

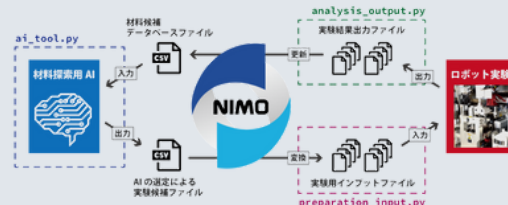
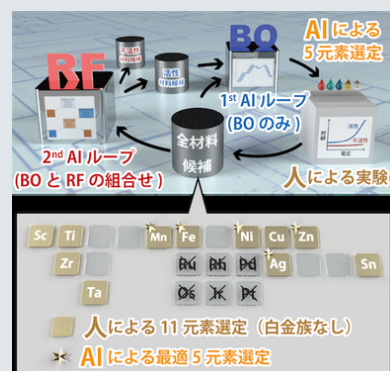
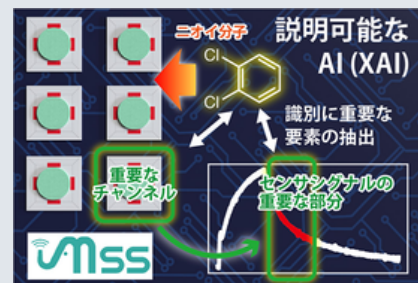
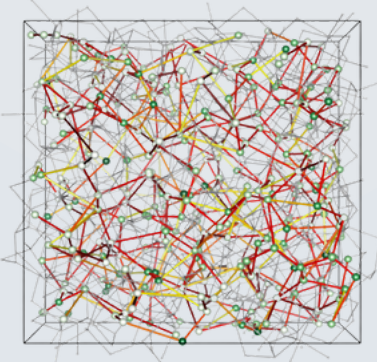
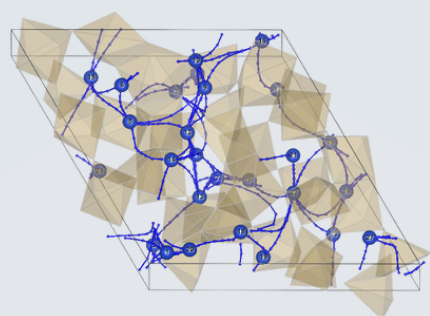
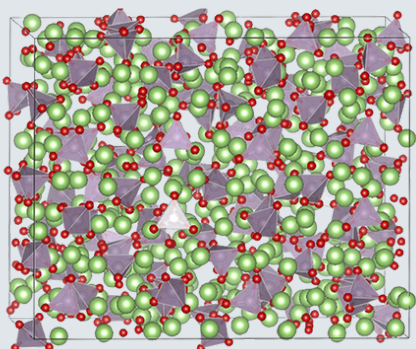
材料科学連続セミナー

対面
＋
オンライン

化学材料 **第1** シリーズ

データ駆動科学のための
第一原理計算と機械学習の応用

データ科学とAIによる
次世代センシング・材料探索



第1回
安藤 康伸 先生
東京科学大学 准教授



第2回
田村 亮 先生
物質・材料研究機構 グループリーダー
／東京大学 講師



2026. **1/7** [水]
13:30-18:15 ※休憩あり

2026. **1/21** [水]
13:30-18:15 ※休憩あり

開催方法 対面・オンライン
会場 早稲田大学 各務記念材料技術研究所（東京都新宿区西早稲田2-8-26）
対象 一般
参加費 無料
申込方法 右記のURLよりお申し込みください。 <https://www.waseda.jp/fsci/zaiken/news/9947>



お問合せ

早稲田大学 各務記念材料技術研究所 環境整合材料基盤技術共同研究拠点
zaikenjointjimu@list.waseda.jp

データ科学と材料科学

本セミナーではデータ科学と材料科学の融合領域について解説します。材料科学は熱力学、電磁気学、統計力学、量子力学などを基礎として 20 世紀に長足の進歩を遂げました。21 世紀に入り、計算機の進歩によりデータ科学に基づく方法論が現実に応用可能となり、材料科学の発展を加速しています。機械学習による性能予測や、Chatgpt を始めとする生成 AI を用いた材料設計など、新しい材料科学の取り組みは枚挙に暇がありません。セミナーでは、具体的な材料開発の例も交えながら、データ科学の手法が材料科学にどのように役立つかを示していきます。

2026.

