産学それぞれの立場におけるMI技術活用

(MI-6株式会社¹) 入江 満¹ Applications of materials informatics from industrial and academic perspectives (¹MI-6 Ltd.) Mitsuru Irie ¹

Although the use of materials informatics (MI) is accelerating in both industry and academia, there is a gap in the number of published cases and the amount of information available. In other words, while there are many relatively detailed reports on cases of academic research and government-sponsored projects, there are few reports on industrial applications, making it difficult to grasp the actual situation from the publicly available information.

Through our experience of MI implementation with various chemical companies, we have felt the gap between academic advanced technologies and MI technologies that lead to industrial success. In this presentation, we would like to deepen our understanding of the current status and prospects of data-driven research by comparing and discussing MI technologies used in industry and academia.

Keywords: Materials Informatics, Bayesian Optimization, Automated Molecular Design, Computational Chemistry, Design of Experiment

マテリアルインフォマティクス(MI)の活用は産学ともに加速しているが、公開されている事例数と情報量にギャップがある。すなわち、学術研究や国主導のプロジェクトでは比較的詳細な事例報告が多いものの、産業界での活用事例報告は少なく、公開されている情報からは実態やノウハウを把握することが困難である。

弊社では、様々な研究機関や化学メーカーとのMI実践を通じて、学術的な先端技術だけでなく産業で求められるMI技術の知見も蓄積してきた。本発表では、産学で活用されているMI技術を比較・検討することで、データ駆動型研究の現状と展望についての理解を深めたい。