

2024年度共同利用研究報告書

2025年04月19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 | 2024a011 |
|----------|-----------------------------------|---------------------------|-------------|
| 1.研究計画題目 | 統計数学×情報×物質セミナー | | |
| 2.新規・継続 | 継続 | | |
| 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 | 2025年01月27日(月曜日)～2025年01月27日(月曜日) | | |
| | 2025年02月28日(金曜日)～2025年02月28日(金曜日) | | |
| 8.キーワード | マテリアルズインフォマティクス、統計数理、物質科学、材料科学 | | |
| 9.参加者人数 | 85人 | | |

10.本研究で得られた成果の概要

【研究目的】

本研究では、数学・統計・情報科学と物質・材料科学の研究者が相見え、情報交換や共同研究のためのネットワーキングを目的とする。本年度は、特に「情報計測」と「数学とマテリアルズDX」をサブテーマとして取り組んだ。

【研究集会の開催】

2024年度、半日の研究集会を二回開催し、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10名にご登壇いただいた。内訳として、大学・公的研究機関7名、産業界3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。産業界から研究DX、統計数理研究所の矢野博士から数理統計に関して、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、ネットワーキングを図ることができた。また、聴講者として、登録ベースで約90名にご参加いただいた。

2024 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）

加藤 幸一郎（九州大学 工学研究院）

徳田 悟（九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所）

辻 雄太（九州大学 総合理工学研究院）

【研究背景】

近年、「数学・統計・情報科学」と「物質・材料科学」の融合研究が盛んに取り組まれている。例えば、材料開発の加速を志向したマテリアルズインフォマティクスの進展が見られる。最近では、最先端の情報科学や計測科学、計算科学と融合し、物質・材料研究において、「分子・プロセス設計」、「機序の理解」、「物性・特性の予測」などの人間が本来行う研究活動の高度化・複雑化・自動化というフェーズに入っている。しかしながら、これらの研究を進める際に、それぞれの分野の基礎知識の獲得や融合研究を進める場の構築が難しく、汎用的に広がるまで高いハードルがある。

【研究目的】

本研究では、数学・統計・情報科学と物質・材料科学の研究者が相見え、情報交換や共同研究のためのネットワーキングを目的とする。本年度は、特に「情報計測」と「数学とマテリアルズ DX」をサブテーマとして取り組んだ。

【研究集会の開催】

2024 年度、半日の研究集会を二回開催し、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 10 名にご登壇いただいた。内訳として、大学・公的研究機関 7 名、産業界 3 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。産業界から研究 DX、統計数理研究所の矢野博士から数理統計に関して、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、ネットワーキングを図ることができた。また、聴講者として、登録ベースで約 90 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 (2025 年 1 月 27 日)

第 1 回目のセミナーは「数学とマテリアルズ DX」というテーマのもと開催された。

2 部構成から成り、第 1 部は産業界（日立製作所）から、ランチョンセミナーという形式で講演を頂いた。物質科学が関わる事業の DX への取り組みについて、システムの構成からサービス内容、顧客が求めているものに対する付加的なサービスなど多岐にわたる内容のあとに、それらを満たす数学的研究の取り組みについて講演が続いた。

第 2 部の最初の講演では、現代のデータ科学における現象論的な側面と意味的な側面という 2 つの相対的な側面から、その数理について議論した。続いて、大規模言語モデルなどの基盤モデルをもとにおもに化学や化学実験 DX への試みが紹介された。このような基礎数理と局所的な化学 DX から、より巨視的な視点、海洋での CO2 循環化学（=ブルーカーボン）の講演が続いた。主に河川でのブルーカーボンを対象とし、工場からの排水は季節によっては環境浄化とコストの低下につながる好循環であることが示された。最後に、環境問題を物質科学として支える電池のインフォマティクスについて議論を行った。

「数学とマテリアルズ DX」というテーマで行われた今回のセミナーが期せずして、環境問題について多方面から、数理的、基盤モデル、巨視的循環と材料インフォマテ

ィクスと相互に関連した話題を提供できたことは本申請研究の特色ではないかと思われる。参加者も 50 名強となり、所属の内訳は、民間企業 3~4 割、公的機関 3 割、学内残りであり、民間所属者の聴講者が高かったのも特徴である。

・研究集会 2 回目 (2025 年 2 月 28 日)