1/7 [水]
13:30-18:15

※休憩あり

データ駆動科学のための第一原理計算と機械学習の応用

安藤 康伸 先生（東京科学大学 准教授）

第1回は材料研究におけるデータ駆動科学の基礎から計算シミュレーションデータを機械学習に活用するまでを講義します。第1部では、材料科学におけるデータ駆動型アプローチの考え方をデータ生成・蓄積・活用の観点からその全体像を解説します。第2部では、第一原理計算やDFTに基づく界面モデリングを例に、データ駆動科学で重要な役割を果たす計算材料科学がどのように貢献しているかを紹介し、第3部では、機械学習ポテンシャルの基礎概念と構築手順を解説し、従来計算との違いや利点を示しつつ、大規模・長時間スケール計算への応用可能性を議論します。

全体を通して、第一原理計算と機械学習を組み合わせたデータ駆動科学の実践的活用のイメージを深め、今後の材料開発への応用展開について考察する機会とします。

13:30 - 14:45 第1部 データ駆動科学
15:15 - 16:30 第2部 DFT計算と界面モデリング
17:00 - 18:15 第3部 機械学習ポテンシャル概論



【経歴】 2003年04月 東京大学教養学部理科一類 入学。
2012年03月 東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻博士後期課程修了。博士(理学)。
2012年04月～2013年04月 国立研究開発法人 産業技術研究所 産総研特別研究員。
2013年05月～2016年03月 東京大学大学院 工学系研究科マテリアル工学専攻 助教。
2016年04月～2018年09月 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 研究員。
2018年10月～2024年03月 同所 主任研究員。
2022年07月～ 早稲田大学 先進理工学部 客員准教授
2024年04月～2024年09月 東京工業大学 科学技術創成研究院 化学生命科学研究所 准教授
2024年10月～ 東京科学大学 総合研究院 化学生命科学研究所 准教授(現職)

2026.

1/21 [水]
13:30-18:15

※休憩あり

データ科学とAIによる次世代センシング・材料探索

田村 亮 先生（物質・材料研究機構 グループリーダー／東京大学 講師）

第2回では、データ科学とAIがもたらす材料研究開発の革新に焦点を当てます。データ駆動型手法と最適化技術を活用することで、センシングと材料開発の領域における課題を自律的かつ高効率に解決する最新の応用について紹介します。第1部では、データの力を最大限に活用するデータ駆動型アプローチを嗅覚センシングの分野に応用し、次世代センシング技術の新しい可能性について解説します。第2部では、実験やシミュレーションに時間とコストがかかる「ブラックボックス」問題を最適化するための基盤技術として、ベイズ最適化をはじめとするブラックボックス最適化の基礎理論から、実応用事例までを深く掘り下げます。そして第3部では、これらデータ科学と最適化技術を結集させ、ロボティクスとAIを融合した自動・自律材料探索の最前線を紹介し、

13:30 - 14:45 第1部 データ駆動型アプローチで拓く嗅覚センシングの新展開
15:15 - 16:30 第2部 ベイズ最適化をはじめとするブラックボックス最適化の基礎と応用
17:00 - 18:15 第3部 ロボティクスとAIが拓く自動・自律材料探索の最前線



【経歴】

1984年生。2012年3月東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士(理学)。
2012年4月より物質・材料研究機構 ICYS-SENGEN 研究員、研究員、主任研究員、主幹研究員を経て、2023年4月より現職。
2021年日本物理学会若手奨励賞、2023年文部科学大臣表彰若手科学者賞受賞。
専門分野：マテリアルズ・インフォマティクス。