

TAC-MI Tokyo Tech Academy for
Convergence of Materials and Informatics

News Letter Vol.6

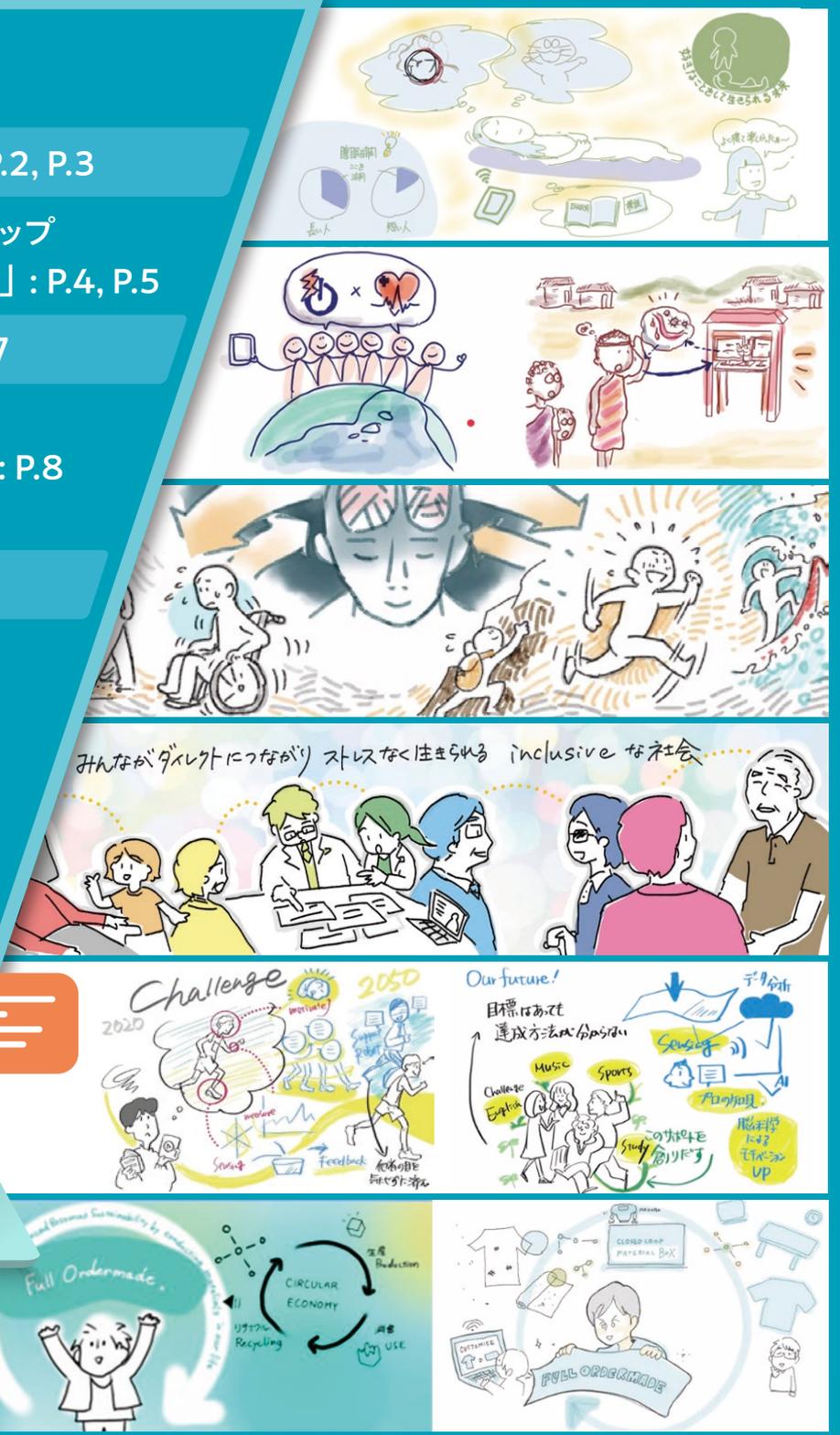
Mar. 2021

東京工業大学 物質・情報卓越教育院

文部科学省平成30年度卓越大学院プログラム
「物質 × 情報 = 複素人材」育成を通じた持続可能社会の創造

Contents

- ・ プラクティススクール実施報告 : P.2, P.3
- ・ 未来社会サービス創出ワークショップ
「実現したい10年後の未来社会」 : P.4, P.5
- ・ 国際フォーラム開催報告 : P.6, P.7
- ・ TAC-MI授業科目紹介
マテリアルズインフォマティクス : P.8
新産業創出最前線 : P.9
- ・ TAC-MIニュース : P.10
- ・ 企業アドバイザーからの
メッセージ : P.10



2020年度プラクティススクール実施報告

プラクティススクールは博士後期課程1年の科目です。物質・情報卓越プラクティススクール第一では、企業訪問に先だって、マテリアルズシミュレーションとマテリアルズインフォマティクスの復習と実習を行いました。2020年度の物質・情報卓越プラクティススクール第二は、旭化成株式会社とTDK株式会社の2社で実施いたしました。

両社から出された課題はいずれも製品などに関連するアウトプットが明確な課題であり、日頃の博士課程での研究とは異なるものでしたが、学生たちは、6週間という限られた期間の中でインフォマティクスやシミュレーションのテクニックを有効に用いることで、目覚ましい成果を出しました。学生たちは、各社の担当研究者とTAC-MI教員を交えたディスカッションを適宜行いながら改善を繰り返し、果敢に課題解決に挑戦していました。異なるバックグラウンドを持つ学生たちが協力し合って、課題解決に取り組む姿は素晴らしく、彼らの能力の高さを改めて認識させられる機会にもなりました。

コロナ禍という特殊な状況下、細やかなご配慮をいただきながら絶好の教育の機会を与えていただいた旭化成株式会社とTDK株式会社に深く感謝申し上げます。

(物質・情報卓越教育院 特任教授 川内進)

物質・情報卓越プラクティススクール 第二(旭化成株式会社)

