

2023年度共同利用研究報告書

2024年03月02日

所属・職名 一橋大学・ソーシャルデータサイエンス研究科・特任准教授

天本 義史

		整理番号	2023a011	
1.研究計画題目	統計数学×情報×物質セミナーの開催			
2.新規・継続	新規			
3.種別	一般研究			
4.種目	研究集会（Ⅱ）			
5.開催方法	ハイブリッド開催			
6.研究代表者	氏名	天本 義史		
	所属 部局名	一橋大学・ソーシャルデータサイ エンス研究科	職 名	特任准教授
7.研究実施期間	2023年06月09日(金曜日)～2023年06月09日(金曜日)			
	2023年10月13日(金曜日)～2023年10月13日(金曜日)			
	2023年11月22日(水曜日)～2023年11月22日(水曜日)			
	2024年02月16日(金曜日)～2024年02月16日(金曜日)			
8.キーワード	物質科学、材料科学、マテリアルズインフォマティクス、統計科学、機械学習			
9.参加者人数	101人			

10.本研究で得られた成果の概要

研究集会の講演者や聴講者の交流により、新たな共同研究へ発展している。例えば、物質のラマンスペクトルとベイズ推定の研究者が出会い、新たな情報計測に関する共同研究へと繋がっている。また、超分子錯体と計算による分子生成技術の組み合わせにより、新規物質探索が試みられている。液-液相分離に関して、情報科学による効率的な相図作成や理論的な扱いについて、議論が深まった。今後、これらの研究の進展により、論文発表などの成果に繋がると期待される。

1) Y. Amamoto, C. Koganemaru, K. Kojio, A. Takahara, S. Yamamoto, K. Okazawa, Y. Tsuji, T. Aritake, K. Terayama 'A machine learning approach to designing tough and degradable polyamides based on multiblock structures' submitted.

2023 年度報告書：統計数学×情報×物質セミナーの開催

研究代表者：天本 義史（一橋大学・ソーシャルデータサイエンス研究科）

組織委員：廣瀬 慧（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所）

五島 健太（九州大学先導物質化学研究所）

【研究背景】

近年、「数理・統計・情報科学」と「物質・材料科学」の融合研究が急速に進んでいる。例えば、実験計画法などを取り入れて材料開発を加速させるマテリアルズインフォマティクスの取り組みが盛んである。また、物質・材料の計測データから人間には把握が難しい機序を明らかにする情報計測という分野の発展も見られる。これらは、両方の分野の知識が必要なため、一人の研究者が行うには限界があり、大学や産業界で人材育成が課題となっている。また、お互いの分野の掛け算で新しい研究を創出できるため、それぞれの分野の研究者は融合領域へのモチベーションがあるが、相互交流によって共同研究に繋げる機会が非常に限られる。

【研究目的】

本研究では、研究集会の開催を通して、「数理・統計・情報科学」と「物質・材料科学」の融合研究を推進するネットワークの構築を目的とした。具体的には、九州大学の IMI をハブとして、① 大学や産業界の研究者の情報交換、② 共同研究を生み出す土壌の形成、③ 学生や若手の研究者の育成を通し、当該領域を発展させる基盤の構築を目指した。

【研究集会の開催】

2023 年度、半日の研究集会を三回開催し、融合領域に関するネットワーキングを図った。講演者として、計 15 名にご登壇いただいた。内訳として、大学・高専・公的研究機関 11 名、産業界 2 名、大学院生 2 名である。それぞれの日程で、九州大学から 1 名以上の研究者にご講演いただいた。研究集会は、ハイブリッド形式（現地+Zoom 配信）での開催とした。各日の研究集会の最初の講演は、IMI の産業数理統計部門と連携し、チュートリアル講義を設定した。ベイズ推定、R 言語、産業界におけるマテリアルズインフォマティクスなど、当該分野の基礎に関してレクチャーを受けた。チュートリアル講義の後は、各講演者の最先端の研究について講演いただき、話題提供と密な議論を進めた。また、聴講者として、登録ベースで 131 名にご参加いただいた。

各日における具体的な開催内容を下記に示す。

・研究集会 1 回目 (2023 年 6 月 9 日)

