

Symposium (Oral) | Symposium : Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

📅 Wed. Sep 10, 2025 1:00 PM - 5:00 PM JST | Wed. Sep 10, 2025 4:00 AM - 8:00 AM UTC | 🏠 S101 (Lecture Hall South)

[10p-S101-1~6] Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

Kentaro Kutsukake(Nagoya Univ.), Toyohiro Chikyo(NIMS), Masato Kotsugi(Tokyo Univ. of Sci.)

1:00 PM - 1:30 PM JST | 4:00 AM - 4:30 AM UTC

[10p-S101-1] Global Trends in Materials Informatics

○Mari Ofuchi¹ (1.JST-CRDS)

1:30 PM - 2:00 PM JST | 4:30 AM - 5:00 AM UTC

[10p-S101-2] Development of r2SCAN level machine learning interatomic potential and its applications

○So Takamoto¹ (1.PFN)

2:00 PM - 2:30 PM JST | 5:00 AM - 5:30 AM UTC

[10p-S101-3] Global Trends and Future Outlook in Data- and Robot-Driven Science

○Taro Hitosugi^{1,2} (1.The University of Tokyo, 2.Institute of Science Tokyo)

2:45 PM - 3:15 PM JST | 5:45 AM - 6:15 AM UTC

[10p-S101-4] Progress and Outlook of Metrology Informatics

○Shigetaka Tomiya¹ (1.NAIST)

3:15 PM - 3:45 PM JST | 6:15 AM - 6:45 AM UTC

[10p-S101-5] A Historical Perspective and Analysis of Informatics Applications in the Japan Society of Applied Physics

○Shun Muroga¹ (1.AIST)

4:00 PM - 5:00 PM JST | 7:00 AM - 8:00 AM UTC

[10p-S101-6] Panel discussion

Mari Ofuchi¹, Taro Hitosugi², Shigetaka Tomiya³, Sou Takamoto⁴, Shun Muroga⁵, ○Kentaro Kutsukake⁶, Toyohiro Chikyo⁷, Masato Kotsugi⁸ (1.JST, 2.UTokyo, 3.NAIST, 4.PreferredNetworks, 5.AIST, 6.Nagoya Univ., 7.NIMS, 8.TUS)

Symposium (Oral) | Symposium : Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

Wed. Sep 10, 2025 1:00 PM - 5:00 PM JST | Wed. Sep 10, 2025 4:00 AM - 8:00 AM UTC | S101 (Lecture Hall South)

[10p-S101-1~6] Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

Kentaro Kutsukake(Nagoya Univ.), Toyohiro Chikyo(NIMS), Masato Kotsugi(Tokyo Univ. of Sci.)

1:00 PM - 1:30 PM JST | 4:00 AM - 4:30 AM UTC

[10p-S101-1] Global Trends in Materials Informatics

OMari Ofuchi¹ (1.JST-CRDS)

Keywords : materials informatics

We will introduce policy and technology trends regarding informatics (AI) technology in materials research and development both in Japan and overseas.

**r2SCANのエネルギー曲面を学習した
汎用機械学習ポテンシャルの作成とその適用事例**
**Development of r2SCAN level machine learning interatomic
potential and its applications**

Title of Extended Abstract of the Japan Society of Applied Physics

株式会社 Preferred Networks¹ ○高本 聡¹

Preferred Networks, Inc.¹, °So Takamoto¹

E-mail: takamoto@preferred.jp

機械学習の活用による汎用原子間ポテンシャルの概念に注目が集まっており[1], 様々な系に適用できる汎用性を維持しつつ第一原理計算よりスケールの大きい分子動力学計算を行うことのできる技術として近年多くの研究機関で開発が進められている. 著者らが開発しているニューラルネットワークポテンシャルPFP [2,3]は, 個別の解析対象ごとにファインチューニングを行うことなく, 単一のモデルで任意の元素の組み合わせを扱うことのできる汎用性を特徴としている. 直近のバージョンであるPFP v7はHからCmまでの96元素の任意の組み合わせを扱うことができ, 分子, 結晶, 表面などの系で精度が検証されている.