9月1日~10月12日の6週間、小松 遊矢、齊藤 彰吾、井上 恵希、渡部 拓馬、佐々木 遼馬、大久保 辰哉、岸野 真之の7名の学生が参加しました。

2分野4テーマの課題について、各テーマにつき1から2名の学生のチームに分かれて取り組みました。旭化成株式会社では昨年度に引き続いてのプラクティススクールでしたが、今年度はリモートワークも活用して行われました。学生たちは普段学んでいる分野と異なる分野をリモートで学ぶことに苦戦しつつも、企業の担当の方やチームメンバーと協力して課題に取り組んでいる姿が印象的でした。実際に製品を作っておられる方との積極的な議論や厳しいコメントを通して企業での開発を体験している例や、プログラムを普段書かない実験系の学生たちが協力して高度なプログラムを書いている例もあり、学生の成長も見られました。

これらの成果は、10月12日、神奈川県厚木市の厚木アクストメインタワーを会場としオンラインを組み合わせて、本学と旭化成株式会社によるプラクティススクール最終報告会で報告されました。参加学生7名の報告に対し、本学教員および企業関係者ら50名を超える参加者から活発な質疑が行われました。

(物質・情報卓越教育院 特任講師 安尾 信明)



プラクティススクールに取り組む学生たち



プラクティススクール最終報告会の様子



水本 哲弥 理事・副学長(教育担当)の講評(リモート)



プラクティススクール最終報告会(旭化成株式会社 厚木アクストメインタワー)

参加学生のコメント



大久保 辰哉
博士後期課程1年
物質理工学院 応用化学系 エネルギーコース

情報技術を用いて企業の課題解決に取り組むことは、他ではできない貴重な経験であると改めて感じました。初めは短期間で難しい課題にどう対処すればよいかと試行錯誤しましたが、物質科学や情報科学に精通する先生方や企業の方々のご支援のもと、同期の仲間と協力して、何とか当初の計画を達成することができました。このような経験はプラクティススクールならではの経験だと考えています。

今後はプラクティススクールで得られた知識や経験と、自身のこれまでの研究とのアナロジーをもとに、今後の人生へとフィードバックしていきたいと思っています。

旭化成株式会社からのメッセージ

昨年に引き続き、今年度もプラクティススクールを実施いただき感謝致します。

昨今のコロナ禍の状況から、出社と在宅勤務の併用など、教職員および学生の皆様には様々な制約の中でプラクティススクールを実施いただきました。しかしながら、このような制限下でも我々の期待以上の成果や知見を得ることができました。これも学生の皆様の真摯な姿勢と、教職員の皆様の多大なサポートの賜物であると考えており、改めて貴学の実力に感嘆させられた次第です。

今後のTAC-MIの発展と皆様のご活躍を心より祈念いたします。

物質・情報卓越プラクティススクール 第二 (TDK株式会社)

10月19日～11月27日の6週間、北 玲男、小林 柊司、渡邊 佑紀、Gekko Patria Budiutama、Chen Yugen、Hao Yingquan、廣畑 智紀、李 智の8名の学生が参加し、無機班と有機班の2つのグループに分かれてそれぞれの課題に取り組みました。

マテリアルズシミュレーションと機械学習を用いた高機能材料探索のためのプラットフォーム作成に取り組みました。全学生がプログラムを自分自身の手で書き、試行錯誤を繰り返しながら課題を進めてくれました。最初は教わるばかりだった学生も、プラクティススクールも後半に入ると、学生から色々な意見も出てくるようになり、学生が短期間で急成長する様を見ることができました。学生は、プラクティススクール最終日まで、夢中になって、そして大きな責任感を持って、TDK株式会社に少しでも貢献しようと全力で課題に取り組んでくれました。また、最後まで学生に付き合い、そのような環境を作っていただいた社員の皆様には大変感謝申し上げます。

得られた成果は、11月27日、千葉県市川市のTDK株式会社テクニカルセンターを会場とし、社内オンラインを加えて、本学とTDK株式会社によるプラクティススクール最終報告会を開催しました。参加学生8名の報告に対し、本学教員および企業関係者ら50名を超える参加者から活発な質疑が行われ、大盛況のうちに幕を閉じました。

(物質・情報卓越教育院 特任准教授 松下 雄一郎)



プラクティススクール最終成果報告会での学生による発表



プログラム責任者 須佐匡裕物質理工学院長の講評



山口猛央教育院長より課題に取り組んだ学生たちを表彰



プラクティススクール最終成果報告会 (TDK株式会社テクニカルセンター)

参加学生のコメント



HAO YINGQUAN
博士後期課程2年(9月入学)
物質理工学院 応用化学系 応用化学コース

今回のプラクティススクールでは、「企業が直面している課題に対し、情報技術を用いて解決案を見つけ出す」貴重な体験をさせていただきました。自身も所属している研究室で機械学習の研究を取り込んでいますが、企業の中での開発は研究室と異なって、特徴量が揃っているデータが少なく、その上で汎用性が高い機械学習モデルを構築するのは課題になりました。

最終的には、TDK株式会社の皆様と物質・情報卓越教育院の先生方のおかげで、我々は数理モデルを機械学習中に取り込むことで目標を達成しました。また、分野の異なる学生たちと、完全に新しい課題を短時間内に解決する企業スタイルの研究を経験したことは、自身の人生の大きな糧になっていると思います。

TDK株式会社 からのメッセージ

この度はプラクティススクールを実施して頂きありがとうございました。材料開発の2テーマにチャレンジして頂きましたが、物質×情報の知識を活かし、今後の研究開発に役立つ提案や成果を残して下さいました。今年は新型コロナウイルスの影響で満足な実施環境のご提供が出来ませんでした。参加学生の高い知識や熱意と教職員の的確なご指導により、6週間の短期間で目に見える結果を出して頂いたことに感謝申し上げます。

学生の皆さんが、プラクティススクールでの経験を活かし、世界をリードする様な研究開発リーダーに成長して活躍される様になるのが楽しみです。TAC-MIの更なる発展と優れた人材輩出に期待しております。

2020年度プラクティススクールを終えて



物質・情報卓越教育院長
山口 猛央
(科学技術創成研究院 / 物質理工学院・教授)

