

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ事業

参加費：無料



ARIMアカデミー データ構造化ワークショップ 2024@奈良

Python中級者編

主催 物質・材料研究機構 マテリアル先端リサーチインフラセンターハブ
共催/協力 奈良先端科学技術大学院大学 マテリアル研究プラットフォームセンター
インストラクター Smart Solutions株式会社

2024年 12月4日~12月6日
(3日間)

会場： 奈良県コンベンションセンター
〒630-8013
奈良県奈良市三条大路一丁目691-1



オンライン参加可

実験データのための Pythonを学ぶ

Pythonを用いた実践的なコーディング技術をハンズオン形式で学びます。今年度のテーマは、**機械学習とハイパーパラメータチューニング**です。

一般OK！ 異分野交流のハンズオン

一般の方々も参加可能です。学生から若手研究者まで、幅広い層の皆様にご参加いただき、**異なるバックグラウンドを持つ方々との交流**や情報交換を期待しています

最先端データ活用 特別講演

さらに、特別講演として、**奈良先端科学技術大学院大学**の特任教授である**船津公人先生**をお迎えし、最新の研究成果や実践的な知見を共有いただく予定です。

対象者

一般の方々（およびARIM技術スタッフ関係者）

なお、ワークショップはPython経験者に限らせていただきます。
※Pythonの経験者とは、pip installが問題なく行え、Pandas、Numpy、Matplotlibを使って50行程度のコードを作成したことがある方を指します。

募集人数

ワークショップ 上限 **30** 名程度（定員に達し次第締め切り）
※ワークショップはオンラインの傍聴枠はございません
特別講演のみ 上限 **100** 名程度（オンライン参加可）

申込方法

下記URLにアクセスし、フォームから申し込んでください。
URL: <https://forms.office.com/r/5xuDY9MZq9>



物質・材料研究機構
マテリアル先端リサーチセンターハブ
お問合先：データ共用事務局
mail: arim_data@ml.nims.go.jp

奈良先端科学技術大学院大学
マテリアル研究プラットフォームセンター
お問合先：ARIM事務局
mail: arim-jimu@ms.naist.jp





学習目標



- ✓ Pythonによる機械学習やハイパーパラメータチューニングの基礎を習得し、実際に体験できます。
- ✓ 入門書では学べないPythonのテクニック・勘所を習得できます。
- ✓ 参加者同士の交流を通じて、親睦を深めることができます。

タイムテーブル及び学習内容

	セッション名	学習内容	
Day1 10:00~	10:00 - 10:30 1日目 インTRODクシヨソ	—	
	10:30 - 11:00 グループ自己紹介	研究・業務・学業等の紹介	
	11:00 - 12:00 機械学習 入門編	機械学習の概要	
	12:00 - 13:00 お昼休憩	—	
	13:00 - 14:00 機械学習 実践編	scikit-learnによる機械学習の実践	
	14:00 - 15:40 機械学習 グループワーク	—	
	15:40 - 16:40 機械学習 グループワーク発表会	—	
Day2 9:30~	09:30 - 09:40 2日目 インTRODクシヨソ	—	
	09:40 - 10:30 ハイパーパラメータ 入門編	ハイパーパラメータの基礎知識	
	10:40 - 12:30 ハイパーパラメータ 実践編	Optunaによるチューニングの実践	
	12:30 - 13:30 お昼休憩	—	
	13:30 - 16:40 <特別講演> 奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエソ創造センター 船津公人センター長	<p>【ご講演内容】</p> <p>Part I データ駆動化学の発展の歴史と展望</p> <p>データ駆動化学はどのような歴史を辿りいまに至っているのか。黎明期から現在までの取組みのマイルストーンを見つづ今後の動きを展望する。</p> <p>Part II データ駆動化学が導く研究・開発・生産のパラダイム変革〜リサーチトランスフォーメーション（RX）サイクルの実装〜</p> <p>データ駆動化学における主要なカテゴリーでの取組みを紹介し、それぞれの取組みにおけるデータ、情報の有機的連携の姿としてNAIST/DSCで進められているRXサイクルを実装するRXプラットフォーム構築へと話を進めたい。</p>	
	オンライン参加可		
	Day3 9:30~	09:30 - 09:40 3日目 インTRODクシヨソ	—
09:40 - 11:40 ハイパーパラメータ グループワーク		—	
11:40 - 12:10 ハイパーパラメータ グループワーク発表会		—	
12:10 - 12:30 中間クロージソ		—	
12:30 - 13:30 お昼休憩		—	
13:30 - 15:00 Pythonプログラミングの勘所 [任意参加]		関数、クラスの上手な使い方など	
15:00 - 15:30 アンケート・クロージソ [任意参加]		—	

講師ご略歴



船津公人教授（東京大学名誉教授）

1984年から40年間にわたり、化学データ・情報の高次処理と知識構築基盤確立の研究にり組み、国内外のデータ駆動型化学（ケモインフォマティクス）の分野開拓に主導的役割を果たしてきました。



物質・材料研究機構
マテリアル先端リサーチセンターハブ

お問合先： データ共用事務局
mail: arim_data@ml.nims.go.jp

奈良先端科学技術大学院大学
マテリアル研究プラットフォームセンター

お問合先： ARIM事務局
mail: arim-jimu@ms.naist.jp

