

令和 6 年 6 月 17 日現在

機関番号：62603

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05820

研究課題名（和文）ハイパーマテリアルのインフォマティクスとhidden orderの探索

研究課題名（英文）Hypermaterials informatics and the search for hidden orders

研究代表者

吉田 亮（Yoshida, Ryo）

統計数理研究所・先端データサイエンス研究系・教授

研究者番号：70401263

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 69,000,000円

研究成果の概要（和文）：準周期系物質群「ハイパーマテリアル」を対象とするマテリアルズインフォマティクスの学術基盤を構築した（準結晶・近似結晶の組成予測、XRDに基づく相同定、第一原理電子状態計算、結晶構造予測、記述子など）。準結晶・近似結晶の組成・物性・相図を網羅的に集積したオープンデータベースHYPODを開発した。これは準結晶分野における世界初の包括的データベースである。機械学習グループは、このデータベースを用いて熱力学的に安定な準結晶を形成する化学組成を予測するモデルを構築し、多数の新規準結晶を発見することに成功した。これらは、40年に渡る準結晶研究の歴史において、機械学習が発見した初めての物質である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本グループはハイパーマテリアルズインフォマティクスという準結晶研究の新機軸を創出した。データ駆動型研究のためのオープンデータを構築し、準結晶・近似結晶の組成予測や深層学習に基づく相同定など、機械学習の実践により多くの新物質を発見することに成功した。これらは、40年に渡る準結晶研究の歴史において、機械学習が発見した初めての物質である。また、表面解析、触媒研究、バンド計算、高次元電子構造計算のアルゴリズム開発、分子動力学計算によるハイパーマテリアルの異常高温比熱の起源解明など、計算科学的手法に基づく準結晶研究の学術基盤を構築した。

研究成果の概要（英文）：We have developed an infrastructure of materials informatics for "hypermaterials," a group of quasiperiodic materials, including composition prediction of quasicrystals and approximants, XRD-based phase identification, ab initio electronic structure calculations, crystal structure prediction, descriptors, and so on. First, we developed HYPOD, an open database that comprehensively accumulates compositions, properties, and phase diagrams of quasicrystals and approximants. This is the world's first comprehensive database in the field of quasicrystals. Using this database, the machine learning group built a model to predict the chemical compositions that form thermodynamically stable quasicrystals, and succeeded in discovering many new quasicrystals. These are the first materials discovered by machine learning in the 40-year history of quasicrystal research.

研究分野：マテリアルズインフォマティクス

キーワード：マテリアルズインフォマティクス 準結晶 データベース 機械学習 第一原理電子状態計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本計画研究班(計画研究 A03 班:以下「本グループ」という)は、ハイパーマテリアルズインフォマティクスという準結晶研究の新しい方法論を構築することを目的に設置された。物質の空間は非常に広大である。例えば、元素の種類を約 100 個とすれば、それらの組み合わせ数は三元系では 100 万、四元系では 1 億、五元系では 100 億種類以上になる。マテリアルズインフォマティクス(materials informatics: 以下「MI」という)では、データ科学や計算科学、ロボットによる実験の自動化などを駆使し、このような広大な未踏物質空間から所望の特性を有する新物質を発見する。MI という分野に注目が集まるきっかけは、2011 年に米国で始動したマテリアル・ゲノム・イニシアティブという国家事業であった。その後、欧州・アジア諸国において、MI を中核とするデータ駆動型材料開発事業が次々に立ち上がった。日本では、2015 年に始動した JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」がプラグシップとなり、物質科学、材料工学、計算科学、データ科学などの分野から多彩な研究者が集結し、MI の学術創成に取り組んだ。このような中、本領域は 2019 年 7 月に発足した。その当時、準結晶研究の MI は完全なブルーオーシャンであった。そこで、準周期物質群(ハイパーマテリアル)の MI 「ハイパーマテリアルズインフォマティクス」の学術基盤を構築すべく、領域内に本グループが設置された。

2. 研究の目的

本グループは、データ科学や電子状態計算を技術的駆動力とし、準結晶研究に知識循環をもたらすことを目的とした。その実現のための鍵の一つが、新物質発見を加速するための機械学習技術の導入であった。機械学習で化学組成から物質の安定相(準結晶・近似結晶・周期結晶)や物性を予測する。このモデルを用いて広大な探索空間からハイパーマテリアルの候補組成を絞り込み、物質探索のプロセスを加速する。さらに、学習モデルに埋め込まれた暗黙のルールを抽出することで、準結晶の形成メカニズムを明らかにする。また、準結晶研究の様々なデータ(組成、構造、物性、粉末 XRD スペクトルなど)を網羅的に収集し、ハイパーマテリアル分野におけるデータ駆動型研究の学術基盤を整備する。さらに、準結晶研究における機械学習の方法論(状態図予測、XRD に基づく相同定の自動化、結晶構造予測、記述子など)を総合的に整備し、オープンソフトウェアとしてコミュニティと共有する。また、第一原理計算に基づく表面解析、触媒研究、バンド計算、高次元電子構造計算のアルゴリズム開発など、計算科学的手法に基づく準結晶研究を推進する。

3. 研究の方法

代表者の吉田らは、機械学習を駆使して準結晶の発見を加速することを図った。しかしながら、本領域が発足した 2019 年当時、準結晶分野はデータ駆動型研究の未踏の地であったため、体系的な学習データが存在しなかった。そこで、分担者の桂らは、準結晶や近似結晶の組成、構造、相図、物性に関する情報を網羅的に集めたデータベースを構築した。このデータベースがハイパーマテリアルズインフォマティクスの学術創成に向けた出発点となった。後述するように、吉田と桂のグループは、このデータを用いて準結晶を形成する化学組成を予測するモデルを構築し、領域内の研究者と共同で新規準結晶の発見に成功した。分担者の野澤らは、表面物理の理論解析を駆使して、準結晶の表面や触媒の研究を推進した。例えば、Ag-In-Yb 準結晶 2 回表面におけるペンタセンの吸着構造を解析し、ペンタセンが準結晶特有の原子構造に優先的に吸着していることを明らかにした。また、領域内の共同研究では、Al-Fe 準結晶に微量添加した金属原子の吸着位置や触媒特性を解析した。分担者の竹森らは、高次元電子構造計算法の開発を推進した。さらに、3次元フォトニック準結晶における光学的ギャップの予言、準結晶の擬ギャップに関連する物性や半導体準結晶の探索、準結晶におけるフォノンの機構の解明など、多彩な研究を展開した。