出来、大学では触れることが出来ない課題において、シミュレーションやインフォマティクスを活用して多くの課題解決や解決法の提案が出来ました。また、両企業様より、高い評価を頂きました。ありがとうございました。

学生の方々は、このスクールを通して、多くの情報から本質を見いだす力、その分野での常識を気にせず、新しい提案をする勇気を身につけたと思います。この状況下での成功は教育院にとって大きな前進であり、物質・情報さらにプロセス分野における研究開発の進め方を大きく変える方法論を積み上げました。企業様でも、研究や現場でのプロセス開発において、計算や情報技術を生かす機会となれば幸いです。今後とも、プラクティススクールへのご協力をお願い申し上げます。

2020年度未来社会サービス創出ワークショップ開催報告

物質・情報卓越教育院 (TAC-MI) は、12月8日(火)～9日(水)に未来社会サービス創出ワークショップをオンラインで開催しました。

未来社会サービス創出ワークショップは、俯瞰力・リーダーシップ力を涵養することを目的として、毎年1回開催しています。

TAC-MIの学生が、海外の学生や企業の若手社員とともにグループを編成し、それぞれ自らの研究、業務における知識・経験等を活かしながら、未来社会における課題を設定し、その解決策を討論・提案します。

今年度の未来社会サービス創出ワークショップには、TAC-MIの博士後期課程1年の学生19名と会員企業の若手研究者6名、合計25名が参加しました。

今回のワークショップでは「物質・情報を活用した新しい価値の創造により、社会の『分断』を助長しない10年後の未来社会を構想しよう!」をテーマに設定しました。「分断」とは、医療や教育の機会における格差、価値観や文化、人種の隔たり、高齢者や障害者の疎外、ジェンダーに起因する不均等や疎外などの社会的課題のことを意味します。

ワークショップでは6グループに分かれ、自らの研究分野を活かして実現したい10年後の未来社会を構想し、成果を発表しました。各グループに1名のグラフィックレコーダーが付き、アイデア構想をその場で分かりやすくイラストにまとめ、可視化しました。

ワークショップテーマ

物質・情報を活用した新しい価値の創造により、社会の「分断」を助長しない10年後の未来社会を構想しよう!

ワークショップ1日目

2日間のワークショップについての趣旨説明

特別講演

平川 彰氏
(Red Dot Drone PTE. LTD. 代表)

ドローンの遠隔操作技術開発により創成したビジネス事例について、ご紹介いただきました。

グループごとにブレイクアウトルームに分かれてグループワーク開始

本学の未来社会DESIGN機構が開発した「未来シナリオカード」を参考に、実現したい世界を想像し、その実現のために解消すべき「分断」について考えました。

10年後までのロードマップを作成し、各グループのビジョンを発表

教員やファシリテーターからフィードバックをもらいました。

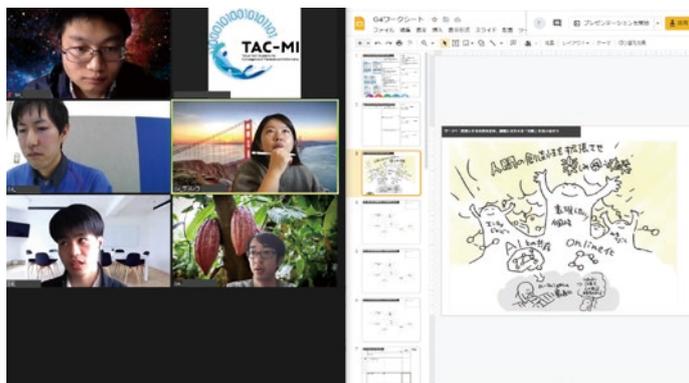
ワークショップ2日目

10年後までのロードマップをさらに検討、最終発表に向けて準備

最終発表会

水本 哲弥 理事・副学長 (教育担当)、本学教職員のほか、本プログラムの連携企業関係者、TAC-MIの博士後期課程2年や修士課程の学生など約100名が参加し、最終発表会を行いました。

表彰式



アイデア構想をグラフィックレコーダーがリアルタイムで可視化



実現したい未来と課題となりうる分断について考える

表彰式

全6グループから発表のあった「分断」を助長しない未来シナリオに対し、5名の審査員による審査が行われ、新規賞、課題設定賞、社会的インパクト賞の3つの賞を授与しました。



受賞チーム

新規性賞 グループ3
課題設定賞 グループ6
社会的インパクト賞 グループ4

審査



須佐 匡裕 審査委員長 (物質・情報卓越教育院プログラム責任者)

講評

一杉 太郎 副教育院長
水本 哲弥 理事・副学長



最後に、物質・情報卓越教育院の一杉 太郎 副教育院長と水本 哲弥 理事・副学長 (教育担当)より講評のお言葉をいただきました。

「実現したい10年後の未来社会」

グループ1 睡眠時間を有効活用できる世界 ～好きなことをして生きられる未来～

メンバー：李 智、井上 恵希、北 玲男、松田 啓嗣



私たちのグループでは、理想とする未来シナリオとして「睡眠時間の有効活用による生活の質の向上」を挙げました。今回私たちは、脳に映像を送信することにより、睡眠中に映画やアニメなどを視聴できるような技術開発を提案しました。これにより、睡眠時間が短い人も長い人も、限られた人生で、平等に充実した時間を過ごせるような社会が実現できることが期待できます。

本ワークショップでは自身が興味を持ったシナリオからスタートし、目標や課題などを段階的に議論していくという点で異なり短時間でありながら有意義な議論ができ、教員の方々も積極的に助言を下さりユニークなアイデアも含めることもできたと思います。

(博士後期課程1年 北 玲男)

グループ2 エネルギー自立型診断システムの構築 ～ヘルスケアが平等に行き渡る社会の実現に向けて～

メンバー：Yang Yue、廣畑 智紀、大久保 辰哉、平澤 学



グループ2は、実現したい未来に「ヘルスケアが平等に行き渡る社会の実現」を掲げ、電力システムの有無による分断を解決すべく、エネルギー関連技術とヘルスケア技術を組み合わせた「エネルギー自立型診断システム」を提案しました。