本講演会では、「データ駆動による物性・情報計測科学の最近の動向 ～データから理を見つける～」を副題として 6 件の講演をいただいた。チュートリアルとして、ベイズ推定に関する基礎について講義いただいた。その後、スパース推定やベイズ推定、深層学習、MCR 解析など、計測データの統計・情報科学によるモデリングや統合解析について、講演いただいた。講演者や聴講者から多数の質問があり、様々なバックグラウンドから有意義な議論を行った。また、大学院生 2 名からも講演いただき、人材育成への貢献を図った。

・研究集会 2 回目 (2023 年 10 月 13 日)

第 2 回目の研究集会では、2 部構成で行われた。初めに、統計処理に優れた R のチュートリアル講義が催された。次いで「データ科学に基づく状態記述と分子による解」という副題のもとで 3 名の方にご講演をいただいた。3 つの講演は Ginzburg–Landau model (二重井戸型ポテンシャル) を数理・データ科学的に捉え、如何に物性を導くかということが共通するテーマである。講演は、それに距離の周期構造を内包した自己組織化された構造体に対する数理モデル、境界発現＝相分離状態での組成組み合わせを相図から予測する手法、最後にその活量係数からインフォマティクスへの展開から成り、活発な議論がなされた。

・研究集会 3 回目 (2023 年 11 月 22 日)

第 3 回目の講演会では、異なる専門分野からの講演者が、それぞれ最新の研究成果について講演された。初めに、日下康成氏が素材産業における統計数学の活用とマテリアルズインフォマティクスの重要性について述べ、データサイエンスが素材科学のイノベーションをどのように推進するかについて示した。続いて、吉田亮氏はデータ駆動型材料研究における実験、シミュレーション、機械学習の融合によるアプローチを紹介し、新材料の発見や性能向上への貢献を強調した。池祐一氏は位相的データ解析の応用に焦点を当て、データの形状を利用した分析手法が物質科学において新たな洞察を提供する可能性について説明した。最後に、久池井茂氏が第 4 次産業革命におけるデジタルものづくりに関する取り組みを紹介し、教育と産業界の連携を通じたデジタルトランスフォーメーションの進展を示した。

これらの講演を通じて、統計数学およびデータ駆動によるアプローチが、物性・情報計測科学における革新的な発見と解決策の促進につながる事がわかった。

【進められている共同研究】

研究集会の講演者や聴講者の交流により、新たな共同研究へ発展している。例えば、物質のラマンスペクトルとベイズ推定の研究者が出会い、新たな情報計測に関する共同研究へと繋がっている。また、超分子錯体と計算による分子生成技術の組み合わせにより、新規物質探索が試みられている。液-液相分離に関して、情報科学による効率的な相図作成や理論的な扱いについて、議論が深まった。今後、これらの研究の進展により、論文発表などの成果に繋がると期待される。

開催日:2023/06/09~2023/06/09

統計数学×情報×物質セミナーの開催① | 共2023a011

カテゴリー: イベント

タグ:

一般研究

研究集会II

開催概要

- 開催方法:九州大学 伊都キャンパスとZoomミーティングによるハイブリッド開催
- 開催場所:九州大学 伊都キャンパス ウェスト1号館 C棟 5階 (W1-C-513 中講義室)
- 主要言語:日本語
- 主催:九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
- 種別・種目:一般研究-研究集会(II)
- 研究計画題目:統計数学×情報×物質セミナーの開催
- 研究代表者:天本 義史(一橋大学・ソーシャルデータサイエンス研究科・特任准教授)
- 研究実施期間:2023年6月9日(金),2023年8月21日(月),2023年12月18日(月)
- 公開期間:2023年6月9日(金),2023年8月21日(月),2023年12月18日(月)
- 研究計画詳細:https://joint1.imi.kyushu-u.ac.jp/research_choose/view/2023a011

プログラム

6月9日(金)