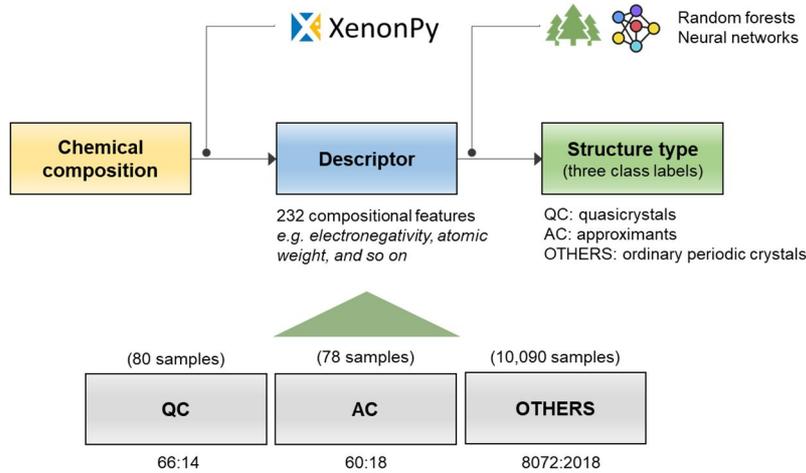


図 1. 機械学習(3クラス分類問題)のワークフロー. モデルの入力変数は化学組成, 出力は準結晶(QC), 近似結晶(AC), 周期結晶を含むその他("others")を表すクラスラベル.

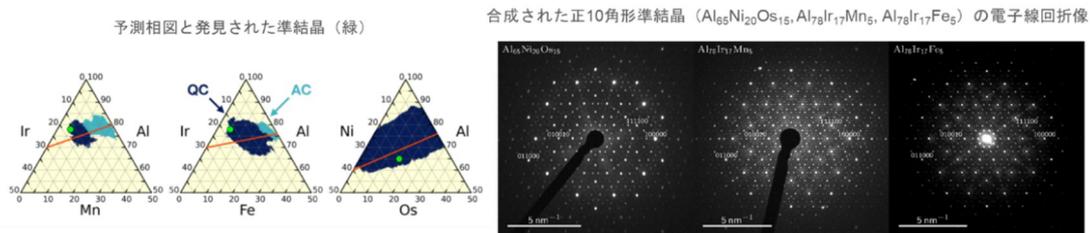


図 2 機械学習の予測相図 (紺の領域が準結晶相, 緑が合成された準結晶) と合成された準結晶の電子線回折像 ($Al_{65}Ni_{20}Os_{15}$, $Al_{78}Ir_{17}Mn_5$, $Al_{78}Ir_{17}Fe_5$).

4. 研究成果

本グループは, ハイパーマテリアルを対象とする MI の学術基盤を整備した. まず初めに, 準結晶・近似結晶の組成・物性・相図を網羅的に集積したオープンデータベース HYPOD を開発した (Fujita et al., submitted, <https://figshare.com/s/609fff971a91f9061756>). これは準結晶分野における世界初の包括的なデータベースであり, 今後のデータ駆動型研究の礎を担う極めて重要な学術資源となる.

吉田らは, このデータベースを用いて熱力学的に安定な準結晶を形成する化学組成を予測するモデルを構築した (Liu et al., Adv Mater (2021), 同誌扉絵に選定, 引用数 40, 国内外メディア報道多数). 1984 年にダン・シェヒトマン博士らが最初の準結晶を発見して以来, これまでにおよそ 100 個の熱的に安定な準結晶が合成されてきた. 新しい準結晶の発見は, 電子物性の異常, 絶縁体的な振る舞い, 価数揺らぎ, 量子臨界性, 超伝導, 強磁性などの新しい物理現象の発見をもたらしてきた. 一方, 物質空間には依然として広大な未踏領域が残されており, 研究者らはそこにはいまだ発見されていない半導体準結晶や反強磁性秩序を持つ準結晶が存在していると予想している. しかしながら, 準結晶の形成や安定化のメカニズムがあまり分かっておらず, 新物質探索の設計指針の欠如が準結晶研究の進展を著しく阻害している. そこで同グループは, 機械学習による準結晶発見の加速を図った. モデルの入力は化学組成, 出力はその物質が準結晶を形成するか否かを表すクラスラベルである (図 1). これまでに合成されてきた準結晶, 近似結晶, 通常の周期結晶の化学組成を学習データとして用い, 準結晶か否かが判定する分類器を構築した. その結果, ハイパーマテリアルが通常の周期系かどうかを判定する二値分類タスクにおいて, 予測精度が 95% 以上に達することが分かった (Liu et al., Adv Mater (2021)). そこで, このモデルを用いてアルミニウム 3 元系合金の全組成空間に相当する 1,080 種類の合金系を網羅的なスクリーニングした. その結果, 185 種類の合金系に準結晶相が存在すると予測された. この中から過去の研究で相図が報告されているものを除外し, 最終的に 30 種類の候補に絞り込んだ. そして, Al-Ni-Os, Al-Ir-Mn, Al-Ir-Fe の系を選定し, 合成実験を行った結果, 全ての系において新規の準結晶相 ($Al_{65}Ni_{20}Os_{15}$, $Al_{78}Ir_{17}Mn_5$, $Al_{78}Ir_{17}Fe_5$) が発見された (図 2: Liu et al., Phys Rev Mater (2023)). これら三つの準結晶はいずれも, 長時間のアニーリングプロセスの後に観察されたため, 熱力学的に安定な物質と考えられる. また, 透過型電子顕微鏡の電子線回折パターンから, 三つの物質はいずれも正 10 回対称の準結晶構造を持つことが明らかになった. 合成された三つの準結晶は, 40 年に渡る準結晶研究の歴史において, 機械学習により発見された初めての物質である.

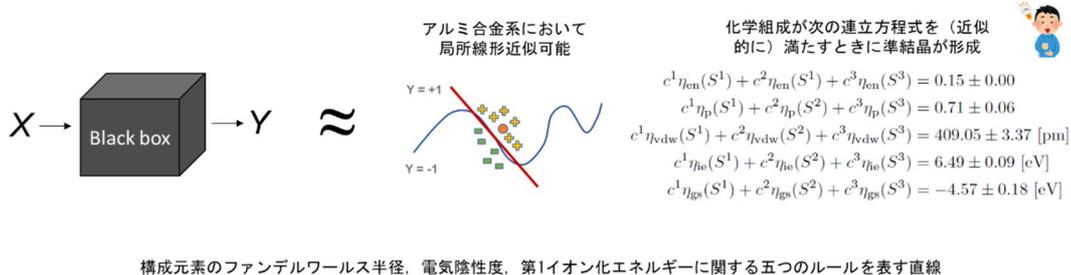


図 3. 機械学習による準結晶の形成ルールの発見. 下図は 3 種類の三元系に対する機械学習の予測相図(紺: 準結晶, 水色: 近似結晶). 直線は機械学習が同定した五つのルールを表す. これらの合流点に準結晶相が現れる.