ワークショップでは、メンバーの専門性を生かしつつ、社会の分断を解決するプロセスを考える貴重な機会となりました。また、今回導入されたグラフィックレコーディングは、視覚的に論点を整理できる非常に優れた手法だと感じました。このワークショップでの学びを生かし、理想とする未来を思い描きながら、研究活動に励んでいこうと思います。

(博士後期課程1年 廣畑 智紀)

グループ3 ダイレクトにイメージを脳から脳へ伝える 全ての人の意思疎通が滞りなく行える

新規性賞

メンバー：小松 遊矢、Chen Yugen、Gekko Patia Budiutama、酒向 正己、堀川 裕史



私たちは、全ての人が意思疎通を円滑に行う事ができ、意思疎通にストレスのない繋がった社会の実現を目指しました。現在の課題を、身体的な分断とパーソナリティによる分断の2つと考え、解決のために、脳波と神経伝達物質のセンシングに着目しました。開発として、脳の情報の読み取り、情報を脳への伝達、そして脳から脳へのダイレクトな伝達という段階的な取組を計画しました。

各メンバーの意見統合や議論の推進には、グラフィックレコーダーの方による議論の可視化が助けとなり、問題点の鮮明化や効果的な意見交換ができ、充実したワークショップを経験できました。

(博士後期課程1年 酒向 正己)

グループ4 脳から感覚に関する信号を取得・貯蔵・送信の基礎技術が開拓される～人間の創造性を拡張させ楽しみ合う未来～

社会的インパクト賞

メンバー：齊藤 彰吾、佐々木 遼馬、Chen Xiao、池村 周也



グループ4が掲げた「人間の創造性を拡張させ楽しみ合う未来」とは、脳からの感覚に関する信号とVR技術を用いた仮想空間を組み合わせることで、誰もがなりたいたいものに成り代わることができる未来、というものです。この技術は人間が創造を行う際のきっかけとなる技術になると同時に、本来理解し得ない相手の立場を実際に感じ取れることから、あらゆる分断を取り払うことが期待されます。また、ワークショップ中で、グラフィックレコードが論点の整理や議論の振り返りに威力を発揮したことから、議論を円滑に進める方法の知見を得ることができました。

(博士後期課程1年 齊藤 彰吾)

グループ5 チャレンジする手法がわからない人がチャレンジできる世界～チャレンジするのに、コーチはいらない～

メンバー：渡邊 佑紀、Liao Qiancheng、岸野 真之、柴田 幸樹



私たちのグループは、「人のチャレンジを促すシステム」を提案しました。まず私たちは、人が不慣れな物事にチャレンジする際、他人の目を気にすることやチャレンジ方法がわからないことを理由に、チャレンジ自体を止めてしまうという分断に注目しました。この分断の解決を目的として、グループワークを進めました。

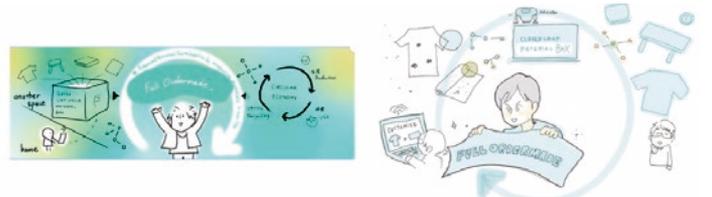
最終プレゼンでは、チャレンジのきっかけになるコーチングロボットやウェアラブル端末とソフトウェアが連携したコーチングシステムを提案しました。普段接する機会のない企業会員の方や、グラフィックレコーダーの方とも考えを共有でき、とても意義のある時間でした。

(博士後期課程1年 渡邊 佑紀)

グループ6 フルオーダーメイドものづくり～資源循環を活性化するものづくり～

課題設定賞

メンバー：Chon Seoungmin、小林 柊司、渡部 拓馬、山口 陽平



私たちのグループでは急速な進歩を遂げている自動合成やマテリアルズインフォマティクスの技術を活用して、「素材から設計できるフルオーダーメイドのモノづくりサービス」を提案しました。

コロナ禍の下、全てのプログラムをオンラインシステムにて行ったため、対面とは異なる意見交換の難しさがありましたが、会議の内容を絵によって可視化するグラフィックレコーダーの方が、チームの意見の集約や目指す未来社会の具現化に大きく貢献してくださいました。

今回、異分野の学生や企業の方と共に各々の専門知識や経験を取り入れて、独創的なアイデアを提案することができたと思います。

(博士後期課程1年 渡部 拓馬)

2020年度国際フォーラム開催報告

12月10日(木)~11日(金)に国際フォーラムをオンラインで開催しました。

物質・情報卓越教育院(TAC-MI)では、海外アドバイザー教員や企業関係者、本学プログラム担当教員を前に英語での研究発表を行うことで、国際コミュニケーション力の向上を図ることを目的として、毎年1回、国際フォーラムを開催しています。発表のほか、司会進行や質疑応答等にもすべて、英語が用いられます。

今年度は、博士後期課程1年の登録学生19名と博士後期課程2年の登録学生のうち6名が、自身の研究内容や自主設定論文の進捗について、英語でのプレゼンテーションを行いました。また、博士後期課程2年の登録学生全員(計10名)が、フォーラム全体の運営を担い、当日の司会も担当しました。2日間のフォーラムには、本プログラムの連携企業関係者や本学プログラム担当教員、TAC-MI学生など約100名が参加しました。

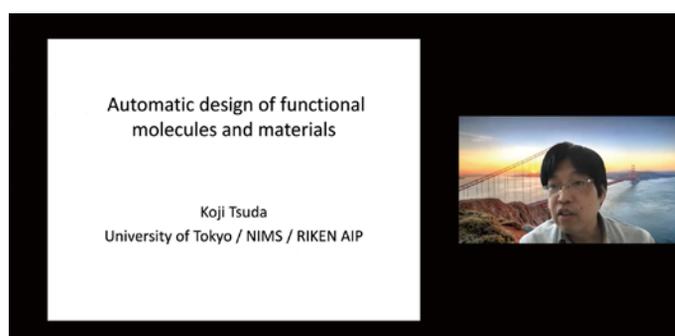
今年度の国際フォーラムは、新型コロナウイルス感染拡大防止及びオンライン開催による時差の関係より、海外アドバイザー教員には当日の参加はいただけませんでしたが、後日、担当する学生の発表の様子を録画でみていただき、オンラインにて学生との面談を実施いたしました。



