

令和5年度高性能汎用計算機高度利用事業
「富岳」成果創出加速プログラム
「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」
成果報告書

令和6年5月30日
大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

吉田 亮

目次

1. 補助事業の目的	- 1 -
2. 令和5年度（報告年度）の実施内容	- 1 -
2－1. 当該年度（令和5年度）の事業実施計画	- 1 -
2－2. 実施内容（成果）	- 2 -
2－3. 活動（研究会の活動等）	- 6 -
2－4. 実施体制	- 6 -

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出

体系的番号： JPMXP1020200314

1. 補助事業の目的

高分子物性自動計算システム RadonPy を用いて、データ駆動型材料研究に資する包括的な高分子物性データベースを構築する。

2. 令和5年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和5年度）の事業実施計画

(1) 「データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発」

令和5年度は、富岳計算資源を活用して、アモルファスポリマー、生分解性ポリマー（例：セルロース誘導体）、架橋高分子、共重合体ポリマー、温度依存性物性等の包括的なデータセットを作成する。また、引き続き API やユーザーインターフェース等の開発を推進し、それらの成果を元に、データベース公開の準備を進める。

(2) 「高分子物性自動計算ソフトウェア RadonPy の開発」

計算対象の物性（ガラス転移温度、溶媒和自由エネルギー、レオロジー物性など）と系（架橋高分子、1軸延伸配向ポリマー、結晶性高分子、高分子溶液など）を拡張し、令和5年度は、RadonPy のセカンドリリースを実施することに注力する。

(3) 「マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進」

RadonPy と高分子設計の機械学習アルゴリズム（確率的分子生成モデル、ベイズ推論に基づく逆解析、適応的実験計画法など）を統合し、サイバー空間上で高分子材料を自動設計できる仮想ラボラトリーワークフローを構築・実装する。また、高熱伝導高分子液晶や、特に令和5年度は、セルロース誘導体などを対象に実証研究、具体的には新材料創成に向けた研究活動を、推進する。

(4) 「プロジェクトの総合的推進」

本プロジェクトは、複数の国研・大学・企業が参画するコンソーシアム型共同事業として推進される。現時点で1国研・3大学・25企業（約120名）が参画しており、令和4年度は、規約の制定などのコンソーシアム運営のための制度設計を実施した。このような大規模プロジェクトを円滑に進めていくために、定期的に運営会議とテクニカルミーティングを、令和5年度は8回程度開催し、参画機関の間で意見交換と情報交換を行っていく。また、論文発表・学会発表やホームページでの情報公開を通じて、プロジェクトの研究成果を積極的に発信していく。特にコンソーシアム全体の共同研究成果として令和5年度以

降のデータベース公開時期に合わせて論文発表を行う。これは本プロジェクトの成果のフラグシップ的な論文になる。さらに、令和5年度内（第四四半期を予定）に本プロジェクトの成果発表と情報発信を目的とする成果報告会を開催する。

2-2. 実施内容（成果）

本研究では、高分子物性全自動計算ソフトウェア RadonPy と「富岳」を用いて世界最大級の高分子物性データベースを開発し、データ駆動型高分子材料研究に資する体系的且つ包括的なデータプラットフォーム及び機械学習の基盤技術を整備する。

(1) 「データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発」

RadonPy は、全原子古典分子動力学（以下、MD: molecular dynamics）に基づく高分子物性計算機実験を全自動化する世界初の Python オープンソースソフトウェアである（Hayashi et al., npj Comput Mater 8, 222 (2022)）。高分子の繰り返し単位の化学構造、重合度、温度等の計算条件を入力とし、配座探索、電荷計算、力場パラメータの割当、ポリマー鎖の生成、シミュレーションセルの構築、平衡・非平衡 MD 計算、ポストプロセス段階での物性計算等、MD 計算の全工程を完全に自動実行する（図 1）。