データ駆動による物性・情報計測科学の最近の動向 ~データから理を見つける~

13:30-14:00【チュートリアル講義】

熊添 博之(一橋大学大学院ソーシャル・データサイエンス研究科)
ベイズ推定の基礎 ~材料パターン情報学に向けて~

14:00-14:20【若手講演】

吉田 航(九州大学大学院マス・フォア・イノベーション連携学府)
スパース動的回帰モデルによる時系列分析

14:20-15:10

徳田 悟(九州大学情報基盤研究開発センター)
計測データに根ざした数理モデリングのための統計的アプローチ

15:30-16:20

本武 陽一(一橋大学大学院ソーシャル・データサイエンス研究科)
深層学習を用いた材料パターン情報学へ向けた取り組み

16:20-16:40【若手講演】

田中 京介・加納 英明(九州大学大学院理学研究院)
コヒーレント・ラマンスペクトルのMCR解析

16:40-17:30

水牧 仁一朗(熊本大学大学院先端科学研究部)
ベイズ推定によるマルチモーダル測定データ統合

開催日:2023/10/13~2023/10/13

統計数学×情報×物質セミナーの開催② | 共2023a011

カテゴリ: イベント

タグ:

一般研究

研究集会II

開催概要

- 開催方法:九州大学 伊都キャンパスとZoomミーティングによるハイブリッド開催
- 開催場所:九州大学 伊都キャンパス ウエスト1号館 D棟 4階 IMIオーディトリウム (W1-D-413)
- 主要言語:日本語
- 主催:九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
- 種別・種目:一般研究-研究集会 (II)
- 研究計画題目:統計数学×情報×物質セミナーの開催
- 研究代表者:天本 義史 (一橋大学・ソーシャルデータサイエンス研究科・特准准教授)
- 研究実施期間:2023年6月9日(金), 2023年10月13日(金), 2023年11月22日(水)
- 公開期間:2023年6月9日(金), 2023年10月13日(金), 2023年11月22日(水)
- 研究計画詳細:https://joint1.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2023a011

プログラム

10月13日(金)

13:05-14:35

藤野 友和 (福岡女子大学・国際文理学部)
Rチュートリアル

14:50-15:40

加藤 幸一郎 (九州大学・工学研究院)
TBA

16:00-16:50

寺山 慧 (横浜市立大学・生命医科学研究科)
データ駆動型相図構築: 状態図から液液相分離まで

17:00-17:50

義永 那津人 (東北大学・材料科学高等研究所)
自己組織化による構造形成のための数理モデルの推定

…開催日:2023/11/22~2023/11/22

統計数学×情報×物質セミナーの開催③ | 2023a011

カテゴリ: イベント

タグ: (一般研究) 研究集会II

開催概要

- 開催方法:九州大学 伊都キャンパスとZoomミーティングによるハイブリッド開催
- 開催場所:九州大学 伊都キャンパス ウェスト1号館 D棟 4階 IMIオーデトリウム (W1-D-413)
- 主要言語:日本語
- 主催:九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
- 種別・種目:一般研究-研究集会(II)
- 研究計画題目:統計数学×情報×物質セミナーの開催
- 研究代表者:天本 義史(一橋大学・ソーシャルデータサイエンス研究科・特任准教授)
- 研究実施期間:2023年6月9日(金),2023年10月13日(金),2023年11月22日(水)
- 公開期間:2023年6月9日(金),2023年10月13日(金),2023年11月22日(水)
- 研究計画詳細:https://joint1.imi.kyushu-u.ac.jp/research_choosees/view/2023a011

プログラム

11月22日(水)

● 13:30 - 13:40

開会の挨拶

● 13:40 - 14:30 (40分講演、10分質疑応答)

日下 康成(積水化学工業株式会社 R&Dセンター 先進技術研究所 情報科学推進センター)
変化する素材産業における統計数学の活用 -マテリアルズインフォマティクスを中心に-

● 14:30 - 14:40

10分休憩

● 14:40 - 15:30 (40分講演、10分質疑応答)

吉田亮(統計数理研究所)
データ駆動型材料研究における実験・シミュレーション・機械学習の融合

● 15:30 - 15:50

20分休憩

● 15:50 - 16:40 (40分講演、10分質疑応答)

池 祐一(九州大学マス・フォア・インダストリ研究所)
位相的データ解析とその応用

● 16:40 - 16:50

10分休憩

● 16:50 - 17:40 (40分講演、10分質疑応答)

久池井 茂(北九州工業高等専門学校)
第4次産業革命におけるデジタルものづくり

● 17:40 - 17:50

閉会の挨拶

● 17:50~

フリーディスカッション