国際フォーラムの参加者の集合写真

開会挨拶・基調講演

12月10日の開会式では、物質・情報卓越教育院の山口猛央教育院長と後藤敬教育委員会委員長が開会の挨拶を行いました。続いて、津田 宏治教授(東京大学大学院 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻)をお招きし、「Automatic design of functional molecules and materials」についてご講演いただきました。



東京大学大学院 津田宏治教授による講演

博士後期課程1年の学生による研究発表

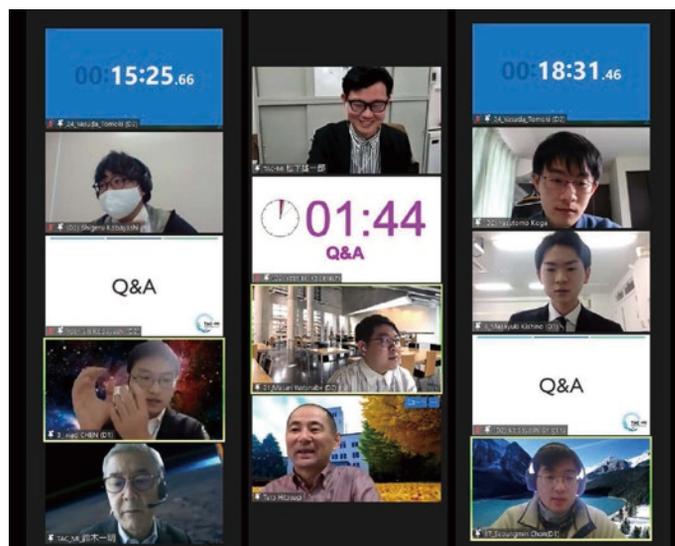
12月10日と11日午前博士後期課程1年の学生19名の研究発表が、プレゼンテーション15分、質疑応答5分で進められました。

国際フォーラムにおける博士後期課程1年の研究発表は、本教育課程の関門の一つである「博士論文研究基礎力審査(Qualifying Examination)」の一部を兼ねています。発表を行う学生は緊張の面持ちの中、自身のこれまでの研究の意義と成果についてのプレゼンテーションを熱心に行い、発表後には活発な質疑応答が行われました。

博士後期課程2年の学生の自主設定論文進捗発表

12月11日午前、博士後期課程1年の学生による研究発表に続き、博士後期課程2年の学生6名が自主設定論文進捗発表を行いました。

自主設定論文では、自らの博士論文研究とは異なる課題を自主的に設定して研究します。自身の専門と異なる研究室に2週間程度滞り研究を行う「物質情報異分野研究スキル」や海外インターシップなど、TAC-MIで得た学修成果を活用します。登録学生は、博士後期課程2年の6月の成果発表会もしくは12月の国際フォーラムにて、研究の進捗状況を発表した上で、博士後期課程修了時まで研究結果を報告します。今回は6月に報告を行った4名を除く6名が進捗発表を行い、出席者からのフィードバックを受けました。



活発な質疑応答が行われたQ&Aタイム

司会進行・企画運営を担当したD2学生からの感想

WEB開催であったため、タイムキープ、質疑の活性化、懇親会の方針など、オンサイトと考え方が異なるものが多く、はじめはかなり厳しさを感じていました。しかし、これまでのTAC-MIカリキュラムを通じ同期との仲が深まっていたので、議論の末、各々に合った役割を互いに割り振ることができました。結果、最後まで無事終えることができ、今は達成感が得られています。司会という立場から発表を聞くのも新鮮で、いつも以上に真剣に聴講・議論できた気がします。今年は少し変則的な運営になりましたが、この経験も必ず糧になると感じております。

(博士後期課程2年 保田 知輝)

当日のプログラム

9:00	12月10日(木)	9:00	12月11日(金)
	国際フォーラム 基調講演 東京大学 教授 津田宏治 先生 研究発表(D1)		国際フォーラム 研究発表(D1)
12:10		11:10	自主設定論文進捗発表(D2)
13:10	昼食	12:10	昼食
		13:10	ブレイクアウトルームによる 交流会
17:00	国際フォーラム 研究発表(D1)	13:40	企業メンターと学生の面談
		15:10	閉会式、表彰式
18:00	ブレイクアウトルームによる 交流会	15:30	
		16:30	企業アドバイザー連絡会

表彰式

博士後期課程1年の学生の研究発表に対し、博士論文研究基礎力審査とは別に、全ての研究発表を聞いた参加者による投票が行われ、最も票の多かった学生1名にベストプレゼンテーション賞 (Best Presentation Award) が、続いて票が多かった学生3名にグッドプレゼンテーション賞 (Good Presentation Award) が贈られました。



表彰式・受賞者の発表 (司会の保田さん、受賞者のGekkoさん、山口教育院長)

博士後期課程1年生の研究発表・受賞者のコメント

Best Presentation Award



Gekko Patria Budiutama
博士後期課程1年
物質理工学院 応用化学系
エネルギーコース

光エネルギーを直接電気に変換する太陽電池技術は発展速度が非常に高いため、価値がある新たな研究を行うために、幅広い分野における深い知識が求められます。TAC-MIの国際フォーラムでは様々な分野で活躍している方々でも自分の研究について理解できるように、複雑な研究内容が分かりやすく発表する必要があると思いました。そこで、私は研究の最もコアとなる情報をまとめ、分かりやすいロジックと単純なスライドで研究成果を発表させていただきました。その工夫の結果、Best Presentation Awardをいただき誠にありがとうございました。

今後の研究発展として、TAC-MIで学んだマテリアルズ・インフォマティクスを導入し、太陽電池技術をさらに向上させたいと思います。

Good Presentation Award ①



Chen Xiao
博士後期課程1年
工学院 情報通信系
情報通信コース

In the International Forum, students from different research fields all gave interesting presentations. I learned a lot from their explanation and the discussion between the presenter and the audience. I also received valuable questions from the audience, which helped me understand my present problem's details and gave me new ideas for solving problems. I think this is a precious experience for everyone. Moreover, I feel very pleased to be selected as a good presentation award among many nice presentations.

