

マテリアルズ・インフォマティクスの現状と展望

Outlook and current status of materials informatics

武市憲典

(株)豊田中央研究所 マテリアルズインフォマティクス研究領域

機械学習を用いたデータ駆動型の材料開発、すなわちマテリアルズインフォマティクス(MI)が一つの学際領域を創り出し近年目覚ましい発展を遂げているが、一方で、これを用いて開発された材料が世の中を席卷しているかといえば、そのような例は未だないに等しい。果たして MI は真に役立つ技術なのか？MI 研究はどこまで進んでいて、また、そのボトルネックは何か？技術的、戦略的な側面から分析する。

別の視点では、アメリカでの創成/発展を遂げてきたMIはいま、アジア、特に中国の参戦によってその地勢図が大きく変化しようとしている。AIを取り巻く思想的背景の違いなどを考察しながら、それぞれの強みと戦略を考察する。そして日本における MI 研究開発の状況と展望について概観する。

最後に、MI は材料開発の構造を一変させるポテンシャルを秘めているが、その意義は産業界において特に大きい。単なる工期短縮やコストダウンに留まらず、循環型社会の実現に向けて産業界が果たすべき役割と、そのために必要な MI の位置づけについての期待と責務について議論する。