

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：62603

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19H01132

研究課題名(和文) 機械学習の先進技術による革新的機能性物質の発掘

研究課題名(英文) Discovery of innovative functional materials using state-of-the-art machine learning

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) 34,600,000円

研究成果の概要(和文)：高分子材料，無機化合物，準周期系物質群等，様々な材料系を対象にマテリアルズインフォマティクスの学術基盤(データベース，機械学習の理論と方法論)を構築した。特にデータ駆動型材料研究における最も大きな壁であるデータ資源の不足の問題を克服するために，機械学習とシミュレーションの融合，Sim2Real転移学習等の異種データ統合解析手法の開発，独自の材料データベースの開発を推進した。また，これらの方法論を適用し，様々な材料系を対象に新物質及び新材料の発見を実現し(準結晶，高熱伝導非晶質高分子，高分子液晶等)，マテリアルズインフォマティクスのコンセプトを実証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

様々な材料系を対象にマテリアルズインフォマティクスの方法・実践・実証に関する研究を実施した。特にデータ駆動型材料研究では，データ資源の不足が問題視されている。この問題を乗り越えるために，計算機実験による大規模データベースを構築し，転移学習等の方法論で大量のシミュレーション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，高精度な予測器を構築できることを実証した。さらに，開発した機械学習の手法を用いて，準結晶，高熱伝導非晶質高分子，高分子液晶等，様々な新物質創製を実現した。なお全ての研究において論文発表時にデータとソースコードを公開した。

研究成果の概要(英文)：We have established the foundation (material database, theory and methodology of machine learning) of materials informatics for various material systems such as polymeric materials, inorganic compounds, and quasiperiodic materials. In particular, to overcome the problem of insufficient data resources, which is the biggest obstacle in data-driven materials research, we have promoted the integration of machine learning and computer experiments such as molecular dynamics simulations, the development of Sim2Real transfer learning methods for integrated analysis of heterogeneous data from real-world and computer experiments, and the development of materials database. We have also applied these methodologies to discover new materials for various material systems (quasicrystals, highly thermally conductive amorphous polymers, polymer liquid crystals, etc.), thus demonstrating the concept of materials informatics.

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 機械学習 データベース シミュレーション 高分子材料 準結晶 転移学習

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

材料設計のパラメータ空間は広大である。例えば、有機低分子化合物のケミカルスペースには、およそ 10^{60} 個の候補分子が存在するといわれている。さらに、実際の研究開発では、フィラーや添加剤の選択、プロセス変数などがパラメータに加わり、パラメータ空間は爆発的に増大する。マテリアルズインフォマティクス (MI: materials informatics) の問題は、このような広大な探索空間から所望の材料特性を有する未知パラメータを同定することに帰着する。これは多目的最適化の問題である。一般の工業品設計との本質的な違いは、パラメータ空間の特殊性と多様性にある。MI の設計変数は、組成、分子、結晶、微細構造、スペクトル、プロセス変数など、問題に応じて多様な形式をとる。

MI の最も基本的なワークフローは、順方向と逆方向の予測からなる (図 1)。順問題の目的は、系の入力に対する出力の予測である。例えば、入力は組成、化学構造、結晶構造やプロセス変数、出力は材料特性、反応収率、高次構造等に相当する。順方向の予測では、入出力の観測値集合を用いて、入力から出力を予測するモデルを構築する。なお、入力が組成 (集合変数)、化学構造 (グラフ)、結晶構造 (点群) のような非数値的変数については、記述子を用いてベクトル化された入力から出力への写像をモデル化する。逆方向の予測では、出力の目標値定め、順方向のモデルの逆写像を求めて、所望の出力を近似的に実現する入力を予測する。