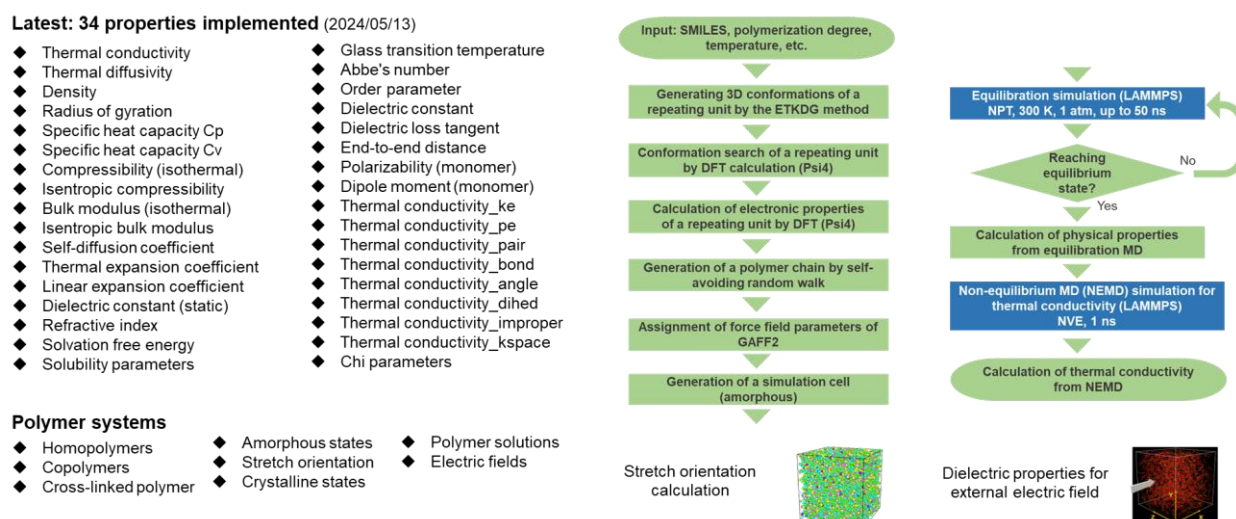


図 1: RadonPy 自動計算機実験のワークフローと計算可能物性

最新版には、熱物性、機械特性、光学特性を含む 34 種類の物性の自動計算アルゴリズムが実装されている（図 1）。本研究では、「富岳」の大量のノードを用いて多数のポリマーの物性計算を並列に実行し、最終的に 10 万種類以上の分子骨格を包含するオープンデータベースを構築する。令和5年度までに、約 8 万個のアモルファスポリマーの物性計算が完了した。また、生分解性ポリマーの開発を戦略目標の一つに定め、約 3 万個のセルロース誘導体の物性地図を作成した。このデータ集合を JST 共創の場形成支援プログラム（COI-NEXT）共創分野本格型「再生可能多糖類植物由来プラスチックによる資源循環社会共創拠点」と共有し、既存のプラスチック樹脂を代替する再生可能バイオプラスチックの創製を目指す。ポリマー数種の単純換算では、本データベースの規模は世界最大となる。図 2 に示すように、データ生産の過程で大量のポリマーの複数物性の同時分布が鮮明に観測された。その結果、複数物性のトレードオフが形成す

るパレートフロンティアの位置とパレート解を構成するポリマー群の構造的特徴に関する体系的な知見が得られた。現在の計測・合成技術では、このようなスケールで物質空間を網羅的に観測することは難しい。