第 2 回目の研究集会では、高次元データを共通軸として、計測と統計解析の専門家をそれぞれお招きし、計 4 件のご講演をいただいた。一件目は統計数理研究の矢野恵佑氏によるチュートリアルで、高次元統計の最新研究について基礎からわかりやすくレクチャーしていただいた。二件目はトヨタ自動車の坂本浩隆氏によるご講演で、材料産業におけるデータ解析のニーズと数学の活用、統計解析ソフトウェアへの展開についてご紹介いただいた。三件目は量子科学技術研究開発機構の岩澤英明氏によるご講演で、NanoTerasu における最新の放射光技術の紹介と共に、角度分解光電子分光とインフォマティクスを駆使した物性研究について解説していただいた。四件目は本学超顕微解析研究センターの山本知一氏によるご講演で、電子顕微鏡の原理から丁寧に解説していただくと共に、材料研究への活用やインフォマティクスとの融合に関する事例を紹介していただいた。いずれの講演も高次元統計の数学が見え隠れする興味深いものであり、会場では参加者同士での盛んな議論が行われた。

開催日:2025/01/27~2025/01/27

(予告)統計数学×情報×物質セミナー～数学とマテリアルズDX～① | 2024a011

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 5階 数理会議室 (W1-D-504)
- 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
- 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:2025年1月27日(月)、2025年2月28日(金)
- 公開期間:2025年1月27日(月)、2025年2月28日(金)
- 研究計画詳細:https://joint2.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2024a011

※ランチオンセミナーにて、対面参加でお弁当を希望する場合、手配の都合上、

1/24(金)までに登録して下さい。お弁当代1080円がかかります。

1/25(土)以降の登録では、ご自身の昼食の用意をお願いします。

プログラム

1月27日(月)

第一部 12:00-13:10 ランチオンセミナー

●12:00-12:50

森田秀和(日立製作所 公共システム事業部)

日立が考える素材産業の研究DX

●12:50-13:10

刑部好弘(日立製作所 R&D先端AIイノベーションセンタ)

分子構造生成モデル:統計的言語普遍と外挿領域からの生成

第二部 13:30-17:30

●13:30-14:20

今泉允聡(東京大学総合文化研究科先進科学研究機構)

現代的データ科学の数理:新しい高次元統計とインコンテキスト学習の統計理論

●14:30-15:20

畠山 歆(東京科学大学 物質理工学院)

化学実験の様子をデータ化するための基盤モデルの活用

●15:40-16:30

菊地 淳(理化学研究所環境資源科学研究センター)

計測インフォマティクスによる産学連携DX構想

●16:40-17:30

井上元(九州大学工学研究院化学工学部門)

電池分野における計測・計算・材料開発連携研究の紹介

開催日: 2025/02/28~2025/02/28

統計数学×情報×物質セミナー②～高次元データの計測と統計解析～ | 2024a011

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・特任准教授)
- 研究実施期間: 2025年1月27日 (月)、2025年2月28日 (金)
- 公開期間: 2025年1月27日 (月)、2025年2月28日 (金)
- 研究計画詳細: https://joint2.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2024a011

プログラム

2月28日 (金)

13:00-14:30【チュートリアル講義*】

矢野 恵佑 (統計数理研究所 数理・推論研究系)

高次元からのデータ科学への挑戦状

アブストラクト:

今日では、計測技術の発展やデータ科学の普及により、多種多様なデータを扱う機会が増えています。これらのデータは、いわゆるビッグデータであるだけでなく、取り扱う変数の数も多様かつ膨大であるため、高次元データとして解析することが求められます。データの多様性を最大限に活用するためには、データのもつ高次元空間の特性を生かした解析が有効です。本講演では、高次元データ科学の理論的背景と応用事例を中心に、今後の発展可能性についてもご紹介します。

14:45-15:35

坂本 浩隆 (トヨタ自動車株式会社 先進データサイエンス統括部)

データ解析クラウドサービスへの先端数学の活用

15:50-16:40

岩澤 英明 (量子科学技術研究開発機構 放射光科学研究センター)

顕微光電子分光と計測インフォマティクスで切り拓く量子物性研究

16:55-17:45

山本 知一 (九州大学 超顕微解析研究センター)

電子顕微鏡の多次元データ解析における情報科学の活用

*本チュートリアル講義は、九州大学マス・フォア・インダストリ研究所産業数理統計研究部門のチュートリアルと共同で開催されます。