さらに、機械学習のモデルは、ヒューム = ロザリーの電子濃度則を自律的に学習していたことが明らかにした。準結晶が安定化する組成の多くは、1 原子当りの平均遍歴電子数 e/a が特定の値をとることが知られている。例えば、機械学習が予測した準結晶相は、多くのアルミニウム合金で $e/a = 1.8$ の領域と重なっていることが分かった。つまり、機械学習のアルゴリズムは、これまでに発見された準結晶の化学組成から、既存の経験則を自律的に学習することに成功したわけである。さらに機械学習のブラックボックスモデルに内在する入出力のルールを抽出することで、準結晶と近似結晶の相形成に関する法則を明らかにした(図 3)。この法則は、原子のファンデルワールス半径や電気陰性度などに関する五つの単純な数式で表される。これらの条件は、準結晶研究において長年求められてきた新しい準結晶を探索するための設計指針となる。また、モデルには他にも多くのルールが隠されている可能性がある。機械学習のブラックボックスモデルに埋め込まれたルールセットを網羅的に調べることで、準結晶の形成メカニズムを解き明せる可能性が明らかになった。

また、深層学習を利用して粉末 X 線回折パターンに基づく相同定を自動化する手法を開発した(Uryu et al., Adv Sci (2024))。粉末 X 線回折は結晶性物質の同定や構造解析に欠かせない分析手法である。しかしながら、多相試料の回折パターンは非常に複雑であるため、新規物質相の有無を判定するには熟練研究者の高度な知識と経験を必要とする。この研究では、人工的に作製した多相混合物の回折パターンで深層ニューラルネットワークを学習することで、実際の回折パターンから 92% 以上の精度で準結晶の存在を判定することができた。さらに、この分類器を用いて、実際の粉末 X 線構造解析から得られた 440 個の回折パターンをスクリーニングし、Al-Si-Ru 合金において新たな正 20 面体準結晶相 ($Al_{43}Si_{132}Ru_{25}$ や $Al_{44}Si_{131}Ru_{25}$) を発見した。Al-Si-Ru 合金系での準結晶の発見の報告は本研究が初めてとなる。

さらに、第一原理計算に基づく表面物理の解析を駆使し、準結晶の表面解析や触媒研究を推進した。例えば、Ag-In-Yb 準結晶 2 回表面におけるペンタセンの吸着構造を解析し、ペンタセンが準結晶特有の原子構造に優先的に吸着していることを明らかにした(Sato et al., J Phys Conf (2023))。また、領域内研究者との共同研究では、Al-Fe 準結晶に微量添加した金属原子の吸着位置や触媒特性を明らかにした。また、高次元電子構造計算のアルゴリズム開発を推進した。従来法では不可能であった準結晶の状態密度計算を行うために、周期系で知られるブロッホの定理を n 次元 ($n > d$) 周期結晶の d 次元切断断面構造に拡張し、Kohn-Sham 方程式の数値解析手法を開発した。これを用いて、2 次元フォトニック準結晶における光学的ギャップの解析を展開した。また、縮約密度行列の量子状態推定に関する量子アルゴリズムの開発として、準結晶の実空間基底での電子状態を取り扱うための高次縮約密度行列の推定アルゴリズムを開発した。また、準結晶における超伝導と周期結晶における超伝導を区別する指標(Takemori et al., Phys Rev B (2020)) や、超伝導電流に現れる異常を発見した(Fukushima et al., Phys Rev Res (2023))。

このように、本グループはハイパーマテリアルズインフォマティクスという準結晶研究の新機軸を創出した。データ駆動型研究のためのオープンデータを構築し、機械学習の実践をデモンストレーションし、電子状態計算などの解析技術を駆使しながら、準結晶研究の新たなプラットフォームと領域内の知識循環をもたらした。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計45件（うち査読付論文 43件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 26件）