このコンセプトは、一般化可能であり、材料系を問わず様々な問題に適用できる。入出力変数を定めた上でデータを集めて、順方向の予測モデルを構築し、逆問題を解く。ただそれだけのことである。しかしながら、材料研究の多くのケースにおいては、十分な量のデータを確保することは難しい。データ生成の高コスト性 (合成、試料作製、成形加工、分析、物性評価等) が技術面での主な阻害要因となる。また、競合相手に対して情報を秘匿したいという意識が高く、データ共有へのインセンティブが研究者に働きにくいという文化的な問題もデータ蓄積を阻む一因になる。さらに、革新的な材料の周辺にはデータは存在しない。しかしながら、データが存在しない未踏領域において、機械学習の“内挿的な予測”の有効性は失われる。したがって、戦略なきデータ駆動型研究では、真に革新的な材料の発見には到らない。すなわち、MI が抱える問題の多くは、データ資源の不足に帰着する。



図 1. MI における順問題・逆問題と本研究の成果概要

2. 研究の目的

MI における順問題・逆問題の概念は一般的である。本研究では、広範な材料系 (高分子材料系や無機材料系、準周期系物質群) を対象に、順問題・逆問題を解くための機械学習の包括的な方法論とソフトウェアを構築する。特にデータ駆動型材料研究における最も大きな壁であるデータ資源の不足の問題を克服するために、機械学習とシミュレーションの融合、転移学習等の異種データ統合解析手法の開発、独自の材料データベースの開発を推進する。また、これらの方法論を適用し、様々な材料系を対象に新物質及び新材料の発見を実現する。

3. 研究の方法

本研究では、MI における機械学習の方法論を構築した。MI の計算は、物質・材料の表現・学習・生成という三つのタスクから構成される。記述子で物質・材料の特徴を“表現”し、データを用いて物質から物性への数学的写像を“学習”する。さらに、その逆写像を求めて所望の物性を有する物質・材料を“生成”する。MI のデータ解析の特殊性の一つは、変数の特殊性と高次元性にある。組成、分子、結晶構造など、一般に固定長ベクトルに基づく特徴表現が非自明な変数が解析対象になることが多い。したがって、我々が対峙する課題をデータ科学の枠組みに帰着

させるには、変数の形式に応じて適切な記述子を用意しなければならない。記述子や表現学習については、縮約統計量に基づく組成記述子 (Liu et al., Adv Mater (2021), Liu et al., Phys Rev Mater (2023), Yamada et al., ACS Cent Sci (2019)), カーネル平均埋め込みに基づく力場・組成情報の完全記述子 (Kusaba et al., Phys Rev B (2023)), 転移学習・マルチタスク学習・メタ学習による自律的特徴抽出 (Wu et al., npj Comput Mater (2019), Yamada et al., ACS Cent Sci (2019), Ju et al., Phys Rev Mater (2021), Minami et al., Adv Neural Inf Process Syst (2024), Aoki et al., Macromolecules (2023)) 等の研究を実施した。また、生成タスクについては、ポリマー重合反応をルール化した仮想高分子生成器 (Ohno et al., J Chem Inf Model (2023)), 有機合成経路の逆設計アルゴリズム (Guo et al., J Chem Inf Model (2020), Zhang et al., STAM Methods (2023)), 元素置換や結晶の対称性を考慮した結晶構造生成器 (Kusaba et al., Comput Mater Sci (2022)) 等を開発した。

学習については、限られた材料データの壁を乗り越えるために転移学習とシミュレーションデータの活用という二つの戦略を講じた。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。転移学習は限られたデータの壁を乗り越えるための有効な手段になりうることで、様々な分野で実証されている。特に材料研究では、シミュレーションのデータを元ドメインとし、少数の実験データ为目标ドメインとした多数の研究事例が報告されている。本研究では、高分子材料系の熱伝導率予測 (Wu et al., npj Comput Mater (2019)), 無機材料系の熱伝導率予測 (Ju et al., Phys Rev Mater (2021)), 高分子と溶媒の相溶性予測 (Aoki et al., Macromolecules (2023)), 高分子計算物性と実験物性間の Sim2Real 転移学習 (Hayashi et al., npj Comput Mater (2022)) 等、幅広い物性予測タスクにおいて、転移学習の実践を展開し、その結果、いくつかの新材料を発見することに成功した。また、期待損失最小化原理に基づき導出されたアフィン転移学習という方法論を提案した (Minami et al., Adv Neural Inf Process Syst (2024))。