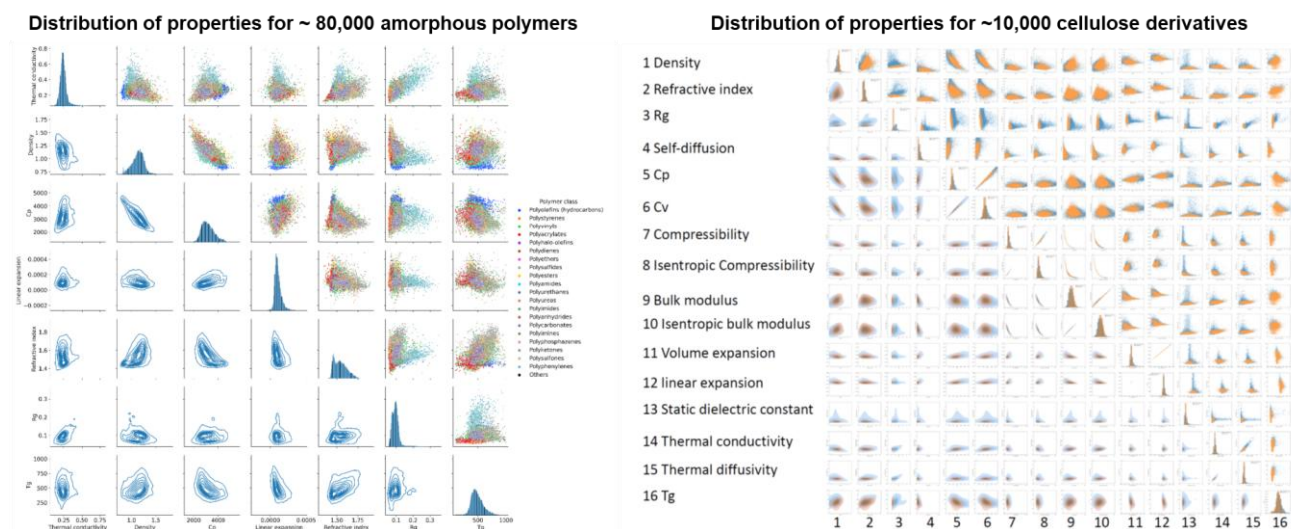


図 2: 様々な物性の同時分布とパレートフロンティア

さらに、Sim2Real 転移学習という方法論を導入し、計算機実験の大量データと限られた実験データを統合的に解析することで実験物性に対する高い汎化能力を持つ予測器（熱物性や高分子・溶媒相溶性、屈折率など）を構築した。材料研究では、データの不足を補う手段の一つとして、機械学習とシミュレーションの融合が重要な役割を担う。転移学習は、元ドメインの学習モデルを目標ドメインの学習に利活用するためのデータ解析の方法論の総称である。目標ドメインでは実験データが少なくフルスクラッチの学習が難しいが、関連する元ドメインを適切に選定した上で、目標ドメインのデータやモデル、特徴量の表現等を巧く利用することでデータ量の不足を補う。材料研究では、シミュレーションのデータを元ドメインとし、少数の実験データを目標ドメインとした多数の研究事例が報告されている。RadonPy の計算物性データベースの活用方法の一つは、転移学習のソースデータとしての利用である。令和 5 年度は、RadonPy の計算物性データベースを用いた現実系への転移可能性を多角的に検証した。

大量の計算物性データを用いて訓練された事前学習モデルを、実験データを用いて現実系の予測モデルにファインチューニングする。このとき、計算物性データベースのサイズ n に対して、現実系の予測モデルの汎化誤差は、次のべき乗則に従うことが理論的に示唆されている。

$$\text{test error} = Dn^{-\alpha} + C$$

n の増加に対する改善率 α が大きく、転移ギャップ C が小さくなるようにデータベースを設計することが望ましい。特に、転移ギャップはデータベースを拡大していくことで到達可能な汎化性能であり、計算物性データベースの将来価値を表す指標になる。令和 5 年度は、RadonPy データベースの現実系に対する転移可能性とスケーラビリティに関する系統的な評価を実施した。その結果、多数の現実系タスクにおいて、シミュレーションデータの増大により転移モデルの汎化能力がべき乗則に従って向上していく現象が確認された（図 3）。

