

第116回(2025年度第2回) 産研テクノサロン

産研テクノサロンは、大阪大学 産業科学研究所と産業界との交流の場として、産研における研究成果を中心とした講演会と意見交換、懇親を図ることを目的として毎回多様なテーマで例会を開催しています。

データ科学と材料科学のクロスオーバー

データサイエンスの発展により、材料開発を取り巻く環境は大きく変貌しつつあります。材料開発、材料解析の現場においては、人工知能の提案に対してどのように対応していくかの判断を迫られる局面が増えており、これは同時にセレンディピティの好機となっております。今回のテクノサロンでは人工知能、マテリアルインフォマティクス、最先端計測、解析技術開発における新進気鋭の先生方に講演をいただきます。データ科学と材料科学のクロスオーバーのもたらす未来について思いをはせる機会となれば幸いです。

[開催日]

2025年10月14日(火) 13:30~16:45 講演会参加費無料
※意見交換会参加費:3,000円(産研協会テクノサロン会員:無料)

ハイブリッド開催
(阪大産研+ZOOM)

[開催場所]

大阪大学 産業科学研究所 管理棟2階SANKEN CReA(80名まで) + Zoom(90名まで)

[プログラム]

13:30-13:40 開会挨拶

大阪大学 産業科学研究所 戦略室 特任教授 小倉 基次

13:40-14:20 講演①

「有機半導体のためのデータ科学 機械学習を活用する励起子輸送シミュレーション」

京都大学 高等研究院 物質—細胞統合システム拠点 准教授 Packwood Daniel

14:20-15:00 講演②

「量子ビームとデータ科学で拓く材料構造解析の実際」

株式会社日産アーク テクニカルダイレクター 伊藤 孝憲

15:00-15:15 休憩・講師との名刺交換会

15:15-15:55 講演③

「画像分類モデルの解釈性向上のための明瞭なヒートマップの生成手法」

京都大学大学院 情報学研究科 通信情報システムコース 准教授 末永 幸平

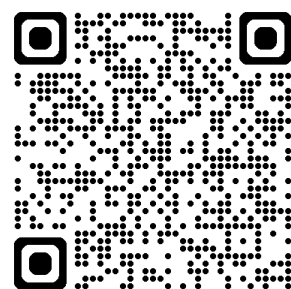
15:55-16:00 閉会挨拶

大阪大学 産業科学研究所 戦略室 特任教授 小倉 基次

16:00-16:45 産業科学研究所 坂本研究室 見学

17:00-18:30 意見交換会 SANKEN CReA

※参加費:3,000円 / 産研協会テクノサロン会員:無料(企業会員様は1社2名様まで)



お申込みはこちらから!

申込フォーム(Google) <https://forms.gle/m6UiCDjqUez5sfqs7>

Webサイト: [https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/air/techno salon/techno salon.html](https://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/air/techno%20salon/techno%20salon.html)

申し込み・問い合わせ 大阪大学 産業科学研究所 戦略室

(TEL/FAX:06-6879-8448/E-mail:air-office@sanken.osaka-u.ac.jp)

主催:大阪大学 産業科学研究所 / 一般財団法人大阪大学産業科学研究協会(阪大産研協会) /

人と知と物質で未来を創るクロスオーバーアライアンス:物質・デバイス領域共同研究拠点

共催:大阪大学 産業科学研究所 産業科学AIセンター / 大阪大学 産業科学研究所 同窓会

後援:一般社団法人 日本電気計測器工業会

第116回（2025年度第2回）産研テクノサロン 「データ科学と材料科学のクロスオーバー」



13:40-14:20 講演① 京都大学 高等研究院 物質—細胞統合システム拠点
准教授 Packwood Daniel

有機半導体のためのデータ科学 機械学習を活用する励起子輸送シミュレーション

【講演概要】励起子はエネルギーを運ぶ準粒子であり光照射下において有機半導体内部で形成される。励起子輸送をコンピュータでシミュレーションするためには多くのパラメータを事前に計算する必要があり、特に分子間の励起子結合パラメータを、計算コストの高い第一原理計算(TDDFT)によって求める必要があることが大きなボトルネックとなっている。本講演ではデータ科学および機械学習を活用した励起子結合パラメータ計算の高速化に向けた研究の進展について紹介する。まず従来手法と比較して学習時間を大幅に短縮する機械学習アーキテクチャを紹介する。次に多様な分子系に対して汎化性能を有するグラフニューラルネットワーク(GNNモデルを紹介する。このGNNは、幅広い分子群に対して励起子結合パラメータを高精度に予測し、TDDFT計算を行わずに信頼性の高い励起子輸送シミュレーションを可能にする。



14:20-15:00 講演② 株式会社日産アーク
テクニカルダイレクター 伊藤 孝憲

量子ビームとデータ科学で拓く材料構造解析の実際

【講演概要】近年材料に求められる特性は高度化し構造解析はかつてない複雑さを増している。この課題を乗り越える鍵として、放射光や中性子といった先端プローブが不可欠となりつつある。一方でそこから得られるデータは膨大で複雑を極め従来の解析手法では本質に迫りきれない。本講演では放射光・中性子計測とデータ科学の融合によって定量的な構造情報を抽出し、材料設計につなげる最新事例を紹介する。



15:15-15:55 講演③ 京都大学 大学院情報学研究科 通信情報システムコース
准教授 末永 幸平

画像分類モデルの解釈性向上のための明瞭なヒートマップの生成手法

【講演概要】機械学習モデルは内部動作が見えにくい「ブラックボックス」であることが大きな課題です。この課題に対し、画像分類モデルでは、各画素が結果にどれほど寄与したかを示すヒートマップを生成する手法が提案されています。しかし従来手法で得られるヒートマップは、ぼやけていて読み取りにくい場合が少なくありません。本講演では、既存のどの方法で生成されたヒートマップでもさらに洗練し、鮮明な可視化を得る手法を紹介します。我々の手法では、与えられたヒートマップを事前分布とみなし、ガウス過程回帰を適用します。ガウス過程回帰により画素ごとの重要度推定を反復的に更新することで、不明瞭なヒートマップから出発して明確なヒートマップを得ることが可能となります。

「参加申込書」 第116回(2025年度第2回)産研テクノサロン 2025年10月14日(火) 締切:2025年10月7日

ふりがな 参加者氏名	TEL		
	FAX		
会社・団体名	希望参加方式	いずれかに○をお付けください 会場での聴講 Webでの聴講	
ご所属・役職等	E-mail		
産研テクノサロン	会員	非会員	意見交換会 参加 不参加

* ご記入いただいた情報は、各種連絡・情報提供のために利用することをはじめ、講師には参加者名簿として開示することがあります。