

2025年度共同利用研究報告書

2026年03月23日

所属・職名 東京大学大学院新領域創成科学研究科・特任准教授

天本 義史

		整理番号	2025a041	
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	東京大学大学院新領域創成科学研 究科	職 名	特任准教授
7.研究実施期間	2025年11月21日(金曜日)～2025年11月21日(金曜日)			
	2026年02月20日(金曜日)～2026年02月20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	62人			

10.本研究で得られた成果の概要

<p>【研究目的】</p> <p>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。統計数学×情報×物質セミナーの3年間の最終年度として、本年度は、「数学とマテリアルズDX」をサブテーマとして取り組み、さらに九州大学の学部生・大学院生の発表や情報交換の機会を設けた。</p> <p>【成果の概要】</p> <p>3年目ということもあり、既に共同研究として、執筆した論文がある。例えば、組織委員の天本・辻と講演者の横浜市大の寺山らで、機械学習を用いた生分解性プラスチックの開発について報告した (npj Comput Mater (2025))。また、組織委員の五島・徳田で液液相分離の色変化と非平衡ダイナミクス解析について報告した (Droplet (2024))。さらに、講演者の横浜市大の寺山と聴講者の九大の小野が研究集会で知り合い、共同研究を始めて、生成AIの活用による発光性Al錯体の合成について論文執筆中である。今年度は、九州大学の学部生や大学院生の発表会を設けており、このセミナーのネットワークを若手人材まで広げることができた。</p>
--

2025 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（東京大学 新領域創成科学研究科）

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」の融合研究が重要になっている。例えば、情報科学の手法を用いて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。一方、統計数理の手法に基づき、物質の特性・機能が発現する機序の理解にも盛んに取り組まれている。最近では、AI for Science が重点課題として挙げられているように、融合研究が数理・情報を専門としないドメイン側の研究者まで徐々に浸透している。それと同時に、両者の基礎知識を有し、実データの活用ができる若手の人材育成も急務となっている。

【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クングを目的とする。統計数学×情報×物質セミナーの3年間の最終年度として、本年度は、「数学とマテリアルズ DX」をサブテーマとして取り組み、さらに九州大学の学部生・大学院生の発表や情報交換の機会を設けた。

【研究集会の開催】

2025 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クングを図った。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。講演者として、計7名にご登壇いただいた。内訳として、大学・公的研究機関6名、産業界1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。大学・公的研究機関からは、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、ネットワークングを図ることができた。産業界から基盤モデルとAI エージェントに関して、先端の動向を紹介いただいた。2 回目の第二部では、九州大学の若手研究者の発表の機会を設けた。また、聴講者として、登録ベースで約50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 11 月 21 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。講演は、離散的な観測データを関数データとみなして、統計的手法で解を求める取り組みと産業データの活用、その後は、化学・材料における AI の普及や基盤モデルの統合パッケージのオープンソース化、AI エージェントの紹介と続いた。前半の 2 つの講演は、滋賀大学の松井氏から「関数データに基づく統計的モデリング」、日本 IBM の武田氏による「基盤モデルと AI エージェントの切り拓く材料科学の新時代」として上流から下流を含めた数学と産業の DX が推進されている貴重な講演でもあった。次いで、東京科学大学の吉川氏から「AI とロボットで科学研究を加速する」という題目で研究現場での DX の取り組み、筑波大学の出口氏による「支配原理に基づく制約を課した機械学習の工学問題への応用」として物理問題に特化したニューラルネットワーク、最後は九州大学の草場氏から「半導体結晶成長におけるプロセスインフォマティクスの取り組み」というタイトルでプロセスインフォマティクスに関する講演が行われた。研究レベルでの DX、機械学習やインフォマティクスの実例について講演が行われ、活発な議論がなされた。参加者は 50 名程となり、所属の内訳は、民間企業 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は特徴である。

・研究集会 2 回目 (2026 年 2 月 20 日)

