

2019 年第 66 回 応用物理学会春季学術講演会
合同セッション N「インフォマティクス応用」開催報告

合同セッション N プログラム編集委員代表
理化学研究所 沓掛健太郎

本合同セッション「インフォマティクス応用」は、今回の学術講演会から新しく創設されたセッションである。本報告では、本セッション創設の経緯と趣旨を述べたのち、セッション当日の様子や講演トピックをまとめる。

1. 創設の経緯と趣旨

近年の AI ブームは応用物理学分野においても例外ではなく、情報科学（インフォマティクス）を援用した新しい研究が数多く創出され、目覚ましい成果があげられ始めている。図 1 は、応用物理学会の学術講演会で発表された講演のうち、インフォマティクスに関連するキーワードに該当した講演の件数の推移である。2015 年春季の講演会では該当する講演の数は 0 件であったが、以降、講演件数は右肩上がりが増加し、前回秋の講演会では合計 55 件、今回春の講演会では合計 77 件の講演がなされた。このことから、インフォマティクス応用に関する研究は、応用物理学会において大きなトピックとなっていることがわかる。

図 2 は、前回秋の講演会においてなされたインフォマティクス関連講演について、大分類ごとの件数を調べたグラフである。講演件数が突出している大分類はなく、非常に広い分野にわたってインフォマティクス関連の研究が発表されていることが分かる。また各大分類の通常セッションとは別に、シンポジウムでの講演件数も多く、シンポジウムが応用物理学会のインフォマティクス関連研究の学術交流において重要な役割を果たしてきたことが示唆される。

このような状況において、次の 2 つの点からインフォマティクス応用についての常設セッションを望む声が高まっていた。

1) インフォマティクスの観点からの議論の深まり：インフォマティクス関連の講演は非常に広い分野でなされているが、このことは裏を返すと一つのセッションあたりの関連講演が少ないことを意味する。そこで、関連講演が集まってインフォマティクスの観点からより深い議論ができる場が求められていた。

2) ボトムアップ型の常設セッション：これまで応用物理学会の学術講演会では、シンポジウムがインフォマティクス関連講演の大きな場となっていたが、シンポジウムはテーマを定めた招待講演が中心のいわゆるトップダウン型の講演会である。シンポジウムでは一般公演も受け付けられているが、現状で投稿の敷居は高く、テーマに縛られず自由に投稿可能なボトムアップ型の常設セッションの開設が望まれていた。

以上の背景のもと、応用物理学会の関連分野のプログラム編集委員が中心となって、合同

セッション N「インフォマティクス応用」が開設された。通常、合同セッションは関連する中分類同士の合同によって開設されるが、本セッションのトピックは上で述べたように非常に広い分野にまたがっているため、次の大分類が連携したセッションとして開設された。連携大分類：1 応用物理一般、3 光・フォトンクス、6 薄膜・表面、9 応用物性、12 有機分子・バイオエレクトロニクス、15 結晶工学。また本合同セッションのプログラム編集委員は、各大分類のプログラム編集委員が兼任で務める形でスタートした。将来的には、本セッションと関連する大分類との間で情報共有を進め、相互に講演を紹介・推薦するなど、本合同セッションが応用物理学会の中でインフォマティクス関連のハブセッションとなることを目指していく。

2. セッション報告

3月9～11日にかけて合同セッション N「インフォマティクス応用」が開催された。本セッションは今回が第1回目ということもあり投稿件数が心配されたが、口頭35件、ポスター6件の合計41件の投稿をいただき、盛況に開催された。以下に講演トピックを概観する。

9日前半は、いわゆるマテリアルズインフォマティクスと呼ばれる機械学習を活用した材料探索に関する講演がなされた。今日、機械学習は新材料探索の様々なフェーズで活用されており、本セッションにおいても、理論計算における原子間ポテンシャル近似・物性予測および、それらの結果に基づく材料合成などが報告された。また、機械学習のための材料データベース構築に関する研究も活発に進められており、そのためのプラットフォームやツール作成、論文のキーワード自動抽出・分類技術が紹介された。

9日後半は、まず、シミュレーションの機械学習に関する研究が報告された。熱流体シミュレーション結果を機械学習することで、シミュレーション結果を高速に予測するエミュレータを作成する研究が紹介された。さらにその手法を応用した条件や計測位置の最適化、部材の熱伝導率予測が報告された。また、放射光施設を利用した X 線回折への機械学習活用についての講演が複数なされ、回折パターンからの結晶構造予測やパターン分類、ベイズ最適化による効率的な測定が報告された。

10日午前は、機械学習の様々な応用が議論された。応用先として、インピーダンススペクトル、バイオセンサ、フォトニック結晶、結晶研削、大気腐食、色彩センサ、レーザカオスなど非常に多様な分野におけるモデル構築や最適化が報告された。