1. 著者名 Uryu Hirotaka, Yamada Tsunetomo, Kitahara Koichi, Singh Alok, Iwasaki Yutaka, Kimura Kaoru, Hiroki Kanta, Miyao Naoya, Ishikawa Asuka, Tamura Ryuji, Ohhashi Satoshi, Liu Chang, Yoshida Ryo	4. 巻 11
2. 論文標題 Deep Learning Enables Rapid Identification of a New Quasicrystal from Multiphase Powder Diffraction Patterns	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Science	6. 最初と最後の頁 2304546
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/advs.202304546	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kusaba Minoru, Hayashi Yoshihiro, Liu Chang, Wakiuchi Araki, Yoshida Ryo	4. 巻 108
2. 論文標題 Representation of materials by kernel mean embedding	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.134107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Liu Chang, Kitahara Koichi, Ishikawa Asuka, Hiroto Takanobu, Singh Alok, Fujita Erina, Katsura Yukari, Inada Yuki, Tamura Ryuji, Kimura Kaoru, Yoshida Ryo	4. 巻 7
2. 論文標題 Quasicrystals predicted and discovered by machine learning	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 93805
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.7.093805	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ohno Mitsuru, Hayashi Yoshihiro, Zhang Qi, Kaneko Yu, Yoshida Ryo	4. 巻 63
2. 論文標題 SMiPoly: Generation of a Synthesizable Polymer Virtual Library Using Rule-Based Polymerization Reactions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 5539 ~ 5548
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.3c00329	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Aoki Yuta, Wu Stephen, Tsurimoto Teruki, Hayashi Yoshihiro, Minami Shunya, Tadamichi Okubo, Shiratori Kazuya, Yoshida Ryo	4. 巻 56
2. 論文標題 Multitask Machine Learning to Predict Polymer-Solvent Miscibility Using Flory-Huggins Interaction Parameters	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 5446 ~ 5456
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.2c02600	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shunya Minami, Kenji Fukumizu, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida	4. 巻 36
2. 論文標題 Transfer learning with affine model transformation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advances in Neural Information Processing Systems	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Qi, Liu Chang, Wu Stephen, Hayashi Yoshihiro, Yoshida Ryo	4. 巻 3
2. 論文標題 A Bayesian method for concurrently designing molecules and synthetic reaction networks	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 2204994
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2204994	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Fukushima Takumi, Takemori Nayuta, Sakai Shiro, Ichioka Masanori, Jagannathan Anuradha	4. 巻 5
2. 論文標題 Supercurrent distribution in real-space and anomalous paramagnetic response in a superconducting quasicrystal	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 043164-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.5.043164	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Takemori Nayuta	4. 巻 -
2. 論文標題 Superconducting Quasicrystals	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Israel Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ijch.202300124	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iwasaki Suguru, Hoshino Mihiro, Morito Haruhiko, Kumagai Masaya, Katsura Yukari, Nishii Junji, Fujioka Masaya	4. 巻 144
2. 論文標題 Effect of intergranular connectivity of NaAlB ₄ on Na ⁺ extraction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Solid State Sciences	6. 最初と最後の頁 107308 ~ 107308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.solidstatesciences.2023.107308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kusaba Minoru, Liu Chang, Yoshida Ryo	4. 巻 211
2. 論文標題 Crystal structure prediction with machine learning-based element substitution	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111496 ~ 111496
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2022.111496	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Torres Pol, Wu Stephen, Ju Shenghong, Liu Chang, Tadano Terumasa, Yoshida Ryo, Shiomi Junichiro	4. 巻 34
2. 論文標題 Descriptors of intrinsic hydrodynamic thermal transport: screening a phonon database in a machine learning approach	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 135702 ~ 135702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac49c9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Iwayama Megumi, Wu Stephen, Liu Chang, Yoshida Ryo	4. 巻 62
2. 論文標題 Functional Output Regression for Machine Learning in Materials Science	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 4837 ~ 4851
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.2c00626	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hayashi Yoshihiro, Shiomi Junichiro, Morikawa Junko, Yoshida Ryo	4. 巻 8
2. 論文標題 RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 222
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-022-00906-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ma Ruimin, Zhang Hanfeng, Xu Jiabin, Sun Luning, Hayashi Yoshihiro, Yoshida Ryo, Shiomi Junichiro, Wang Jian-xun, Luo Tengfei	4. 巻 28
2. 論文標題 Machine learning-assisted exploration of thermally conductive polymers based on high-throughput molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Today Physics	6. 最初と最後の頁 100850 ~ 100850
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mtphys.2022.100850	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Sakai Shiro, Takemori Nayuta	4. 巻 105
2. 論文標題 Doped Mott insulator on a Penrose tiling	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.205138	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Masaya, Ando Yuki, Tanaka Atsumi, Tsuda Koji, Katsura Yukari, Kurosaki Ken	4. 巻 2
2. 論文標題 Effects of data bias on machine-learning-based material discovery using experimental property data	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 302 ~ 309
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2109447	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sato M., Hiroto T., Matsushita Y., Nozawa K.	4. 巻 2461
2. 論文標題 First-principles study of the initial stage of Pentacene adsorption on the twofold surface of the Ag-In-Yb quasicrystal	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012016 ~ 012016
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2461/1/012016	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Fukushima Takumi, Takemori Nayuta, Sakai Shiro, Ichioka Masanori, Jagannathan Anuradha	4. 巻 2461
2. 論文標題 Supercurrent Distribution on Ammann-Beenker Structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012014 ~ 012014
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2461/1/012014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Takemori Nayuta, Sakai Shiro	4. 巻 3
2. 論文標題 Correlated electronic states in quasicrystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Comprehensive Inorganic Chemistry III, Third Edition	6. 最初と最後の頁 461 ~ 492
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/B978-0-12-823144-9.00124-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hinuma Yoyo, Katsura Yukari	4. 巻 2
2. 論文標題 Categorization of inorganic crystal structures by Delaunay tetrahedralization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 75 ~ 83
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2022.2059336	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yoshinaga Natsuhiko, Tokuda Satoru	4. 巻 106