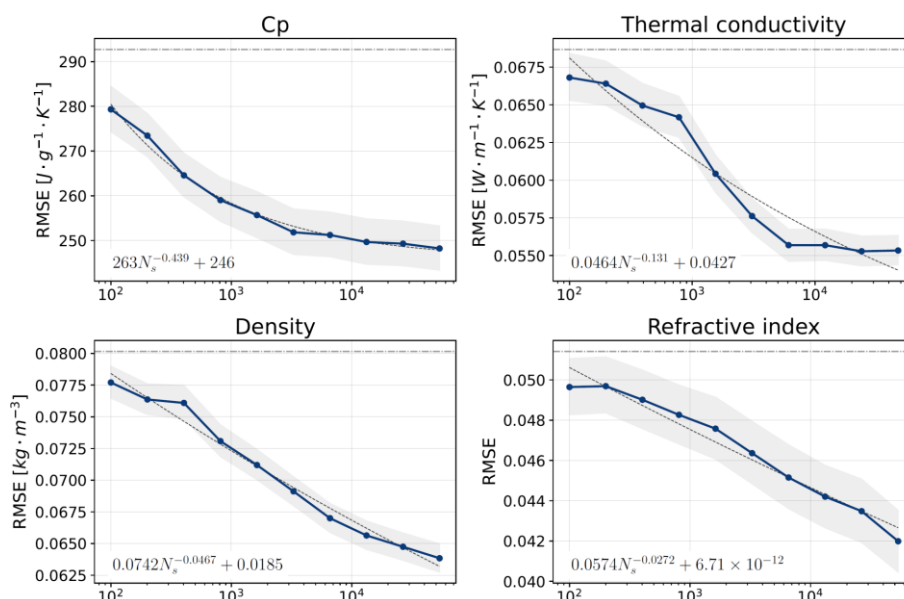


図 3: Sim2Real 転移学習のスケーリング則. RadonPy データの拡大に従い、実験物性に対する汎化性能が改善する。

(2) 「高分子物性自動計算ソフトウェア RadonPy の開発」

現時点において、熱物性、機械特性、光学特性を含む 34 物性の自動計算アルゴリズムの実装が完了した(図 1)。RadonPy には、様々な骨格の高分子材料に適用可能な検証済みパラメータセットと計算条件（プリセット）が標準搭載されている。プリセットの設定では、物質・材料研究機構の協力を得て PoLyInfo の実験データをベンチマークとして使用した。重合度等の計算条件や分子骨格の種類が計算値に与える影響、物性毎の予測精度や性能限界を調べた上で、計算条件の標準化が行われている。令和 5 年度は、誘電率、誘電正接、溶解度パラメータ、溶媒和自由エネルギーの自動計算を実装した。また、ガラス転移温度、アッベ数、共重合体ポリマー、交流電場下の誘電特性や延伸配向構造の熱伝導率、架橋ポリマーの物性計算等も新たに扱えるようになった。また、量子化学計算とマルチタスク学習を組み合わせ、ポリマーと有機溶媒の相溶性を予測するモデルを開発し、論文発表とソフトウェア公開、プレスリリースを実施した(Aoki et al., *Macromolecules* 56, 5446-5456 (2023))。このモデルを用いて RadonPy データベースに登録されている仮想ポリマーの汎用有機溶媒に対する可溶性を評価し、合成可能性指標のひとつとしてデータベース化した。

(3) 「マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進」

高分子材料のマテリアルズインフォマティクスに関する統計的機械学習の方法論とソフトウェアを開発したマテリアルズインフォマティクスの要素技術開発に関する主な成果は、以下の通りである。

1. 高分子・溶媒の相溶性予測モデルを開発し、論文発表とソフトウェア公開、プレスリリースを実施した (Aoki et al., *Macromolecules* 56, 5446-5456 (2023))。
2. 22 種類のポリマー重合反応ルールを実装した仮想高分子生成モデル SMiPoly の論文発表とソフトウェア公開、プレスリリースを実施した (Ohno et al., *J Chem Inf Model* 63, 5539-5548 (2023))。本論文は、同誌のカバーアートに選定され、さらに化学工業日報 1 面でも取り上げられた。
3. 逆合成経路の予測アルゴリズムに関する論文発表とソフトウェア公開を実施した (Zhang et al., *STAM Methods* 3, 2204994 (2023))。本論文は同誌の Editor's choice に選定されて、プレスリリースが行われ