MI では、データの不足を補うためにシミュレーションから得られるデータを統合的に解析することが重要になる。近年、様々なドメインで体系的なデータベースの構築が進められている。高分子材料については、シミュレーション自動化の技術的な難しさや膨大な計算量がボトルネックとなり、現時点においては、包括的なデータベース創出に向けた動きは見えてこない。そこで我々は、全原子分子動力学シミュレーションによる高分子物性計算を全自動化するソフトウェア RadonPy を開発した (Hayashi et al., npj Comput Mater (2022))。現在は、1 国研・9 大学・36 企業が参画する産学連携コンソーシアムを形成し、RadonPy を用いて、10 万種類以上の分子骨格を包含する高分子物性データベースの共同開発を推進している。この大規模なシミュレーションデータは、転移学習における元ドメインのデータ資源として活用される。

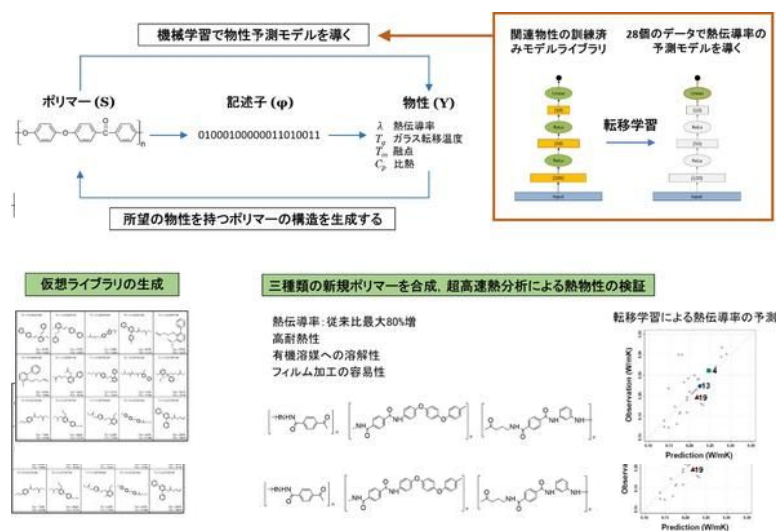


図 2. 三種類の高熱伝導性高分子の発見に至るワークフロー。転移学習を活用した熱伝導率の予測と分子設計の機械学習の技術が問題解決の突破口を切り拓いた。

4. 研究成果

様々な材料系を対象に MI における順問題と逆問題の方法・実践・実証に関する研究を実施した。なお全ての研究において、論文発表時にデータとソースコードを公開している。代表的な研究成果の概要は、以下の通りである。

- (1) Wu et al., npj Comput Mater (2019) (引用数 310) は、ポリマーの繰り返し単位の化学構造を入力とし、熱伝導率を予測するモデルを導き、その逆問題を解き、従来のポリマーに比べて約 80% の高熱伝導率を有するアモルファスポリマーを発見した。本研究では、転移学習を用いて高分子材料の熱伝導率の予測モデルを構築した (図 2)。学習には、高分子物性データベース PoLyInfo に収録されている 28 種類のアモルファスポリマーの熱伝導率を使用した。ポリ

マーのガラス転移温度，融点，比熱，粘度等を元ドメインとし，各々のドメインの訓練済みモデルを 28 個の熱伝導率のデータを用いて熱伝導率の予測モデルに転移した．さらに，転移モデルの逆問題を解き，高い熱伝導率を持つ 3 個の芳香族ポリアミドを発見することに成功した．

