

# 2022 年度「ぶんせき講習会」(発展編)

## 「Python を用いた機器分析データの解析～入門からケモトリックスまで～」

主催 (公社)日本分析化学会近畿支部, 近畿分析技術研究懇話会

協賛 (公社)化学工学会関西支部, (一社)近畿化学協会, (公社)日本化学会近畿支部, (公社)有機合成化学協会関西支部, (公社)高分子学会関西支部, (一社)日本鉄鋼協会関西支部(公社)日本金属学会関西支部 関西分析研究会

**開催趣旨** 汎用プログラミング言語の Python はデータサイエンスの分野で使われるライブラリが充実しており, 機械学習用のライブラリである scikit-learn を使うことで, 機器分析データのケモトリックスによる解析を行うことができます. 本講習会では, 無料でダウンロードが可能な Python プログラミング環境の Jupyter Notebook を使って, CSV 形式の機器分析データを読み込み, 定量分析(回帰)と定性分析(判別)を行えるようにします.

**講習内容** Python の基礎と Python を用いたケモトリックス・機械学習の基礎

**対象者** 機器分析は行ったことがあるが, ケモトリックスのような高度なデータ解析を行ったことがない方. Python を使って機器分析データの解析を行ってみたい方.

**日時** 2022 年 12 月 3 日(土)13:00~16:30

**場所** 大阪電気通信大学 寝屋川キャンパス J号館 7階 J708 演習室  
(大阪府寝屋川市初町 18-8)  
京阪本線寝屋川市駅より徒歩約 7 分  
<https://www.osakac.ac.jp/institution/campus/access/>

### 【講習プログラム】

#### 1. (実習) Python 入門

演習室の端末にインストールされている Jupyter Notebook を立ち上げて Python プログラミングを始めるところから説明します. この講習では, スペクトルやクロマトグラムといった機器分析データが保存された CSV ファイルを読み込んで, ベースライン補正のような前処理をし, 学会発表や論文投稿に使えるレベルのグラフを出力するところまでを目指します.

(13:00~14:00 / 60 分) (阪電通大)森田成昭

#### 2. (実習) トウモロコシの近赤外スペクトルを用いたタンパク質の定量分析

オンライン上で公開されているトウモロコシの近赤外スペクトルのデータセットを用いて, 近赤外スペクトルとトウモロコシ中のタンパク質量の関係を学習させ, 得られた回帰モデルを使って未知試料の近赤外スペクトルからタンパク質量を推定する演習を行います. ここではモデル構築(キャリブレーション)とモデル検証

(バリデーション)についても学びます.

(14:15~15:15 / 60 分) (阪電通大)森田成昭

#### 3. (実習) オリーブオイルの液体クロマトグラムを用いた偽物の判別分析

オンライン上で公開されている, 偽物も含むオリーブオイルの液体クロマトグラムのデータセットを用いて, クロマトグラムとオリーブオイルの真偽の関係を学習させ, 得られた判別モデルを使って未知試料の液体クロマトグラムから本物か偽物かを判別する演習を行います. ここでは混同行列を使った判別分析の結果の解釈についても学びます.

(15:30~16:30 / 60 分) (阪電通大)森田成昭

\* 当日は演習室の端末を使って実践的なプログラミングを体験していただきます.

\* 講習会終了後に復習できるよう, 当日使用する Python プログラムは参加者の皆様に配付する予定です.

\* COVID-19 の影響により開催方式を変更する場合があります. ご了承下さい.

\* 感染症対策をした上で演習室を利用して頂きます. ご協力をよろしくお願いいたします.

**参加費** 主催・協賛団体所属会員 10,000 円, 学生 5,000 円, 会員外 15,000 円

**定員** 30 名(先着順申込受付とし, 定員になり次第締切)

**申込方法** \*参加を希望される方は, 近畿支部 HP (<http://www.bunkin.org/>) から本講習会のページに入ってください, 【参加申込フォーム】にて Web からお申し込み下さい.

\*お申込み後, 自動返信メールが届きましたら, 開催日までに参加費のお支払いをお願い致します. 参加費は銀行口座(りそな銀行御堂筋支店 普通預金 No.2340726, 名義 公益社団法人日本分析化学会近畿支部)にお振り込み下さい.

**申込締切** 11 月 27 日(日) (11 月 27 日(日)以降のキャンセルは不可)

**申込先** 公益社団法人 日本分析化学会近畿支部

〒550-0004 大阪市西区靱本町 1-8-4 大阪科学技術センター6 階

電話:06-6441-5531 / FAX:06-6443-6685 / E-mail:mail@bunkin.org

近畿支部 HP: <http://www.bunkin.org/>

**問合せ先** 森田成昭(大阪電気通信大学) smorita@isc.osakac.ac.jp