た。さらに現代科学 2023 年 8 月号 “FALSH” に特筆すべき新技術として取り上げられた。

4. ある正則条件の下で期待損失を最小にするキャリブレーションモデルあるいは転移学習の族「アフィン転移学習」を発見し、論文を発表した (Minami et al., Adv Neural Inf Process Syst 36 (2023))。本成果の特集記事が、日経ロボティクス No 105 の“Sexy Technology”に掲載された。
5. カーネル平均埋め込みという機械学習理論を用いて、力場パラメータに基づくポリマー組成情報の完全表現記述子を開発し、論文発表とソフトウェア公開を実施した (Kusaba et al., Phys Rev B 108, 134107 (2023))。
6. 高分子の繰り返し単位から液晶転移の有無を予測する機械学習モデルを開発した。
7. 上記項目 2, 4 と RadonPy の高分子物性計算機自動実験を統合した高分子設計材料自動設計ソフトウェア SPACIER を開発した。

実証研究では、液晶状態を形成するポリマーを設計する機械学習アルゴリズム (項目 6) を用いて、芳香族ポリイミドの大規模仮想ライブラリから 7 個の候補に絞り込み、ポリマー重合を実施した。合成されたポリイミド樹脂はいずれもスメクチック相を形成し、熱伝導率が $1.0 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ を超えることを確認した。これらは機械学習により予測・発見された初めての高分子液晶である。また、項目 7 のシステムを用いて、光学ポリマーの要求特性である高屈折率と高アッベ数を併せ持つポリマーを設計し、合成実験と物性測定を実施した。

(4) 「プロジェクトの総合的推進」

現時点において、統計数理研究所に加えて 8 大学 35 企業に属する計 219 名が本プロジェクトに参画している (令和 5 年度当初は 1 国研 3 大学 23 企業に属する計 123 名が参画)。多数の参画者による複数の共同研究プロジェクトを円滑に進めるために、定例ミーティングや Slack、ソフトウェア講習会等を介して密に情報・技術共有を行ってきた。令和 5 年度の定例ミーティング及び研究交流会、RadonPy 講習会の開催履歴は、以下の通りである。

テクニカルミーティング (プロジェクトの進捗報告・情報交換に関するミーティング)

- ・ 第 12 回 2023 年 5 月 9 日 (火) 66 名
- ・ 第 13 回 2023 年 7 月 11 日 (火) 84 名
- ・ 第 14 回 2023 年 9 月 12 日 (火) 65 名
- ・ 第 15 回 2023 年 11 月 14 日 (火) 75 名
- ・ 第 16 回 2024 年 3 月 14 日 (木) 54 名

研究交流会

日時：2024 年 2 月 6 日～2 月 7 日

場所：神戸ポートピアホテル (Zoom オンラインハイブリッド開催)

発表タイトル：

- ・ RadonPy プロジェクトの現状と展望
- ・ RadonPy データベースを用いた Sim2Real 転移学習
- ・ RadonPy によるセルロース誘導体の物性解析
- ・ マルチタスク学習によるポリマー/低分子間の Flory-Huggins 相互作用パラメータの予測

- ・ ポリイミドの構造と誘電特性の相関解析
- ・ メタラーニングによる外挿性の獲得
- ・ その他：ポスター発表

RadonPy 講習会

- ・ 2023 年 8 月 7 日「RadonPy 初級者向け講習会」(34 名)
- ・ 2024 年 1 月 19 日「RadonPy 初級者向け講習会」(49 名)

2-3. 活動（研究会の活動等）

- ・ 2024 年 3 月 28 日 一橋講堂 ものづくりデータ科学研究センター感謝祭「SIM2REAL マテリアルズインフォマティクス」(参加者 176 名)
- ・ 2024 年 2 月 6 日-7 日 神戸ポートピアホテル「RadonPy コンソーシアム研究交流会」(参加者 100 名)
- ・ 2024 年 1 月 19 日「RadonPy 初級者向け講習会」(49 名)
- ・ 2023 年 8 月 7 日「RadonPy 初級者向け講習会」(34 名)

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮
(2) 高分子物性自動計算ソフトウェア RadonPy の開発	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所 東京都目黒区大岡山 2-12-1-S1-20 東京工業大学 物質理工学院	吉田 亮 古屋 秀峰
(3) マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮
(4) プロジェクトの総合的推進	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮

別添 1 学会等発表実績

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期
1	Transfer learning with affine model transformation	Shunya Minami, Kenji Fukumizu, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida	Advances in Neural Information Processing Systems 36	2023 年 12 月
2	Deep learning enables rapid identification of a new quasicrystal from multiphase powder diffraction patterns	Hiroataka Uryu, Tsunetomo Yamada, Koichi Kitahara, Alok Singh, Yutaka Iwasaki, Kaoru Kimura, Kanta Hiroki, Naoya Miyao, Asuka Ishikawa, Ryuji Tamura, Satoshi Ohhashi, Chang Liu, Ryo Yoshida	Advanced Science 11	2023 年 11 月
3	Representation of materials by kernel mean embedding	Minoru Kusaba, Yoshihiro Hayashi, Chang Liu, Araki Wakiuchi, Ryo Yoshida	Physical Review B 108	2023 年 10 月
4	Quasicrystals predicted and discovered by machine learning	Chang Liu, Koichi Kitahara, Asuka Ishikawa, Takanobu Hiroto, Alok Singh, Erina Fujita, Yukari Katsura, Yuki Inada, Ryuji Tamura, Kaoru Kimura, Ryo Yoshida	Physical Review Materials 7	2023 年 9 月
5	SMiPoly: Generation of a synthesizable polymer virtual library using rule-based polymerization reactions	Mitsuru Ohno, Yoshihiro Hayashi, Qi Zhang, Yu Kaneko, Ryo Yoshida	Journal of Chemical Information and Modeling 63	2023 年 8 月
6	Multitask machine learning to predict polymer-solvent miscibility using flory-huggins interaction parameters	Yuta Aoki, Stephen Wu, Teruki Tsurimoto, Yoshihiro Hayashi, Shunya Minami, Okubo Tadamichi, Kazuya Shiratori, Ryo Yoshida	Macromolecules 56(14)	2023 年 7 月
7	A Bayesian method for concurrently designing molecules and synthetic reaction networks	Qi Zhang, Chang Liu, Stephen Wu, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida	Science and Technology of Advanced Materials: Methods 3(1)	2023 年 5 月
8	[プレプリント] Advancing extrapolative predictions of material properties through learning to learn	Kohei Noda, Araki Wakiuchi, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida	arXiv	2024 年 3 月投稿
9	[プレプリント] Shotgun crystal structure prediction using machine-learned formation energies	Chang Liu, Hiromasa Tamaki, Tomoyasu Yokoyama, Kensuke Wakasugi, Satoshi Yotsuhashi, Minoru Kusaba, Ryo Yoshida	arXiv	2023 年 5 月投稿

2. 国際会議・シンポジウムにおける口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名（所属機関）	発表した場所（学会名等）	発表した時期
1	物性自動計算システム RadonPy と Sim2Real 転移学習を基盤としたデータ駆動型高分子材料研究、口頭	林 慶浩	統計数理研究所ものづくりデータ科学研究センター感謝祭 「SIM2REAL マテリアルズインフォマティクス」	2024 年 3 月
2	マテリアルズインフォマティクスによる未踏物質空間の開拓、口頭	吉田 亮	統計数理研究所ものづくりデータ科学研究センター感謝祭 「SIM2REAL マテリアルズインフォマティクス」	2024 年 3 月
3	データ駆動型材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える、口頭	吉田 亮	日本化学会第 104 春季年会 (2024)	2024 年 3 月
4	Heterogeneous metric learning に基づく結晶構造予測、口頭	草場 穫*, 劉 暢, 吉田 亮	日本化学会第 104 春季年会(2024)	2024 年 3 月
5	機械学習による準結晶の予測・理解・発見、口頭	吉田 亮	日本物理学会 2024 年春季大会	2024 年 3 月
6	自動分子シミュレーションによる高分子物性データプラットフォームの産学共創、口頭	林 慶浩	日本化学会第 104 春季年会 (2024)	2024 年 3 月
7	マテリアルズインフォマティクスの基礎：機械学習による材料の予測・理解・発見、口頭	吉田 亮	日本化学会第 104 春季年会 (2024)	2024 年 3 月
8	高分子材料における Sim2Real 転移学習、ポスター	林 慶浩	第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会	2024 年 3 月
9	実験計画法と高分子物性自動計算の融合：高屈折率・高アッペ数高分子の探索、ポスター	南條 舜	第 3 回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会	2024 年 3 月
10	ハイパーマテリアルズインフォマティクス学術創成：現状と展望、口頭	吉田 亮, 劉 暢, 草場 穫, 木村 薫, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 岩崎 祐昂, Alok Singh, 田村 隆治, 石川 明日香, 山田 庸公, 廣木 寛太, 北原 功一, 枝川 圭一, 亀岡 聡	第 11 回ハイパーマテリアル領域会議	2024 年 3 月