機械学習モデルの回帰精度が向上するにつれ, さらなる精度向上のためにはデータセットの作成に使われるDFT計算自体の精度がより重要となってきた. PFPはv7までは広く使われているGGAレベルの汎関数であるPBEにより主要なデータセットを構築してきたが, 物性値の再現性においてPBEでの再現性に依存する課題が明らかになってきた. そこで我々は次バージョンのPFPに向けて, より分子の結合エネルギーや結晶の形成エネルギーを正確に再現することのできるmeta-GGAレベルの汎関数であるr2SCANによるデータセットの構築を開始した.

r2SCANはPBEと比べて計算コストが大幅に高くなるため, 一定の計算時間の中でPBEと全く同じ規模のデータセットを構築することは難しい. そこで, 既存の大規模なPBEデータセットと新しく計算したr2SCANデータセットの両方を使って学習する方針とした. これは機械学習ポテンシャルにおいて複数のDFT計算のデータセットを同時に扱うタスクとなる. 我々は初期のPFPの開発で孤立基底と平面波基底のDFT計算のデータセットの両立が必要となり, 類似の課題に取り組んできた[2]. このとき, それぞれのデータセットに独立なラベルを割り当てて学習を行うことで, 個別のDFT計算の特徴を保持しつつ, 特定のデータセットに含まれていない元素についても異なるデータセットの情報を受け継いで破綻せずに推論を行うといった柔軟なエネルギー曲面の再現が実現した. 今回も類似の方針で複数のデータセットを統合することにより, PBEデータセットで広範囲なエネルギー曲面を学習しつつ, r2SCANデータセットに対応する領域で高い精度を再現することが可能となった.

r2SCANに対応したPFPの初期の成果として, HからBiまでの70の元素のr2SCANのデータセットを学習したPFPを作成した. 得られたモデルは, 物質ごとのファインチューニングなしで結晶形成エネルギーや融点, 液体の密度といった物性を再現することが示された.

References

[1] Ryan Jacobs, et al., Current Opinion in Solid State and Materials Science 35, 101214 (2025).

[2] S. Takamoto, et al., Nat Commun 13, 2991 (2022).

[3] S. Takamoto, et al., Journal of Materiomics 9, 3, 447-454 (2023).

日本は自動・自律実験で世界をリードしている: 自信を持って前へ!

～データ・ロボット駆動科学の世界的動向と展望～

東大理, Science Tokyo 物質理工 一杉 太郎

E-mail: hitosugi@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

近年、マテリアル研究(化学、材料、物性研究)において、機械学習およびロボット技術を活用した手法が世界的に急速に発展している[1]。これにより、膨大な実験データの収集・利活用や、人間には困難な実験への挑戦が可能となっている。**研究者が創造性を発揮できる研究環境の構築を進めるとともに、次世代への技術継承や研究人材不足の課題解決が強く望まれている。**

本講演では以下について議論する。

1. 英国、カナダ、米国、中国、韓国などは、巨額を投資している。Microsoft や Google も研究に参画し、生成 AI を活用した材料設計も活発化している。
2. 私自身、この数年間に世界の拠点を複数、訪問した。その結論は、**自動・自律実験(図1の小さなループ)では、日本が世界をリードしている**ということである。日本における理化学機器産業の強さ、ハードウェア構築力の強さが背景にある。今後、**より低コスト化して、だれもが自動・自律実験に取り組めるよう、民主化**が望まれる。
3. しかし、図1の大きなループでは、日本は遅れはじめていると危機感を感じている。この**二つのループを組み合わせていることが重要**である。
4. 日本のマテリアル産業とアカデミアを強化するには、理化学機器企業と研究者が win-win になる→素晴らしい実験装置・システムが生まれる→研究者を刺激→研究が活発化→産業とアカデミアが隆盛、という道筋が考えられる。

2026 年度からはじまる第7期科学技術・イノベーション基本計画に向けて「**マテリアル革新力強化戦略**」が改訂された[2]。そこでも、機械学習とロボットの活用による研究開発手法の革新について力強くうたわれている。政府の支援が今後も続くのは確実である。また、企業の投資も活発化している。それらを踏まえ、科学の発展に貢献するために何をすべきか考えたい。