This is a motivation for me to continue my study to be a compound researcher as TAC-MI expected.

Good Presentation Award ②



小林 柁司
博士後期課程1年
理学院 化学系
化学コース

このたびは、国際フォーラムにおける発表でGood Presentation Awardを受賞することができ、大変光栄に思います。今回の国際フォーラムは、自身の研究全体を俯瞰的に振り返り、企業の方を始めとした専門外の方々へ分かりやすく発表することが求められ、日頃の学会発表とは少し異なった趣向で発表を行う、とても貴重な機会となりました。また、他研究室の学生がどのような研究をしているのかについても知ることができ、良い刺激となりました。

今回の受賞を励みに、今後とも研究活動に邁進していきたいと思ひます。

Good Presentation Award ②



井上 恵希
博士後期課程1年
物質理工学院 応用化学系
応用化学コース

国際フォーラムでは、聴講する学生や先生方の分野が多岐に渡っていることや、使用言語が英語であることから、普段の研究発表よりも工夫の施された発表が求められました。どの学生も分野外の人に伝わり易い発表を心がけたレベルの高い発表をしており、その中でGood Presentation Awardを受賞できたことを光栄に思います。

国際フォーラムでの発表を通して、自身の研究をより分かりやすく説明出来るようになっただけでなく、研究の立ち位置を一段高い視点から見られるようになったと感じます。

今回の経験を生かして今後の研究に邁進しようと思ひます。

2020年度国際フォーラムを終えて



物質・情報卓越教育院
企画・実施委員会委員長
関嶋 政和
(情報理工学院・准教授)

国際フォーラムは、昨年とは異なり、コロナ禍を受けてオンラインでの開催となりました。この決定は簡単なものではなく、TAC-MI専任の先生方、企画・実施委員会の先生方と多くの時間を掛けて丁寧に議論を行いました。

マテリアルズ・インフォマティクスを専門とする東京大学の津田宏治先生の基調講演から始まり、2日間に渡り博士後期課程1年生の学生の研究発表と博士後期課程2年生の学生さんによる自主設定論文進捗状況報告がありましたが、博士後期課程1年生の学生さんにとっては発表がQE(Qualifying Examination)の一部であるため、大変緊張されたのではと思います。学生の皆さんも多くの準備をされたのだと思いますが、聴講された本学教員や企業会員の皆様方からも発表について良い評価を頂いていると考えております。

今回は司会進行・企画運営も学生さんの力をお借りして実施を致しました。発表の経験、司会や企画の経験それぞれが皆さんの糧となるよう祈っております。お力添えを賜りました全ての皆様に厚く御礼を申し上げます。

TAC-MI授業紹介「マテリアルズインフォマティクス」

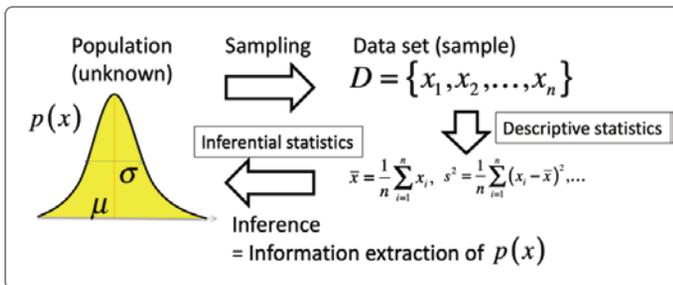
近年、物質分野において、物性の改善、実験条件の最適化などに機械学習が利用されてきています。本講義では、マテリアルズインフォマティクスのために必要な統計・機械学習分野の基礎的な手法を理解し、実装するための講義および演習を行います。本講義のねらいは、統計・機械学習分野の基礎的な手法を理解・実装でき、またそれを自分の研究のデータに適用できるようになることです。無機・有機・プロセス等幅広い分野を専門とする受講者が集まることを想定し、特定の物質系に特化した講義にはせず、一般的なデータ構造を対象として議論します。学習した内容は、自身の研究のデータ解析や物性の予測などに応用できるほか、プラクティクススクールで実際の企業の課題を解決する際の基礎にもなっています。

本年度はzoomを利用し、すべてオンラインで講義を行いました。授業は講義と演習をセットとし、演習では講義で学んだ内容に関する実装を通して理解を深めるように設計されています。演習はGoogle Colaboratoryを利用しており、学生は各自のPCのブラウザでコードを実行できます。初回は主にガイダンスとpythonの説明ですので、今回は第2回と第3回の講義・演習について概要を紹介します。

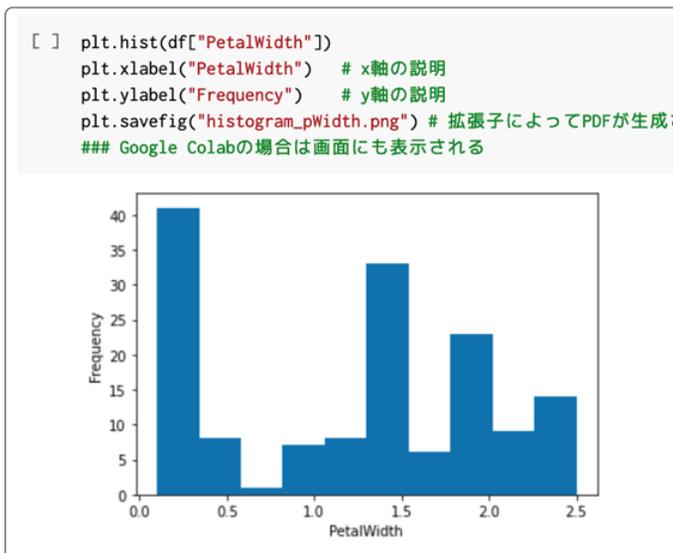
(授業担当:安尾 信明)

第2回 統計の基礎

第2回・統計の基礎では、機械学習の原理を理解するために用いる記述統計と推測統計について学びます。機械学習との直接の関係は少ないですが、実際の研究でのデータ解析で特に重要となる統計検定や信頼区間の概念についても触れます。演習では、以降の演習のためにpythonを用いて統計値を計算し、グラフを描画するためのライブラリについて学びます。