11	Material Infinity: 材料の無限の可能性を引き出す、口頭	吉田 亮	ATAC DAY 2024	2024 年 3 月
12	高分子物性自動計算によるデータ創出とデータ駆動型材料研究の実践、口頭	吉田 亮	文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」「燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けたマルチスケール計算技術構築とその活用」合同公開シンポジウム（成果報告会）	2024 年 2 月
13	産学連携による高分子計算物性データベースの共創とマテリアルズインフォマティクスの実践、口頭	吉田 亮	高分子学会 高分子表面研究会「マテリアルズインフォマティクスと計算化学を用いた表面・界面設計」	2024 年 1 月
14	Bayesian kernel regression for functional data、口頭	Minoru Kusaba	Physics informed Artificial Intelligence in Plasma Science	2024 年 1 月
15	機械学習による物質の予測・理解・発見、口頭	吉田 亮	Symposium on Computational Disease Systems Biology	2024 年 1 月
16	Beyond Data Limits: Innovations in Data-Driven Materials Science、口頭	Ryo Yoshida	The 27th SANKEN International Symposium	2024 年 1 月
17	機械学習による物質の予測・理解・発見、口頭	吉田 亮	CREST「未踏物質探索」/さきがけ「未来材料」合同合宿	2024 年 1 月
18	機械学習による半導体準結晶の探索、ポスター	草場 稷*, 劉 暢, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 木村 薫, 吉田 亮	CREST「未踏物質探索」/さきがけ「未来材料」合同合宿	2024 年 1 月
19	Transfer Learning with Affine Model Transformation、ポスター	Shunya Minami*, Kenji Fukumizu, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida	Thirty-seventh Conference on Neural Information Processing Systems	2023 年 12 月
20	Non-iterative crystal structure prediction、口頭	Ryo Yoshida, Chang Liu, Hiromasa Tamaki, Tomoyasu Yokoyama, Kensuke Wakasugi, Satoshi Yotsuhashi, Minoru Kusaba	The 3rd Materials Research Meeting (MRM 2023)	2023 年 11 月

21	機械学習による材料の予測・理解・発見:ソフトウェアと活用事例の紹介を中心に、口頭	吉田 亮	2023 年度 DxMT 事例セミナー (第 4 回)	2023 年 11 月
22	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、口頭	吉田 亮	統計数学×情報×物質セミナー	2023 年 11 月
23	マテリアルズインフォマティクスの方法とその実践、口頭	吉田 亮	情報機構セミナー	2023 年 11 月
24	自動分子シミュレーションによる高分子物性データプラットフォームの産学共創、口頭	林 慶浩	第 33 回日本 MRS 年次大会	2023 年 11 月
25	反復計算を必要としない結晶構造予測、口頭	Chang Liu	第 33 回日本 MRS 年次大会	2023 年 11 月
26	機械学習による材料の予測・理解・発見: 高分子材料・準結晶研究への応用事例、口頭	吉田 亮	2023 年度公益社団法人日本金属学会関東支部講習会 「機械学習と金属工学: 最新動向と材料開発への応用」	2023 年 11 月
27	Heterogeneous metric learning に基づく結晶構造予測、ポスター	草場 穂*, 劉 暢, 吉田 亮	第 26 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2023)	2023 年 10 月
28	分子動力学シミュレーション自動計算システムによる高分子物性データベースの構築: マテリアルズインフォマティクスのデータ基盤創出、ポスター	林 慶浩	第 10 回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会	2023 年 10 月
29	機械学習による物質の予測・理解・発見、口頭	吉田 亮	ipi - ダイキン シンポジウム	2023 年 10 月
30	マテリアルズインフォマティクスと材料開発の未来、口頭	吉田 亮	10th シンポジウム～データサイエンスの最前線	2023 年 10 月
31	高分子材料研究における実験・シミュレーション・機械学習の協奏、口頭	吉田 亮	NEDO プロジェクトを核とした人材育成、産学連携等の総合的展開/データ駆動型材料設計利用技術者養成に係る特別講座	2023 年 10 月
32	データ駆動型高分子材料研究の方法と実践: 産学連携によるオープンデータプラットフォームの共創、口頭	吉田 亮	高分子同友会 勉強会 「新材料の創製 (反応、合成、バイオ、触媒、解析、機能等) について勉強する会」	2023 年 10 月