- (2) Yamada et al., ACS Cent Sci (2019) (引用数 303) では，低分子，高分子，無機材料の 45 種類の特性を対象に約 140,000 個の機械学習の予測モデルを開発し，訓練済みモデルライブラリ XenonPy.MDL を公開した．XenonPy は，本グループが開発しているマテリアルズインフォマティクスのオープンソースプラットフォームである．XenonPy には MI の様々なタスクを実行する機械学習アルゴリズムが実装されており，ユーザーは API 経由で XenonPy.MDL の訓練済みモデルを再利用し，材料設計の様々なワークフローを構築できる．同論文では，XenonPy.MDL のファーストリリースを発表するとともに物質・材料研究の様々なスモールデータタスクにおいて転移学習が持つ潜在的な予測性能を炙り出すことに成功した．
- (3) Ju et al., Phys Rev Mater (2021) (引用数 50) では，転移学習を用いて結晶構造から熱伝導率を予測するモデルを構築した．この研究では，目標物性の格子熱伝導率 (LTC: lattice thermal conductivity) のデータがたったの 45 件しかなく，通常の教師あり学習では予測精度の要求水準に到達できなかった．そこで，散乱位相空間 (SPS: scattering phase space) という関連物性を元ドメインとし，転移学習を適用して問題解決を図った．LTC に比べると SPS の第一原理計算のコストはかなり低い．そこで 320 個の化合物に対する SPS のデータを作成した．SPS のデータを用いてニューラルネットワークを訓練し，45 件のデータを用いて訓練済みモデルを LTC のモデルに転移した．このモデルを用いて仮想スクリーニングを実施し，鉄伝導率が 3000W/(mK) を超す無機結晶性化合物を発見した．

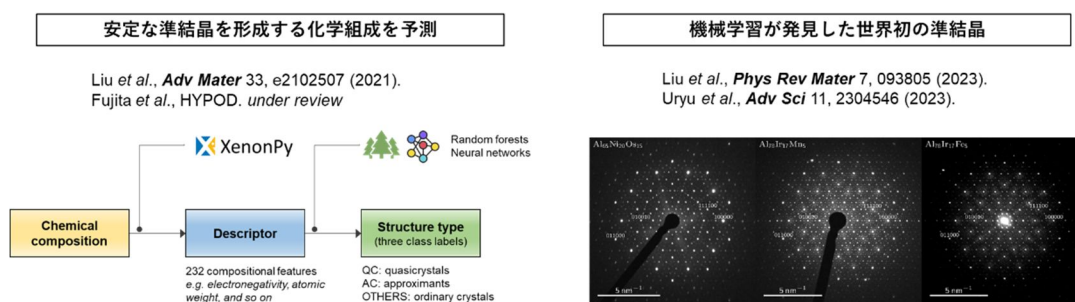


図 3 機械学習による準結晶を形成する化学組成の予測と発見された三つの準結晶の電子線回折像 (Al₆₅Ni₂₀Os₁₅, Al₇₈Ir₁₇Mn₅, Al₇₈Ir₁₇Fe₅) .

- (4) 準結晶研究におけるマテリアルズインフォマティクスの学術基盤を整備し，新規準結晶の発見を通じて，コンセプトを実証した．本研究では，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 43) . 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，通常の周期結晶の化学組成を学習データとして用い，準結晶か否かを判定する分類器を構築した．その結果，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をスクリーニングし，Al-Ni-Os, Al-Ir-Mn, Al-Ir-Fe の系を選定し，合成実験を実施した．その結果，全ての系において新規の準結晶相が発見された (Liu et al., *Phys Rev Mater* (2023)) . また，三つの物質はいずれも正 10 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) .
- (5) 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 面体準結晶相を発見した．
- (6) ある正則条件の下で期待損失を最小にする転移学習の族「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* (2024)) . 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．
- (7) Aoki et al., *Macromolecules* (2023) は，ポリマーと溶媒分子を入力とし，高分子溶液の相溶性 (フローリー・ハギンスの パラメータ) を高精度で予測可能なモデルを開発した．特に，系統バイアスを持ち，量的に限られた実験データから高精度な予測モデルを得るために，量子化学計算の大量のデータを利用した．マルチタスク学習という手法を用いて，これらの大