講義資料:推測統計の枠組みにおける母集団とデータセットの関係

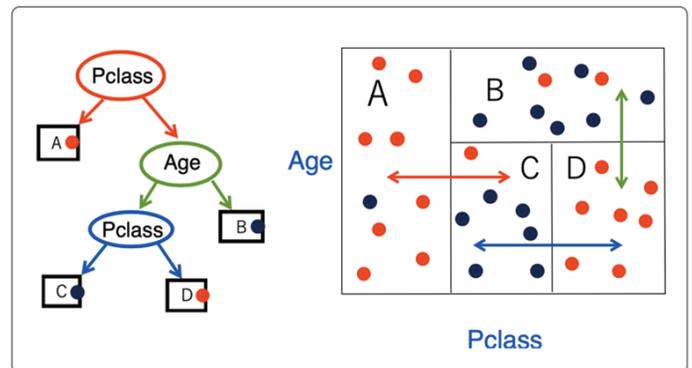


演習資料:データのグラフを描画するpythonスクリプト

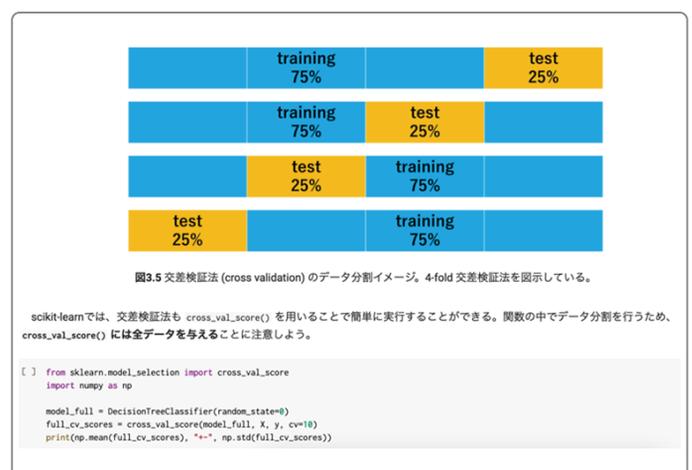
授業情報	科目名	マテリアルズインフォマティクス
	科目コード	TCM.A404
	開講クォーター	4Q
	授業担当教員	関嶋 政和、安尾 信明、 松下 雄一郎、川内 進
※本授業は、本学のDSAIプログラムの基盤データサイエンス(XCO.T487)と基盤データサイエンス演習(XCO.T488)を合わせたものと同一内容です。		

第3回 分類問題とモデル選択

第3回・分類問題とモデル選択では、分類問題の概要を説明し、決定木を構築するアルゴリズムを扱う他、決定木の深さを題材とし、交差検証法を用いたモデル選択について講義・演習します。現在のデータサイエンスで直接決定木を用いることは少ないかもしれませんが、これらの概念は深層学習などにおいても共通する概念です。



講義資料:決定木の例



演習資料:交差検証法

TAC-MI授業紹介「新産業創出最前線」

2020年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の実社会への応用や、データ科学をもとにした新産業分野の創出等、物質・情報科学と社会サービスを結びつける取り組み例を、企業、大学、研究機関の第一線で活躍する講師陣がオムニバス形式でオンラインでの講義を行いました。

本講義は、オープンセミナー「2020年度「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラム」として、学内教職員・学生・会員企業関係者向けにも公開されました。



第1回 先端情報技術の社会実装の取り組み

株式会社 PKSHA Technology 2020年12月18日(金)
代表取締役 上野山 勝也 13:30~15:00



ソフトウェア進化を概観、現在から未来の姿について説明。その中で人間とコンピュータとのインターフェースの重要性に着目。開発したソフトウェアの社会実装例について紹介。

第2回 オープンサイエンス政策が志向する、科学研究と成果公開・共有の変容

文部科学省 科学技術・学術政策研究所 2020年12月18日(金)
科学技術予測センター上席研究官 林 和弘 15:15~16:45



電子化、オープンアクセス化により学術情報流通が変革していく過程の中で、研究論文の査読とプレプリント公開の関係が変化していること、研究成果として論文だけでなく研究データの重要性が増しているだけでなく、科学の在り方そのものが変容していく潮流を紹介。

第3回 宇宙を人類の生活圏に ~史上初の民間月面探査への挑戦~

株式会社 ispace 2021年1月8日(金)
取締役&COO 中村 貴裕 13:30~15:00



2020年代の複数の月面探査計画を前に、地球-月の一体化社会の構築を目指して宇宙ビジネスが急拡大している。その中で、月へのペイロード輸送事業と月面データ事業のビジネスモデルを紹介。

第4回 AI創薬/マテリアルズ・インフォマティクス最前線 最新技術動向からビジネス動向まで

株式会社 Elix 2021年1月8日(金)
代表取締役CEO 結城 伸哉 15:15~16:45



創薬を取り巻く環境(市場の拡大、コストの増大)と、所望の機能からそれを可能とする化学構造を求めめる逆問題を、AIにより効率良く最適化して解くことが必須となっている状況を説明。

第5回 進化計算による問題解決

東京工業大学 情報理工学院 2021年1月15日(金)
准教授 小野 功 13:30~15:00



進化計算は教師データが不要というメリットがあり、評価関数が決定変数の式として陽に与えられないブラックボックス最適化や多目的最適化に強気に適用できることを紹介。

第6回 スーパーコンピュータを活用したマテリアルズ・インフォマティクス

理化学研究所 計算科学研究センター 2021年1月15日(金)
チームリーダー 中嶋 隆人 15:15~16:45



理化学研究所 計算科学研究センター(R-CCS)のスパコン「京」そして「富岳」の性能紹介とマテリアルズ・インフォマティクスの事例、汎用分子科学計算ソフトウェアNTChemの紹介。

