

マテリアルズインフォマティクスの方法論

Methodology of Materials Informatics

物材機構 ○小出康夫

NIMS ○Yasuo Koide

E-mail: koide.yasuo@nims.go.jp

近年、物質・材料開発研究において、これまでの勘と経験を基盤とする手法から、特定の機能を実現するためにデータ科学を駆使する情報統合型物質・材料研究が始まっている。これはマテリアルズインフォマティクス (MI) と呼ばれている。この新しい分野を振興する目的で2015年7月から文科省事業として情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I) がNIMSを拠点として進められている¹⁾。この事業では信頼性の高い物質・材料データベースの利便性を高め、データ解析および機会学習手法を通して解析ツールを開発するとともに、環境エネルギー関連分野の蓄電池材料・磁性材料・伝熱制御材料の開発に結びつける取り組みを開始している。同時に、産官学の活動の場としてMI²Iコンソーシアムを設立してこの分野の振興と技術の普及を行っている。MI的手法は物質・材料開発の期間を大幅に短縮し、更には従来法では見つけられなかった最適な物質・材料を見出すことが期待される。本講演では、NIMSにおいて進めるMIを利用する物質・材料研究の方法論の概要を解説する。

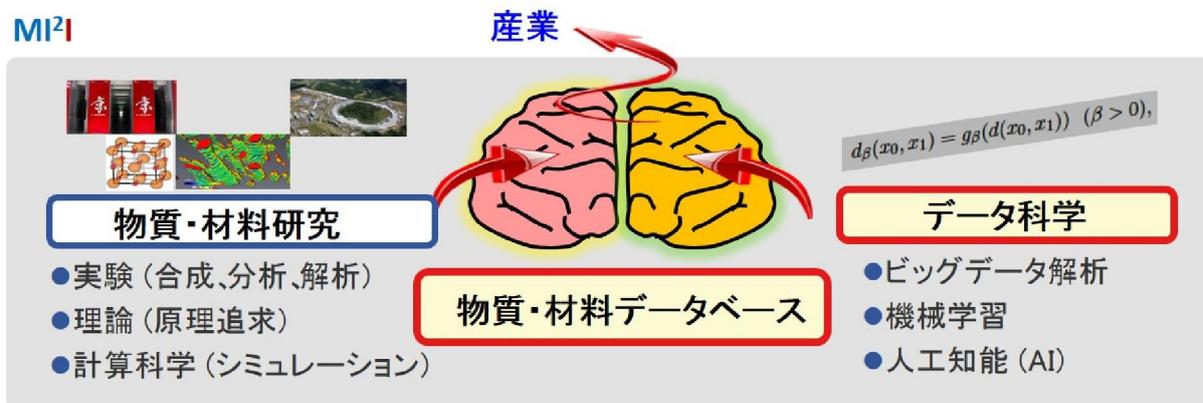


図1. マテリアルズインフォマティクスを利用する物質・材料開発研究の概念¹⁾

【参考】 1) ウェブページ, <http://www.nims.go.jp/MII-I/>