[1] 一杉太郎編、"マテリアル×機械学習×ロボット" 東京化学同人 (2024)。

[2] 内閣府ホームページ <https://www8.cao.go.jp/cstp/material/material.html>

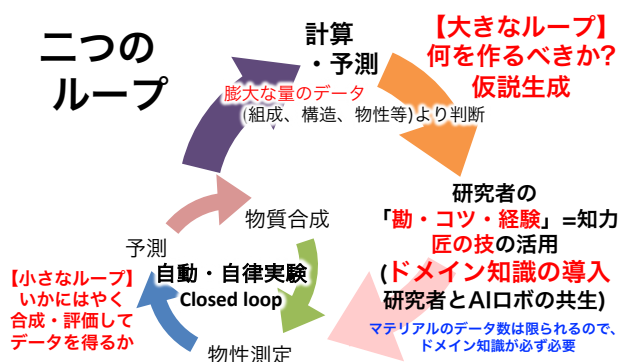


図1 小さなループ(自動・自律実験)と大きなループ(仮説生成と研究者の勘・コツ・経験の融合)

計測インフォマティクスの進展と将来展望

Progress and Outlook of Metrology Informatics

奈良先端大¹, 科学大², ○富谷 茂隆^{1,2}

NAIST.¹, Science Tokyo², °Shigetaka Tomiya^{1,2}

E-mail: s.tomiya@dsc.naist.jp, tomiya.s.952f@m.isct.ac.jp

半導体、クリーンエネルギー、創薬といった分野は、持続可能な社会の構築、人々の生活の質の向上、そして経済的成長を支える基盤である。これらの分野における革新的な機能材料・デバイスへのニーズはかつてないほど高まっており、その開発には、従来の労働集約的・経験依存型の研究スタイルから、自律的かつデータ駆動型の研究パラダイムへの転換が求められている。

この研究パラダイムの転換には、材料・デバイス設計、合成・プロセス、特性評価、データ解析、意志決定といった研究サイクルの各段階を密接に連携させる必要がある。その中でも、評価・計測とそのデータ処理技術は、サイクル全体を回す中核的役割を担っている。

近年、X線回折、フーリエ変換赤外分光、ラマン分光、核磁気共鳴、質量分析などの分光技術や、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、原子間力顕微鏡などの顕微鏡技術の発展により、取得される計測データは指数関数的に増加している。これに伴い、以下のような課題が顕在化している：

- 1) 複雑かつ大規模なデータの解析に多大な時間を要し、迅速な処理技術が求められている。
- 2) 人的介入を最小化しつつ、高精度な解析を実現する信頼性の高い自動解析手法が必要である。
- 3) 大量データから科学的に意味のある情報を抽出する技術の確立が急務である。
- 4) 異なる計測手法を統合し、相互に補完するマルチモーダル解析の導入が必要である。
- 5) 計測・分析データのシステムティックな蓄積とそれを活用するための基盤整備が必要である。

これらの課題解決には、データ科学の導入が不可欠であり、計測・分析分野とデータ科学の融合が急速に進みつつある。その端緒ともいえるのが、1970年代にスウェーデンの Wold 教授が提唱した「ケモメトリクス」である。これは、スペクトルデータの多変量解析に端を発し、近年の計算機能力と機械学習技術の進展とともに応用範囲を広げ、「計測インフォマティクス」として大きく発展している。

本講演では、材料・デバイス研究開発を支える「計測インフォマティクス」のこれまでの歩みを振り返るとともに、今後の展望とその可能性について議論する。

Symposium (Oral) | Symposium : Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

Wed. Sep 10, 2025 1:00 PM - 5:00 PM JST | Wed. Sep 10, 2025 4:00 AM - 8:00 AM UTC | S101 (Lecture Hall South)

[10p-S101-1~6] Future of informatics applications - Global trends, interdisciplinary collaboration, and new challenges -

Kentaro Kutsukake(Nagoya Univ.), Toyohiro Chikyo(NIMS), Masato Kotsugi(Tokyo Univ. of Sci.)

3:15 PM - 3:45 PM JST | 6:15 AM - 6:45 AM UTC

[10p-S101-5] A Historical Perspective and Analysis of Informatics Applications in the Japan Society of Applied Physics

○Shun Muroga¹ (1.AIST)

Keywords : Infomatics、 machine learning

The transformation of the materials, process, and measurement fields driven by data science is advancing at a remarkable pace. In parallel, the number of presentations on informatics applications within the Japan Society of Applied Physics is steadily increasing. This talk reviews the progress made so far and discusses current research trends and future challenges.