第7回 特許制度・特許情報の基礎及び特許出願技術動向調査 -マテリアルズ・インフォマティクス-

特許庁 審査第三部 審査官 藤井 美穂 2021年1月15日(金)
特許庁 審査第三部 審査官 松村 真里 17:00~18:30



特許制度の概要と特許情報の活用方法の説明、令和元(2019)年度に実施されたマテリアルズ・インフォマティクスをテーマとした特許出願技術動向調査結果の紹介。

授業担当者からのコメント



物質・情報卓越教育院
教育委員会委員長
後藤 敬(理学院・教授)

「新産業創出最前線」は、産・官・学の第一線で活躍されている講師陣をお招きし、「物質×情報」科学と社会との結びつきについて各界の視点から解説いただく講義です。

講師の方々には、学生がいま学んでいるものの「先にあるもの」をご紹介いただくとともに、キャリアパスを考える際の多様なモデルを提示していただきました。また、今年度は学内公開の「物質×情報×新産業」フロンティアフォーラムとして開催することで、TAC-MIの活動を広く全学の皆様に体験していただくことができました。

受賞ニュース 関嶋 政和 准教授が令和2年度「情報化促進貢献個人等表彰」経済産業大臣賞を受賞



経済産業省の宗清 皇一 大臣政務官(左)から表彰状を授与される関嶋准教授

本教育院のプログラム担当で企画・実施委員会委員長の関嶋 政和 准教授(東京工業大学 情報理工学院)が経済産業省の令和2年度「情報化促進貢献個人等表彰」経済産業大臣賞を受賞しました。表彰式は11月30日に経済産業省で行われました。

関嶋 政和 准教授は、創薬標的蛋白質の阻害化合物探索において、従来行われてきたシミュレーションに機械学習を融合した「VisINet」を創薬基盤として構築することで従来の創薬手法に比べて大幅な効率化を実現しました。また、新型コロナウイルス感染症について、薬候補化合物が満たすべき特徴を表現するファーマコフォアを構築し、そのファーマコフォアが実際に薬候補化合物を検出可能であることの論文掲載を行うことで、情報技術を用いた治療薬探索に大きな貢献を果たしたことが高く評価され、今回の受賞となりました。

受賞ニュース HAO YINGQUANさんがFAIML 2020にてBest Student Paper Awardを受賞

TAC-MI登録学生のHAO YINGQUANさんが2020年9月16日~18日に開催された2020 2nd International Conference on Frontiers of Artificial Intelligence and Machine Learning (FAIML 2020)にてBest Student Paper Awardを受賞しました。

FAIML 2020はAIと機械学習技術の応用に関連する国際学会です。

HAO YINGQUANさんは、物質・情報卓越教育課程のカリキュラム「物質情報異分野研究スキル(ラボ・ローテーション)」の期間中、ラボ・ローテーションとして配属された研究室の西條 美紀教授、大橋 匠助教と応用化学系の大河内 美奈教授、田中 祐圭助教の指導のもと、深層ニューラルネットワークを用いて金ナノ粒子合成を制御できるバイオミネラルゼーションペプチド配列のアジャイル設計について研究し、その研究成果が評価され、今回の受賞となりました。



物質理工学院 応用化学系 応用化学コース
博士後期課程1年(受賞当時)
HAO YINGQUAN

企業アドバイザーからのメッセージ

日本電子株式会社



取締役兼専務執行役員

田澤 豊彦 様

—YOKOGUSHI—
共創・モノからコトへ、つなぐ化



日本電子は、1945年に電子顕微鏡の開発会社として発足し、2019年に創立70周年を迎えました。創業以来の経営理念である「創造と開発」を基本とし、科学の進歩と社会の発展に貢献することを最大の目標としています。

当社は電子顕微鏡をはじめとするナノテク分野で世界トップレベルの先端装置を開発している理化学機器メーカーであり、基礎研究からものづくりまで多くの研究開発を支える装置を提供しております。国内外の先端技術の研究開発に携わる方々から信頼を頂き、各方面の研究機関や民間企業の製造部門などに装置を活用頂いています。計測機器は科学技術や製造業の発展に欠かせない重要なツールであり、研究開発を支える基盤技術となっています。

また、当社は分析機器・理化学機器の中でも、“原子を観る”電子顕微鏡や核磁気共鳴装置などのハイエンド機器を持つという強みを生かした「YOKOGUSHI」戦略を展開しております。当社が持つ様々な製品を横断的に活用することにより、ますます高度化し多様化する研究開発のニーズに的確にお応えできると確信しております。

理化学機器メーカーとして、計測技術とマテリアルズ・インフォマティクスとの融合が今後ますます重要になることを認識し、物質・情報卓越教育院の皆様との交流や議論を通じ、新たな計測技術を共創できればと考えております。

学生の皆様には、物質・情報に関する高度な専門性を持つ複素人材として、日本の産業の発展に貢献していただくことを期待しております。バイタリティーに溢れ、チャレンジ精神旺盛な皆様との交流を楽しみにしています。

会員企業制度

物質・情報卓越教育院では「会員企業制度」というユニークな制度を導入しています。会員企業からの意見を活動に反映させて頂くと共に、メンター役をお願いすることにより、本教育院の登録学生の社会的視野を広め、複素人材としての成長に役立てます。一方、会員企業にとっては、研究者の方々が本教育院での講義、演習を受講できる機会ができ、物質・情報の分野での人材育成を進めることができます。

会員企業一覧(2021年3月1日現在)

- AGC株式会社 / 旭化成株式会社 / ENEOS株式会社 / 浜松ホトニクス株式会社 / JFEスチール株式会社 / JX金属株式会社 / 株式会社カネカ / LG Japan Lab株式会社 / マツダ株式会社 / 三菱ケミカル株式会社 / 三菱ガス化学株式会社 / 長瀬産業株式会社 / 日本電子株式会社 / 日本ゼオン株式会社 / 日産自動車株式会社 / パナソニック株式会社 / 昭和電工株式会社 / 昭和電工マテリアルズ株式会社 / 住友電気工業株式会社 / 住友化学株式会社 / TDK株式会社 / 株式会社東芝 / 東ソー株式会社 / 東洋製罐グループホールディングス株式会社 / トヨタ自動車株式会社 (ローマ字アルファベット順) (引き続き、参加会員企業を募集しています。)