2. 論文標題 Bayesian modeling of pattern formation from one snapshot of pattern	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 65301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.106.065301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Liu, C., Fujita, E., Katsura, Y., Inada, Y., Ishikawa, A., Tamura, R., Kimura, K., Yoshida, R.	4. 巻 33
2. 論文標題 Machine learning to predict quasicrystals from chemical compositions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 2102507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.202102507	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Torres P., Wu S., Ju S., Liu C., Tadano T., Yoshida R., Shiomi J.	4. 巻 34
2. 論文標題 Descriptors of intrinsic hydrodynamic thermal transport: screening a phonon database in a machine learning approach	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 135702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ac49c9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ju, S., Yoshida, R., Liu, C., Wu, S., Hongo, K., Tadano, T., Shiomi, J.	4. 巻 5
2. 論文標題 Exploring diamondlike lattice thermal conductivity crystals via feature-based transfer learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 53801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.053801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Minami, S., Liu, S., Wu, S., Fukumizu, K., Yoshida, R.	4. 巻 35
2. 論文標題 A general class of transfer learning regression without implementation cost	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 8992-8999
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hiroshi Shinaoka, Junya Otsuki, Mitsuaki Kawamura, Nayuta Takemori, Kazuyoshi Yoshimi	4. 巻 10
2. 論文標題 DCore: Integrated DMFT software for correlated electrons	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SciPost Physics	6. 最初と最後の頁 117-1-31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhys.10.5.117	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 F. Garmroudi, M. Parzer, A. Riss, N. Reumann, B. Hinterleitner, K. Tobita, Y. Katsura, K. Kimura, T. Mori, E. Bauer	4. 巻 212
2. 論文標題 Solubility limit and annealing effects on the microstructure & thermoelectric properties of Fe ₂ V _{1-x} TaxAl _{1-y} Siy Heusler compounds	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 116867
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2021.116867	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Naoki Sato, Norihide Kuroda, Shun Nakamura, Yukari Katsura, Ikuzo Kanazawa, Kaoru Kimura, Takao Mori	4. 巻 9
2. 論文標題 Bonding heterogeneity in mixed-anion compounds realizes ultralow lattice thermal conductivity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 22660-22669
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1ta04958e	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuki Inada, Yukari Katsura, Masaya Kumagai, Kaoru Kimura	4. 巻 1
2. 論文標題 Atomic descriptors generated from coordination polyhedra in crystal structures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 200-212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1986359	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 竹森那由多・古賀昌久	4. 巻 56
2. 論文標題 ハイパーマテリアルの磁性と超伝導	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 79-88
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 吉田 亮・Chang Liu	4. 巻 56
2. 論文標題 機械学習によるハイパーマテリアルの組成予測とその可能性	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 127-134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 吉田 亮	4. 巻 69
2. 論文標題 マテリアルズインフォマティクス概説	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 統計数理：特集「マテリアルズインフォマティクスの最前線」	6. 最初と最後の頁 5-33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 吉田 亮, ウ ステファン, 森川 淳子	4. 巻 69
2. 論文標題 機械学習による機能性分子の自動設計: 高熱伝導高分子材料の探索	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 統計数理：特集「マテリアルズインフォマティクスの最前線」	6. 最初と最後の頁 35-47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 吉田 亮, 岩山 めぐみ, グォ チョンリャン	4. 巻 90
2. 論文標題 材料研究の逆問題と機械学習	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 応用物理	6. 最初と最後の頁 428-432
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11470/oubutsu.90.7_428	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nayuta Takemori, Ryotaro Arita, and Shiro Sakai	4. 巻 102
2. 論文標題 Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 PHYSICAL REVIEW B	6. 最初と最後の頁 115108-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.115108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahiro Takahashi, Koichi Kitahara, Yukari Katsura, Junpei Okada, Yu-ichiro Matsushita and Kaoru Kimura	4. 巻 108
2. 論文標題 Search for the boron quasicrystal by first-principle-calculation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Solid State Sciences	6. 最初と最後の頁 235419-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.solidstatesciences.2020.106377	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Minoru Kusaba, Chang Liu, Yukinori Koyama, Kiyoyuki Terakura, Ryo Yoshida	4. 巻 11
2. 論文標題 Recreation of the periodic table with an unsupervised machine learning algorithm	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 4780
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-81850-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhongliang Guo, Stephen Wu, Mitsuru Ohno, Ryo Yoshida	4. 巻 60
2. 論文標題 Bayesian Algorithm for Retrosynthesis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 4474-4486
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.0c00320	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 F. Garmroudi, A. Riss, M. Parzer, N. Reumann, H. Muller, E. Bauer, S. Khmelevskiy, R. Podloucky, T. Mori, K. Tobita, Y. Katsura, and K. Kimura	4. 巻 103
2. 論文標題 Boosting the thermoelectric performance of Fe ₂ VAl-type Heusler compounds by band engineering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 085202-1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.085202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masanori Sato, Takanobu Hiroto, Yoshitaka Matsushita, Kazuki Nozawa	4. 巻 62
2. 論文標題 Accuracy of Cluster Model Calculations for Quasicrystal Surface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 350-355
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-MB2020015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 吉田亮	4. 巻 276
2. 論文標題 マテリアルズインフォマティクスによる新物質探索：高分子材料の設計を中心に.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 医学の歩み	6. 最初と最後の頁 861-865
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamada H, Liu C, Wu S, Koyama Y, Ju S, Shiomi J, Morikawa J, Yoshida R	4. 巻 5
2. 論文標題 Predicting materials properties with little data using shotgun transfer learning	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 1717-1730
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.9b00804	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Wu S, Lambard G, Liu C, Yamada H, Yoshida R	4. 巻 39
2. 論文標題 iQSPR in XenonPy: a Bayesian inverse molecular design algorithm	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecular Informatics	6. 最初と最後の頁 1900107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/minf.201900107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 H. Yamamura, Y. Ohishi, Y. Katsura, K. Kimura, N. Uchida, and T. Kanayama	4. 巻 9
2. 論文標題 Stability and bonding nature for icosahedral or planar cluster of hydrogenated boron or aluminum	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 115117-1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111512	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計156件 (うち招待講演 133件 / うち国際学会 31件)

