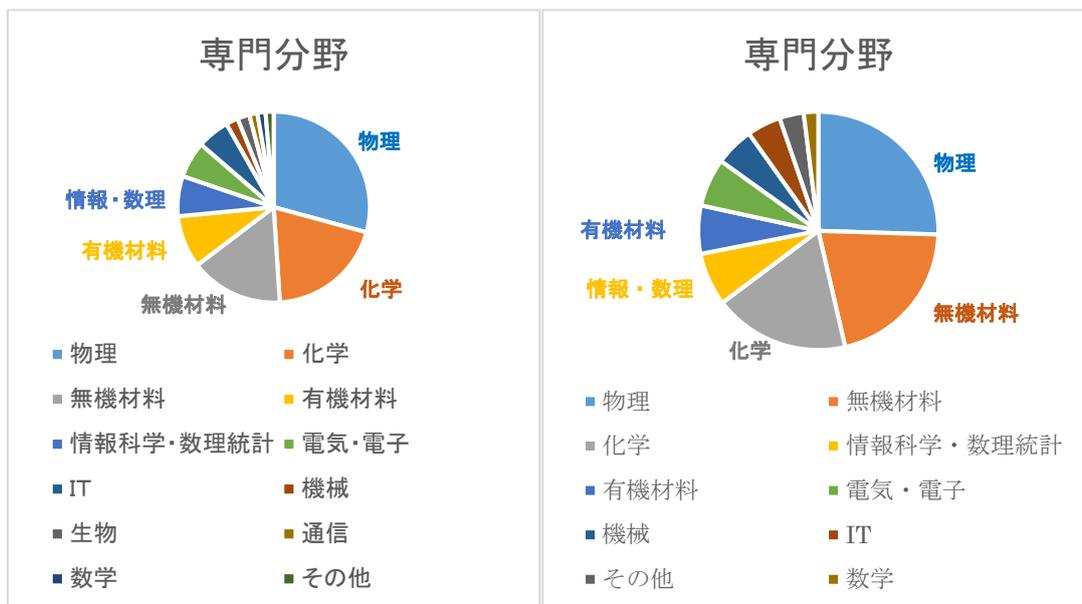
- 集合、位相の基礎 eg.)距離空間から位相空間
- 開発プロセスの短縮、最適化
- 非線型最小二乗法
- パーシステントホモロジー

付録：受講者の第二回と第三回チュートリアルと比較（左が第二回 右が第三回）

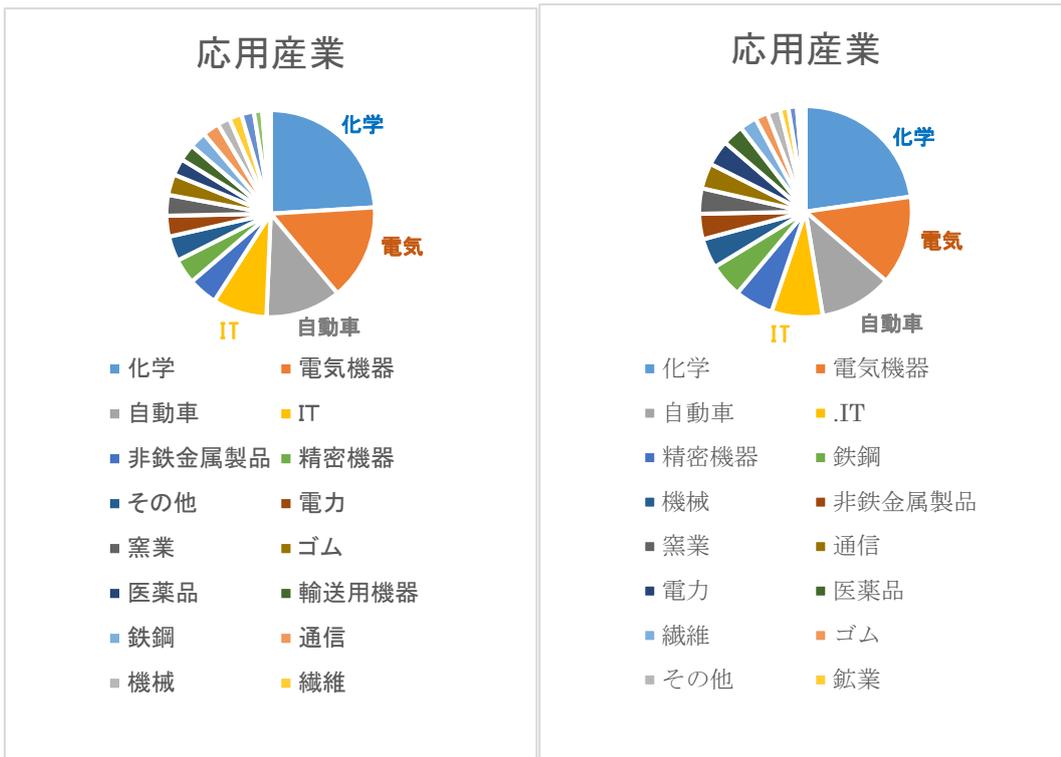
所属業種



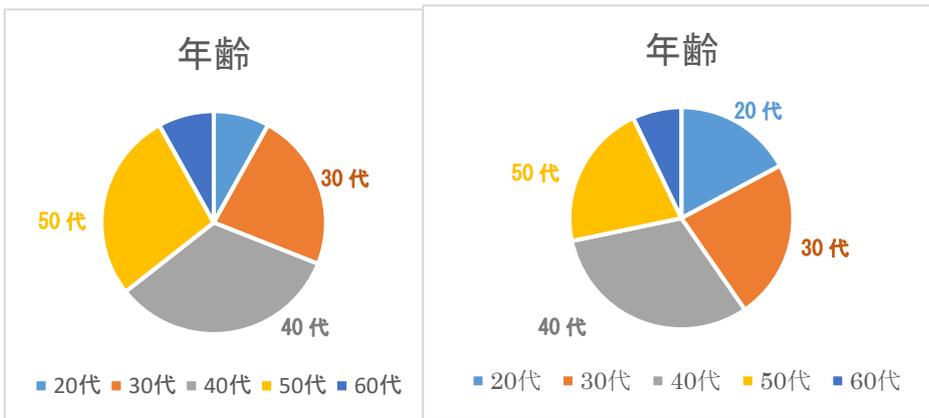
専門分野



応用産業



年齢



会場の様子



## MI<sup>2</sup>I チュートリアルセミナー (第3回)

### 「超基礎からのベイズ最適化」

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10月27日(木)

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。

なお、本年度中に第4回チュートリアルとして、「超基礎からの」セミナーを引き続き開催する予定である。各回の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(第1、2回は頒布中)。

#### プログラム

12:30	受付開始
13:00-13:10	趣旨説明 伊藤 聡 (JST プログラムマネージャー)
13:10-14:25	「超基礎からのベイズ最適化(基本編)」 津田 宏治 (東京大学 教授) 質疑・応答
14:25-14:45	休憩
14:45-16:00	「超基礎からのベイズ最適化(応用編)」 津田 宏治 (東京大学 教授) 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。