量のシミュレーション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、従来の機械学習のモデルに比べてより広範囲のポリマー・溶媒に適用可能な予測モデルの構築に成功した。

- (8) Iwayama et al., J Chem Inf Model (2022) は、出力変数が関数の形で与えられるケースにおいて、Kernel Regression for Functional Outputs (KRFO) という手法を開発した。MI における予測対象の変数は、本来は関数の形で与えられることが多い。例えば、分子の光吸収スペクトルを予測する場合、入力変数は化学構造、出力変数は波長領域上のスペクトル関数となる。また複合材料の微細構造の解析では、例えば、組成や加工条件が入力、出力変数は走査型電子顕微鏡で計測した微細構造のグレースケール画像を表す輝度行列となる。すなわち、このタスクは、行列あるいは二次元座標上の関数を出力変数とする回帰分析に帰着する。
- (9) Guo et al., J Chem Inf Model (2020) (引用数 38) と Zhang et al., STAM Methods (2023) では、有機化合物の合成経路探索の順問題・逆問題のアルゴリズムを開発した。入力変数は、反応物の集合と反応経路のネットワーク構造、反応条件、出力は生成物である。合成反応のデータベースを用いて、反応物から生成物への順方向のモデルを構築し、その逆写像を求めることで、所望の生成物の合成経路を設計した。Zhang et al., STAM Methods (2023) は同誌の Editor's choice に選定されて、同誌より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。
- (10) Kusaba et al., Comput Mater Sci (2022) (引用数 30) では、元素置換による物質探索の順問題・逆問題を機械学習で解くことを提案した。入力変数は二つの物質の化学組成、出力変数はそれらの結晶構造が類似しているか否かを表すクラスラベルである。既存物質のデータから順方向の予測モデルを導き、逆問題において、構造が既知の化学組成をアンカーとし、構造が類似する候補組成を列挙する。ソフトウェア CSPML を公開した。
- (11) 22 種類の高分子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 (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。
- (12) カーネル平均埋め込みという理論を用いて、力場パラメータに基づく高分子構造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 (2023))。