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会 (2024) (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 Heterogeneous metric learning に基づく結晶構造予測
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会 (2024) (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習による準結晶の予測・理解・発見
3. 学会等名 日本物理学会 2024年春季大会 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会（2024）（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 Material Infinity: 材料の無限の可能性を引き出す
3. 学会等名 ATAC DAY 2024（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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 合同公開シンポジウム（成果報告会）（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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」（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習による物質の予測・理解・発見
3. 学会等名 Symposium on Computational Disease Systems Biology (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Beyond Data Limits: Innovations in Data-Driven Materials Science
3. 学会等名 The 27th SANKEN International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習による物質の予測・理解・発見
3. 学会等名 CREST「未踏物質探索」/さきがけ「未来材料」合同合宿 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Shunya Minami, Kenji Fukumizu, Yoshihiro Hayashi, Ryo Yoshida
2. 発表標題 Transfer Learning with Affine Model Transformation
3. 学会等名 Thirty-seventh Conference on Neural Information Processing Systems (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Yoshida, Chang Liu, Hiromasa Tamaki, Tomoyasu Yokoyama, Kensuke Wakasugi, Satoshi Yotsuhashi, Minoru Kusaba
2. 発表標題 Non-iterative crystal structure prediction
3. 学会等名 The 3rd Materials Research Meeting (MRM 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの方法とその実践
3. 学会等名 情報機構セミナー (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 2023年度 DxMT事例セミナー (第4回) (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 統計数学×情報×物質セミナー (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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」（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 機械学習による物質の予測・理解・発見
3. 学会等名 ipi-ダイキン シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスと材料開発の未来
3. 学会等名 データサイエンス協会10thシンポジウム データサイエンスの最前線（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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」（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine learning for quasicrystals
3. 学会等名 International Conference on Complex Orders in Condensed Matter (ICCOCM 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本金属学会 秋季講演大会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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」（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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～」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 南條 舜, アリフィン, 林 慶浩, 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 2023年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 林 慶浩, 南 俊匠, 南條 舜, 高橋 愛子, 吉田 亮
2. 発表標題 高分子材料におけるSim2Real転移学習
3. 学会等名 2023年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 草場 穂, 林 慶浩, 劉 暢, 脇内 新樹, 吉田 亮
2. 発表標題 カーネル平均埋め込みによる材料の表現
3. 学会等名 2023年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Exploring vast material landscapes using artificial intelligence
3. 学会等名 International Symposium on Living Systems Materialogy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 色材セミナー「～色材開発におけるデジタル技術の活用～」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 林 慶浩, Wu Stephen, 野口 瑤, 高橋 愛子, 吉田 亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第72回高分子学会年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine learning for overcoming data scarcity
3. 学会等名 The 4th International Conference on Data-Driven Plasma Science (ICDDPS-4) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Nayuta Takemori
2. 発表標題 Correlated electronic states in quasicrystals
3. 学会等名 ICQ15 - The 15th International Conference on Quasicrystals (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 特異電子構造を持つ系における強相関多体効果の理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 準周期系における非 BCS 型弱結合超伝導と超伝導電流
3. 学会等名 研究会「強相関電子系のフロンティア」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 準結晶超伝導の理論的研究
3. 学会等名 2023年 冬学期 第3回 物性セミナー（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 大規模実験データの機械学習と新規イオン制御技術による熱電材料探索
3. 学会等名 公益社団法人日本セラミックス協会 第36回秋季シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 ハイパーマテリアルにおける相関効果
3. 学会等名 第2回研究会「準周期電子状態とマルチフラクタリティ・ハイパーユニフォーミティ」（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 準結晶の世界へようこそ：基本から始める構造理解
3. 学会等名 準結晶根掘り葉掘りの会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 高分子物性自動計算と統計的機械学習の協働：材料空間の大地図を作成する
3. 学会等名 産総研 データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 設立記念講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型材料研究における統計的機械学習とシミュレーションの融合
3. 学会等名 2022年度 人工知能学会全国大会（第36回）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 ウ ステファン, 前田 颯, 丸井 莉花, 吉田 絵里菜, 難波江 裕太, 早川 晃鏡, 野口 瑠, 林 慶浩, 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型の液晶ポリイミド設計 (Data-driven design of new liquid-crystal polyimide)
3. 学会等名 第71回高分子討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 林 慶浩, ウ ステファン, 野口 瑠, 高橋 愛子, 吉田 亮
2. 発表標題 MD自動計算による高分子物性データプラットフォームの産学連携による共創
3. 学会等名 第71回高分子討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 南 俊匠, 吉田 亮
2. 発表標題 アフィンカップリング型モデル変換による転移学習
3. 学会等名 2022年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 ウ ステファン, 前田 颯, 丸井 莉花, 吉田 絵里菜, 難波江 裕太, 早川 晃鏡, 野口 瑠, 林 慶浩, 吉田 亮, 森川 淳子
2. 発表標題 専門知識と機械学習の融合に基づく液晶性ポリイミドの設計
3. 学会等名 2022年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 統計的機械学習による予測と発見、理解：準結晶研究への適用事例を中心に
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岩山 めぐみ, ウ ステファン, 劉 暢, 吉田 亮
2. 発表標題 材料科学における多次元出力変数の教師あり学習
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 青木 祐太, 釣本 輝希, ウ ステファン, 林 慶浩, 南 俊匠, 白鳥 和矢, 吉田 亮
2. 発表標題 マルチタスク機械学習による高分子溶液相溶性とFlory-Huggins パラメータの予測
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ科学による新物質の予測と発見
3. 学会等名 第7回オンラインサロン「スパコンコロキウム」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型材料研究における統計的諸問題: 現状と展望
3. 学会等名 第15回 品質工学技術戦略研究発表大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 草場 穂, 劉 暢, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 木村 薫, 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習による半導体準結晶の探索
3. 学会等名 第27回準結晶研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型高分子材料研究の最前線限られたデータの壁を乗り越える
3. 学会等名 第2回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会「富岳百景」（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型材料科学における統計的機械学習とシミュレーションの融合：限られたデータの壁を乗り越える
3. 学会等名 2023年電子情報通信学会総合大会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型物質・材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ駆動型高分子材料研究ロードマップ：限られたデータの壁を乗り越えるために
3. 学会等名 シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Hayashi, Y. Noguchi, A. Takahashi, W. Stephen, R. Yoshida
2. 発表標題 Development of an Automated Polymer Property Calculation System “RadonPy” and Data Platform Co-creation through Industry-Academia Collaboration
3. 学会等名 The 17th Pacific Polymer Conference (PPC17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 W. Stephen, H. Maeda, R. Marui, E. Yoshida, Y. Nabaе, T. Hayakawa, Y. Noguchi, Y. Hayashi, R. Yoshida
2. 発表標題 Design of liquid-crystalline polyimides by integrating expert knowledge to a data-driven machine learning framework
3. 学会等名 The 17th Pacific Polymer Conference (PPC17) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Yoshida
2. 発表標題 Using machine learning to discover quasicrystals