33	Exploring semiconductor quasicrystals with machine learning、ポスター	Minoru Kusaba*, Chang Liu, Erina Fujita, Yukari Katsura, Kaoru Kimura, Ryo Yoshida	International Conference on Complex Orders in Condensed Matter (ICCOCM 2023)	2023 年 9 月
34	高分子物性データ基盤を共創する産学連携コンソーシアム、ポスター	高橋 愛子, 林 慶浩, 吉田 亮	第 72 回高分子討論会	2023 年 9 月
35	Machine learning for quasicrystals、口頭	Ryo Yoshida	International Conference on Complex Orders in Condensed Matter (ICCOCM 2023)	2023 年 9 月
36	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、口頭	吉田 亮	日本金属学会 秋季講演大会	2023 年 9 月
37	データ駆動型材料研究の諸問題：統計的機械学習による予測・発見・理解、口頭	吉田 亮	分子研研究会「イオン液体インフォマティクスの発展にむけて」	2023 年 9 月
38	データ駆動型高分子材料研究の諸問題：産学連携で限られたデータの壁を乗り越える、口頭	吉田 亮	日本化学会関東支部講演会「マテリアルズインフォマティクスの最先端～化学産業への展開～」	2023 年 9 月
39	逐次実験計画法と高分子物性自動計算の融合に基づく光学用高分子の探索、口頭	南條 舜*, アリフィン, 林 慶浩, 吉田 亮	2023 年度統計関連学会連合大会	2023 年 9 月
40	高分子材料における Sim2Real 転移学習、口頭	林 慶浩*, 南 俊匠, 南條 舜, 高橋 愛子, 吉田 亮	2023 年度統計関連学会連合大会	2023 年 9 月
41	カーネル平均埋め込みによる材料の表現、口頭	草場 穂*, 林 慶浩, 劉 暢, 脇内 新樹, 吉田 亮	2023 年度統計関連学会連合大会	2023 年 9 月
42	分子物性自動計算システム RadonPy の開発と産学連携によるデータプラットフォームの共創、口頭	林 慶浩	第 9 回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム — マテリアルデータサイエンスに向けた自動測定と自動解析の展開 —	2023 年 9 月
43	Exploring vast material landscapes using artificial intelligence、口頭	Ryo Yoshida	International Symposium on Living Systems Materialogy	2023 年 8 月
44	データ駆動型材料研究におけるデータ資源の不足をいかに乗り越えるか、口頭	吉田 亮	色材セミナー 「～色材開発におけるデジタル技術の活用～」	2023 年 6 月
45	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、口頭	吉田 亮	統計数理研究所 産学連携シンポジウム 『『統計的機械学習』の中核としての統計数理』	2023 年 5 月

46	産学連携コンソーシアムの形成による高分子物性データベースの構築、ポスター	高橋 愛子, 林 慶浩, 吉田 亮	第 72 回高分子学会年次大会	2023 年 5 月
47	自動分子シミュレーションによる高分子物性データプラットフォームの産学共創、口頭	林 慶浩, Wu Stephen, 野口 瑤, 高橋 愛子, 吉田 亮	第 72 回高分子学会年次大会	2023 年 5 月
48	Machine learning for overcoming data scarcity、口頭	Ryo Yoshida	The 4th International Conference on Data-Driven Plasma Science (ICDDPS-4)	2023 年 4 月