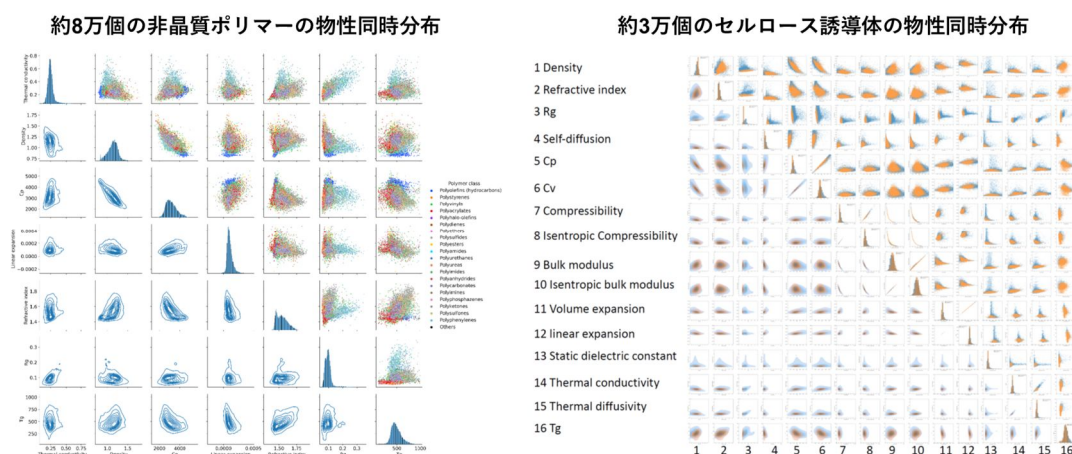


図4. RadonPyの網羅的計算機実験で明らかとなった複数物性の同時分布とパレート境界

- (13) RadonPy は、全原子古典分子動力学に基づく高分子物性計算機実験を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 (2022), 引用数 30)。最新版には、熱伝導率、比熱、ガラス転移温度、線膨張係数、誘電特性、屈折率を含む 34 物性に対する自動計算コードが実装されている。計算可能な系は、ホモポリマー、コポリマー、架橋ポリマーのアモルファスあるいは延伸配向構造を含む。本プロジェクトでは、1 国研・9 大学・36 企業 (約 240 名) が参画する産学連携コンソーシアムを形成し、RadonPy を用いて、10 万種類以上の分子骨格を包含する高分子物性データベースの共同開発を推進している。このデータベースは、Sim2Real 転移学習のデータ資源として活用される。また、データを生産・蓄積する過程で、複数の物性の同時分布や物性間のトレードオフが生み出すパレートフロンティア、さらにフロンティアを形成する新材料が明らかになっていく (図 4)。材料合成を伴う実験系だけでは、このような網羅的なデータ生成は技術的に難しい。
- (14) RadonPy の高分子物性計算機自動実験 (項目(13)) と確率言語モデルによる高分子設計アルゴリズム (項目(1))、仮想高分子生成器 SMiPoly (項目(11)) を統合した高分子設計システム SPACIER を開発した。実証研究では、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。
- (15) 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を開発し、芳香族ポリア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、ポリマー合成を実施した。合成されたポリアイミド樹脂はいずれもスメクチック液晶相を形成し、熱伝導率が $1.0 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ 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。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計25件（うち査読付論文 23件／うち国際共著 3件／うちオープンアクセス 21件）

1. 著者名 Uryu Hirota, 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 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 Zamengo Massimiliano, Wu Stephen, Yoshida Ryo, Morikawa Junko	4. 巻 218
2. 論文標題 Multi-objective optimization for assisting the design of fixed-type packed bed reactors for chemical heat storage	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Thermal Engineering	6. 最初と最後の頁 119327 ~ 119327
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.applthermaleng.2022.119327	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 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.commat.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 Jiaxin, 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 Zamengo Massimiliano, Wu Stephen, Yoshida Ryo, Morikawa Junko	4. 巻 218
2. 論文標題 Multi-objective optimization for assisting the design of fixed-type packed bed reactors for chemical heat storage	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Thermal Engineering	6. 最初と最後の頁 119327 ~ 119327
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.applthermaleng.2022.119327	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 Ohno Mitsuru, Hayashi Yoshihiro, Zhang Qi, Kaneko Yu, Yoshida Ryo	4. 巻 -
2. 論文標題 SMiPoly: Generation of Synthesizable Polymer Virtual Library using Rule-based Polymerization Reactions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ChemRxiv preprint	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) 10.26434/chemrxiv-2023-w54wn	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 Minami Shunya, Liu Song, Wu Stephen, Fukumizu Kenji, Yoshida Ryo	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) 10.1609/aaai.v35i10.17087	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 Ju Shenghong, Yoshida Ryo, Liu Chang, Wu Stephen, Hongo Kenta, Tadano Terumasa, Shiomi Junichiro	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 -

