

科学者を拡張するマテリアルズ・インフォマティクス

Scientists Augmentation

物材研¹, 東大 BAI 研² °岩崎 悠真^{1,2}

NIMS¹, Univ. of Tokyo BAI Lab.², °Yuma Iwasaki¹

E-mail: IWASAKI.Yuma@nims.go.jp

近年、データ駆動型材料開発が大きく注目されている。この技術領域を細かく分類すると、新材料・物性値などをデータ駆動で予測する『マテリアルズ・インフォマティクス』、効率的に材料を合成する『プロセス・インフォマティクス』、効率的に計測・解析を行う『計測インフォマティクス』、材料科学の理解を目的とした『物性（物理）インフォマティクス』に分けて考えることができる。本講演の前半は、この4領域について俯瞰し、議論する。

本講演の後半は、『科学者を拡張するマテリアルズ・インフォマティクス』について議論する。これは、AI・機械学習などのデジタルテクノロジーにより人間を拡張する『Human Augmentation』の材料科学者バージョンである。ここでは、自律材料探索 AI を用いた『科学者の数の拡張』と、説明可能 AI を用いた『科学者の能力の拡張』に焦点を当て技術を紹介し、議論する。

謝辞

本研究は JST-CREST『未踏探索空間における革新的物質の開発（研究総括：北川宏）』における研究課題『科学者の能力を拡張する階層的自律探索手法による新材料の創製（研究代表：岩崎悠真）』の支援を受けたものである