第 2 回目のセミナーは 2 部に分割されたプログラムのもと開催された。第 1 部は知性と情報をテーマに講演が行われた。はじめに茨城大学の笹井氏から「知性とハードプロブレムにおける臨界性について」と題した基礎講演のあと、東京大学の柏村氏から「物理パラメータのベイズ推定とサロゲートモデリングを用いた効率化」としてベイズ推定による物理量を求める新しい手法や、笹井氏から「普遍的臨界なシステムとその応用」という題目で情報科学における相転移現象である臨界についての非連続性とべき性質について議論が行われた。今年度が本セミナーの最終年度であることもあり、3 年間の本セミナーのあゆみと研究者ネットワークについて総括のあと、第 2 部へと続いた。第 2 部では、九州大学の学部生や大学院生 7 名による講演が行われ、ベイズ推定、ニューラルネットワークを用いた物性パラメータをもとめる手法など話題に富んだ内容であった。

開催日:2025/11/21～2025/11/21

統計数学×情報×物質セミナー①～数学とマテリアルズDX～ | 2025a041

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
- 研究代表者:天本 義史(東京大学大学院新領域創成科学研究科・特任准教授)
- 研究実施期間:2025年11月21日(金)
- 公開期間:2025年11月21日(金)
- 研究計画詳細:https://joint2.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2025a041

プログラム

11月21日(金)

●12:30-12:35

開会の辞

●12:35-13:20

松井秀俊(滋賀大学データサイエンス学部)

関数データに基づく統計的モデリング

～時系列データの集合を関数として扱おう～

●13:35-14:20

武田征士(日本IBM東京基礎研究所)

基盤モデルとAIエージェントの切り拓く材料科学の新時代

●14:20-15:05

吉川成輝(東京科学大学総合研究院難治疾患研究所)

AIとロボットで科学研究を加速する

●15:25-16:10

出口翔大(筑波大学システム情報系)

支配原理に基づく制約を課した機械学習の工学問題への応用

●16:10-16:55

草場彰(九州大学応用力学研究所)

半導体結晶成長におけるプロセスインフォーマティクスの取り組み

●16:55-17:00

閉会の辞

●終了後～

意見交換会

開催日: 2026/02/20~2026/02/20

統計数学×情報×物質セミナー② | 2025a041

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:
 - 第一部: 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
 - 第二部: 対面開催のみ
- 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 大講義室 (W1-C-501)
- 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11月21日 (金)、2026年2月20日 (金)
- 公開期間: 2025年11月21日 (金)、2026年2月20日 (金)
- 研究計画詳細: https://joint2.imi.kyushu-u.ac.jp/research_choose/view/2025a041

プログラム

2月20日 (金)

第一部 ハイブリッド開催

● 12:30-12:35

開会の辞

● 12:35-13:35 基礎講座・チュートリアル

笹井一人 (茨城大学大学院理工学研究科)

知性とハードプロブレムにおける臨界性について

● 13:50-14:40

柏村 周平 (東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻)

物理パラメータのベイズ推定とサロゲートモデリングを用いた効率化

● 14:50-15:40

笹井一人 (茨城大学大学院理工学研究科)

普遍的臨界なシステムとその応用

● 15:40-15:50

本セミナーの歩みと研究者ネットワーク

● 15:50-15:55

閉会の辞

第二部 若手研究者による発表 対面のみ

● 16:20-16:35

室屋 秀平 (マス・フォア・イノベーション連係学府)

ブラックボックス関数の最適化: ベイズ最適化の紹介

● 16:35-16:50

岩井 宏樹 (九州大学大学院総合理工学府)
ベイズ最適化と第一原理計算による吸着構造探索手法の開発

●16:50-17:05

山本有流 (九州大学)
加速故障時間モデルを用いた寿命予測

●17:20-17:35

麻生 雅貴 (九州大学工学部融合基礎工学科)
固体表面における非共有結合相互作用の可視化

●17:35-17:50

岡本 大和 (九州大学工学部応用化学科)
古典分子動力学法と量子化学計算の連携によるタンパク質-リガンド複合体の動的相互作用解析

●17:50-18:05

田鶴谷 有美 (九州大学工学部応用化学科)
分子生成AIを用いたスイッチ機能を有する新規蛍光分子の探索

●18:05-18:20

小山 拓人 (九州大学工学部融合基礎工学科)
機械学習手法を活用したハイエントロピー酸化物の安定構造探索