3. 学会等名 Aperiodic 2022 (10th International Conference on Aperiodic Crystals) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Yoshida
2. 発表標題 Statistical Machine Learning for Materials Modeling and Simulation
3. 学会等名 2022 SIAM International Conference on Data Mining (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 竹森 那由多
2. 発表標題 ハイパーマテリアルにおける弱結合超伝導
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Kimura, Y. Katsura, K. Kitahara, T. Hiroto, J. T. Okada, Y. Iwasaki, and Y. Takagiwa
2. 発表標題 Search for Semiconducting Quasicrystal
3. 学会等名 21st International Symposium on Boron, Borides and Related Materials (ISBB 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 熊谷将也, 安藤有希, 田中敦美, 津田宏治, 桂ゆかり, 黒崎 健
2. 発表標題 実験MIと新材料探索
3. 学会等名 応用物理学会 第83回秋季講演会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂ゆかり, 高田悠, 稲田祐樹, 熊谷将也, 森戸春彦, 藤岡正弥, 秋山正和
2. 発表標題 Materials Informatics の活用による新規材料の実験的探索プロジェクト
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第35回秋季シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yukari Katsura
2. 発表標題 Starrydata: an open literature-based experimental material property database
3. 学会等名 The 13th Asian Thermophysical Properties Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 論文からの大規模実験データの収集と理論物性科学への活用
3. 学会等名 第76回物性理論セミナー (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 竹森 那由多
2. 発表標題 準結晶超伝導の理論的研究
3. 学会等名 第28回渦糸物理ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 Materials Informaticsと新規合成手法の開発による新物質探索研究
3. 学会等名 東京大学大学院新領域創成科学研究科 公開シンポジウムシリーズ 第5回「エネルギービームでつくる、みるー新しい物質創成ー」 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 Starrydata: 実験値Materials Informaticsのためのオープン データベース
3. 学会等名 実践データ駆動科学オンラインセミナー 第15回 データを集める データを使う 材料科学の現場から (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 Starrydata: データ収集から始まる Materials Informatics
3. 学会等名 令和4年度 先端研究拠点形成 (JAISTサイエンスハブ構築) 支援事業 「デジタルトランスフォーメーション (DX) の現状とサステナブルイノベーションへの展開」 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 AI との共存と論文データインフォーマティクスの可能性
3. 学会等名 日本結晶成長学会 新技術・新材料分科会 第2回研究会 『新技術・新材料開発に向けたデータ駆動技術の応用』 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 Materials Informaticsによる熱電変換材料の世界の俯瞰
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会 イノベーション共創プログラム (CIP); 低炭素社会実現のための熱エネルギー有効活用技術 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 材料研究における逆問題と統計的機械学習
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 草場 穂, Chang Liu, 吉田 亮
2. 発表標題 Data-driven crystal structure prediction using structure similarity
3. 学会等名 日本化学会 第102春季年会 (2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 瓜生 寛堂, 山田 庸公, 宮尾 直哉, 石川 明日香, 田村 隆治, 岩崎 祐昂, 北原 功一, 木村 薫, 劉 暢, 吉田 亮
2. 発表標題 粉末X線回折図形から準結晶相同定を行うための機械学習モデル
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 高分子物性自動計算ソフトウェアRadonPyの開発とデータ駆動型材料研究に資するデータベースの創出
3. 学会等名 「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岩山 めぐみ, Stephen Wu, 吉田 亮
2. 発表標題 少数データに基づく多次元出力変数の教師あり学習
3. 学会等名 第2回プラズマインフォマティクス研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 統計的機械学習の応用と実際
3. 学会等名 名古屋大学生物統計セミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMC Researchウェビナー（2022年2月）（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 統計的機械学習による予測・発見・理解
3. 学会等名 国立精神・神経医療研究センター 第2回脳病態数理・データ科学セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 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
3. 学会等名 「富岳」成果創出加速プログラム 物質・材料系課題 合同研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 統計的機械学習による新材料創製：産学連携の現状と可能性
3. 学会等名 第4回ROIS 産学連携・知的財産セミナー データサイエンスにおける産学連携シーズ～ ROIS・統数研 産連知財セミナー ～（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 林 慶浩, ウ ステファン, 野口 瑠, 塩見 淳一郎, 森川 淳子, 吉田 亮
2. 発表標題 分子動力学計算による高分子熱物性データベースの構築とデータ科学的手法による物性支配因子の解析
3. 学会等名 第42回日本熱物性シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMC Researchウェビナー（2021年9月）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 ウ ステファン, 野口 瑤, 林 慶浩, 難波江 裕太, 早川 晃鏡, 森川 淳子, 吉田 亮
2. 発表標題 高分子のバーチャルスクリーニング
3. 学会等名 2021年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ駆動型材料研究の諸問題：現状と展望
3. 学会等名 統計数理研究所オープンハウス連携イベント データサイエンスが描き出す「モノづくり」の未来シナリオ ～産学連携シンポジウム～（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの基礎と応用
3. 学会等名 情報機構セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ駆動型物質探索を加速する統計的機械学習の先進技術
3. 学会等名 異分野融合iSeminar（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMC Research ウェビナー (2021年4月) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Scientific Understanding from Machine Learning in Materials Science
3. 学会等名 PiAI Seminar Series: Physics informed AI in Plasma Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine Learning Phase Prediction of Quasicrystals
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine Learning for Inverse Materials Design
3. 学会等名 The 11th International Conference on Flexible and Printed Electronics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Introduction to Hypermaterials Informatics
3. 学会等名 1st International School on Hypermaterials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 先人の実験データをデータベースに : Starrydataプロジェクト
3. 学会等名 講演会「近未来への招待状～ナイスステップな研究者2020からのメッセージ～」第1回 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 竹森 那由多
2. 発表標題 超伝導ハイパーマテリアルの理論的研究
3. 学会等名 ISSP WOMEN'S WEEK 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 論文からの実験 データの蓄積と共有がもたらす革新と課題
3. 学会等名 2021年第82回応用物理学会秋季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桂 ゆかり
2. 発表標題 Materials Informatics の活用による新規ナノフレームワーク化合物の探索
3. 学会等名 日本金属学会 2021年秋季 第169回講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Nayuta Takemori
2. 発表標題 Theoretical investigation on Superconducting Hypermaterials
3. 学会等名 The 1st Meeting of the International Research Network (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yukari Katsura, Erina Fujita, Koichi Kitahara, Kaoru Kimura
2. 発表標題 Data curation projects for quasicrystal-related alloys"
3. 学会等名 Open space between aperiodic order and physics & chemistry of materials (IRN-Aperiodic) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Nayuta Takemori
2. 発表標題 Theoretical study of superconductivity in quasicrystals
3. 学会等名 Asia-Pacific Conference on Condensed Matter Physics 2021 (AC2MP2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Nayuta Takemori
2. 発表標題 Correlation Effects in Superconducting Hypermaterials
3. 学会等名 Symposium B-1 Hypermaterials in Materials Research Meeting 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 竹森 那由多
2. 発表標題 超伝導ハイパーマテリアルの理論研究
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会 「非自明な電子状態が生み出す超伝導現象の最前線:新たな挑戦と展望」 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Katsura
2. 発表標題 Starrydata: an open database of experimental data from published plot images
3. 学会等名 Flagship Workshop Digital Event - Open Databases Integration for Materials Design International Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 高分子MIのオーバービュー
3. 学会等名 高分子学会Webinar (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス：黎明期からの脱却に向けて
3. 学会等名 日本化学会 講演会「インフォマティクス技術の導入から産業応用まで～高分子・機能性材料・バイオ・半導体」（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス：機械学習による設計と合成の自動化
3. 学会等名 CBI学会2020年大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 材料研究を変革する統計的機械学習の先進技術
3. 学会等名 SciPy Japan 2020（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 統計的機械学習による材料の表現と生成：新分野の開拓と障壁
3. 学会等名 日本学術振興会・第133委員会 第246回研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 竹森那由多
2. 発表標題 超伝導ハイパーマテリアルにおける相関効果
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会(2021年)(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概説