1. 著者名 Liu Chang, Fujita Erina, Katsura Yukari, Inada Yuki, Ishikawa Asuka, Tamura Ryuji, Kimura Kaoru, Yoshida Ryo	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 ~ 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 Kusaba Minoru, Liu Chang, Koyama Yukinori, Terakura Kiyoyuki, Yoshida Ryo	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 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 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 Stephen Wu, Yukiko Kondo, Masa-aki Kakimoto, Bin Yang, Hironao Yamada, Isao Kuwajima, Guillaume Lambard, Kenta Hongo, Yibin Xu, Junichiro Shiomi, Christoph Schick, Junko Morikawa, Ryo Yoshida	4. 巻 5
2. 論文標題 Machine-learning-assisted discovery of polymers with high thermal conductivity using a molecular design algorithm	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 npj Computational Materials	6. 最初と最後の頁 66
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-019-0203-2	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126件 (うち招待講演 100件 / うち国際学会 21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)
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（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 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 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：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 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 林 慶浩, Wu Stephen, 野口 瑶, 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 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 劉 暢, 吉田 亮
2. 発表標題 統計的機械学習による新規準結晶の探索：現状と課題
3. 学会等名 新学術領域 ハイパーマテリアル 第8回領域会議
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 Yuta Aoki, Teruki Tsurimoto, Tadamichi Okubo, Stephen Wu, Yoshihiro Hayashi, Shunya Minami, Kazuya Shiratori, Ryo Yoshida
2. 発表標題 Multitask machine learning for prediction and understanding of polymer-solvent solubility
3. 学会等名 5th G' L' owing Polymer Symposium in KANTO (GPS-K2022)
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9回新学術領域会議
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」（招待講演）
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. Nabae, 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 吉田 亮
2. 発表標題 プロジェクト概要：データ駆動型高分子材料研究の諸問題
3. 学会等名 「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」公開セミナー
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（招待講演）
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 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 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 瑤, 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 ウ ステファン, 野口 瑠, 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, 劉 暢, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 稲田 祐樹, 石川 明日香, 瓜生 寛堂, 山田 庸公, 田村 隆治, 木村 薫
2. 発表標題 Hypermaterials Informatics: Present and Future Perspectives
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第 6 回領域会議
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 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 林 慶浩, Wu Stephen, 野口 瑠, 塩見 淳一郎, 森川 淳子, 吉田 亮
2. 発表標題 高分子インフォマティクスのための分子動力学計算による物性自動計算システム
3. 学会等名 第70回高分子学会年次大会
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 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（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 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 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 Tge 1st International School on Hypermaterials (招待講演) (国際学会)
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 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 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 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「科学実験の自動化が拓くAI時代の創薬研究」(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：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 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) (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 Materials Discovery
3. 学会等名 Bristol-ISM Data Science Seminar Series (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 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回高機能素材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 吉田亮
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 吉田亮
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 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 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 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記述子設計技術～材料構造の表現・学習・生成のための機械学習技術～
3. 学会等名 技術情報協会 マテリアルズ インフォマティクス 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 materials design and discovery: how do we learn from little?
3. 学会等名 2nd International Conference on Data Driven Plasma Science (2nd ICDDPS)（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 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7回 関西 高機能素材Week（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の基礎と応用
3. 学会等名 R&D支援センターセミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryo Yoshida
2. 発表標題 Bayesian methods and their applications
3. 学会等名 The 4th Eastern Asia Chapter Meeting on Bayesian Statistics (EAC-ISBA2019)（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概論
3. 学会等名 CMCリサーチセミナー（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 南俊匠
2. 発表標題 A general framework for transfer learning
3. 学会等名 2019年度 日本統計関連学会連合大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Zhang Qi
2. 発表標題 Inverse molecular design with machine translation model
3. 学会等名 2019年度 日本統計関連学会連合大会
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〕

XenonPy: Python library for materials informatics
<https://xenonpy.readthedocs.io/en/latest/>
 RadonPy
<https://github.com/RadonPy/RadonPy>
 関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>
 分子・合成経路自動生成アルゴリズムSeq-Stack-Reaction
<https://github.com/qi-zh/Seq-Stack-Reaction>

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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			
米国	ノートルダム大学			
英国	Bristol University			
ドイツ	University of Rostock			