11日午前にはポスターセッションが開催された。パーシステントホモロジーを活用した磁区構造解析や鉄鋼材料組織が報告された。

3日間のセッションを通して、口頭セッションは常時立ち見が出るほど盛況であり、ポスターセッションにも多くの方が足を運び、この分野の注目度の高さが伺えた。また、各種センシング技術との融合やシミュレーション結果の機械学習など、応物ならではの研究も多く報告され、応用物理学分野においてもインフォマティクス応用の研究はますます発展していくと予想される。この盛り上がりに応えられるように、プログラム編集委員一同、本合

同セッションの円滑な運営および時節を得た企画に務める所存である。本合同セッションへのご意見・要望などをプログラム編集委員にお寄せいただければ幸いである。

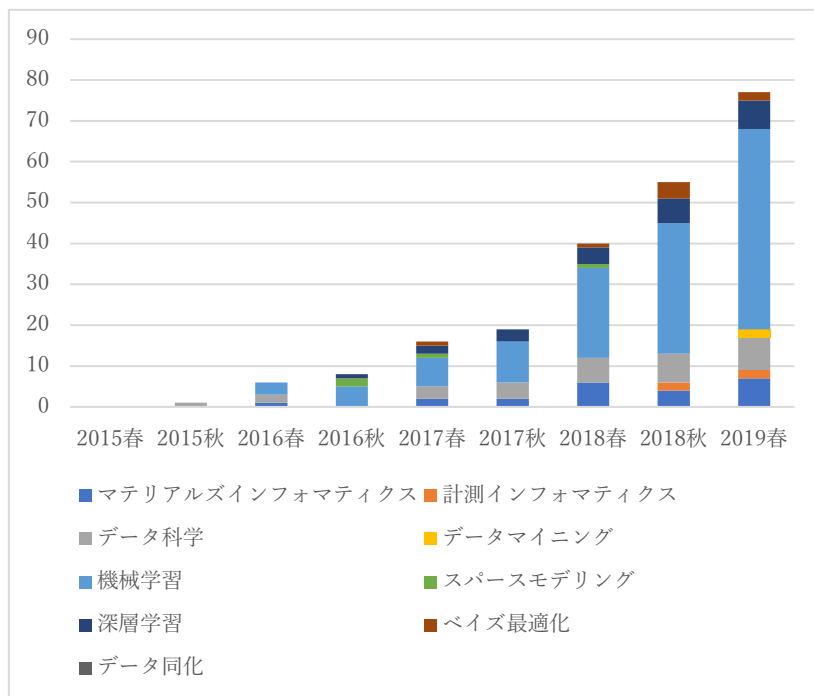


図1 応用物理学会学術講演会におけるインフォマティクス関連講演件数の推移

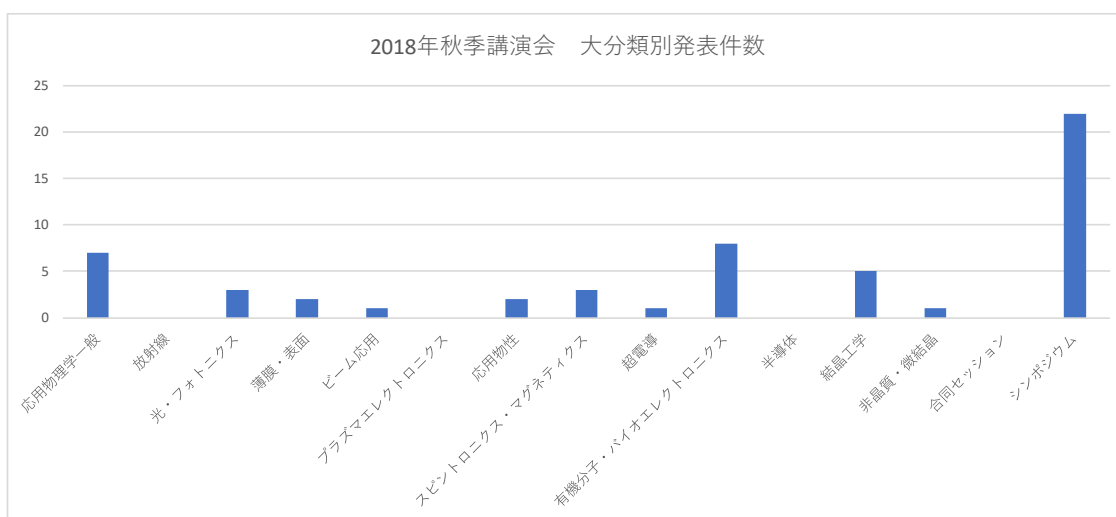


図2 2018 秋季学術講演会におけるインフォマティクス関連講演の分野別発表件数