3. 学会等名 日本化学会 第101春季年会(2021)(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 機械学習による予測と発見: 準結晶と高分子研究への適用事例
3. 学会等名 物質・材料研究機構 MaDIS研究交流会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ駆動型材料研究の現在と未来
3. 学会等名 日本化学会第38回コロイド界面技術シンポジウム「みんなを元気にするすごい技術 アフターコロナの研究開発 ~ 動向/指針/変化する研究」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Stephen Wu, Chang Liu, Qi Zhang, 吉田亮
2. 発表標題 XenonPyハンズオンセミナー（コントリビュータ向けチュートリアル）
3. 学会等名 第6回XenonPyハンズオンセミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ科学の視点からみた計算科学との価値共創の在り方
3. 学会等名 JST-CRDSS俯瞰セミナーシリーズ「数学と自然科学、工学の連携」（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用：機械学習による物質・材料の表現と生成
3. 学会等名 兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会（第5回）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMCリサーチセミナー（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ駆動型物質・材料研究を駆動する統計的機械学習の先進技術：準結晶への応用など
3. 学会等名 日本学術振興会・第133委員会 第246回研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 機械学習による準結晶の組成予測
3. 学会等名 第14回物性科学領域横断研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの概論と記述子、実験計画法の設計
3. 学会等名 技術情報協会セミナー（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 統計的機械学習による材料の表現と生成：新分野の開拓と障壁
3. 学会等名 機能性色素部会・エレクトロニクス部会合同 公開講演会「マテリアルインフォマティクスの最近の動向」（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 スモールデータの壁を乗り越えるための MI 技術
3. 学会等名 第13回日本化学連合シンポジウム「AI、IoT 活用による実験のスマート化」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 物質・材料研究におけるデータ科学の活用：基礎と応用
3. 学会等名 Science & Technologyセミナー(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMCリサーチセミナー(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 データ科学による新物質の探索：現状と展望
3. 学会等名 2020年度統計関連学会連合大会(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Guo Zhongliang, 吉田亮
2. 発表標題 ベイズ推論に基づく有機化合物の合成経路設計
3. 学会等名 2020年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 高分子材料研究を駆動する統計的機械学習の先進技術
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Guo Zhongliang, 吉田亮
2. 発表標題 ベイズ推論に基づく逆合成経路探索
3. 学会等名 第9回生命医薬情報学連合大会(IIBMP2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの諸問題:スモールデータの壁を乗り越える
3. 学会等名 日本学術振興会 145委員会 第168回研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Advances in Polymer Informatics: Challenges and Potentials
3. 学会等名 NSF-JST joint workshop on Thermal Transport, Materials Informatics and Quantum Computing (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine Learning for Materials Discovery
3. 学会等名 Bristol-ISM Data Science Seminar Series (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Nayuta Takemori, Shiro Sakai, Ryotaro Arita
2. 発表標題 Physical properties of weak-coupling quasiperiodic superconductors
3. 学会等名 Interdisciplinary Symposium for Quasicrystals and Strongly Correlated Electron Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Nozawa
2. 発表標題 First-principles study of growth of single element quasi-periodic ultra-thin films
3. 学会等名 EMN Amsterdam Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習の先進技術がもたらす材料研究の革新：外挿的予測と発見
3. 学会等名 第35回関東CAE懇話会 AI・IoT時代のデータ利活用による理解と発見（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 スモールデータの壁を乗り越える：転移学習の可能性と材料データに関する諸問題
3. 学会等名 第14回 MI2I コンソーシアムイベント（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ科学の先進技術がもたらすサイエンスの今後の在り方
3. 学会等名 愛知県がんセンター研究所招聘セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Machine Learning for Manufacturing
3. 学会等名 The Asian Conference on Machine Learning 2019 (ACML2019)（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの最前線：物質の表現・学習・生成
3. 学会等名 情報機構セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習の先進技術がもたらす材料研究の革新
3. 学会等名 日本接着学会 2019年度 第3回研究講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 MIにおける機械学習の先進応用：現状と展望
3. 学会等名 第10回高性能素材Week東京展（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習による物質の表現・学習・生成
3. 学会等名 有機エレクトロニクス材料研究会 第237回研究会「有機材料のインフォマティクス」（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Breaking the curse of small data in materials informatics
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (MRM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 <スモールデータの壁を乗り越える> マテリアルズインフォマティクス概説
3. 学会等名 技術情報協会セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス：転移学習による少数データの克服
3. 学会等名 2019年合同素過程研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 統計的機械学習と物質・材料研究：近年の動向と今後の課題
3. 学会等名 統計数理研究所・共同利用研究・研究集会「統計的機械学習の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Materials informatics: state-of-the-art and future perspectives
3. 学会等名 2020 I2CNER-IMI International Workshop on Applied Math for Energy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概論
3. 学会等名 CMCリサーチセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス概説
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクス：スモールデータと転移学習
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 データ科学の視点から見たマテリアルズインフォマティクスの諸問題と可能性
3. 学会等名 日本化学会 講演会「マテリアルズインフォマティクスを用いたものづくり最先端」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Katsura, M. Kumagai, M. Kaneshige, Y. Ando, S. Gunji, Y. Imai, R.Sato, T. Kodani, R. Ni, H. Ouchi, K. Kimura, K. Tsuda
2. 発表標題 Starrydata: an open database for experimental data extracted from published plot images
3. 学会等名 The 38th International Conference on Thermoelectrics (ICT2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Kimura, Y. Iwasaki, T. Takahashi, K. Kitahara, Y. Katsura, Y. Takagiwa, J.T. Okada
2. 発表標題 Search for semiconducting quasicrystal and high-performance thermoelectric material
3. 学会等名 The 38th International Conference on Thermoelectrics (ICT2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桂ゆかり
2. 発表標題 新規熱電材料探索の道のり～実験・計算・データ科学への挑戦～
3. 学会等名 第 16 回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2019) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桂ゆかり
2. 発表標題 論文からの大規模実験データの機械学習による熱電特性の直接予測
3. 学会等名 2019年第80回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桂ゆかり
2. 発表標題 Materials Informaticsによる新規ナノフレームワークホウ化物の探索
3. 学会等名 日本金属学会 2020年春期 第166回講演大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 機械学習の先進技術がもたらす物質・材料研究の革新：現状と課題
3. 学会等名 九州大学情報基盤研究開発センター 附属汎オミクス計測・計算科学センター開所式（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田 亮
2. 発表標題 高分子インフォマティクス概説
3. 学会等名 シーエムシー出版・AndTech共催セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yukari Katsura, Masaya Kumagai, Mitsunori Kaneshige, Yuki Ando, Sakiko Gunji, Yoji Imai, Riku Sato, Takushi Kodani, Kaoru Kimura, Koji Tsuda
2. 発表標題 Starrydata: a plot-mined database for published experimental data
3. 学会等名 The 3rd Forum of Materials Genome Engineering (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 伊藤 聡、吉田 亮、劉 暢、Stephen Wu、野口 瑤、山田 寛尚、赤木 和人、大林 一平、山下 智樹	4. 発行年 2022年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 202
3. 書名 マテリアルズインフォマティクス	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>HYP0D: comprehensive experimental datasets of quasicrystals and their approximants https://figshare.com/s/609fff971a91f9061756 XenonPy: Python library for materials informatics https://xenonpy.readthedocs.io/en/latest/ RadonPy https://github.com/RadonPy/RadonPy 開数出力変数カーネル回帰ソフトウェア https://github.com/yoshida-lab/XenonPy/blob/master/samples/kernel_neural_network.ipynb 結晶構造予測プログラムCSPML https://github.com/Minoru938/CSPML</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	桂 ゆかり (Katsura Yukari) (00553760)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・統合型材料開発・情報基盤部門・主任研究員 (82108)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	竹森 那由多 (Takemori Nayuta) (10784085)	大阪大学・量子情報・量子生命研究センター・准教授 (14401)	
研究分担者	野澤 和生 (Nozawa Kazuki) (00448763)	鹿児島大学・理工学域理学系・准教授 (17701)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関