

# 材料組み合わせ最適化マテリアルズ・インフォマティクス

中島 隆夫

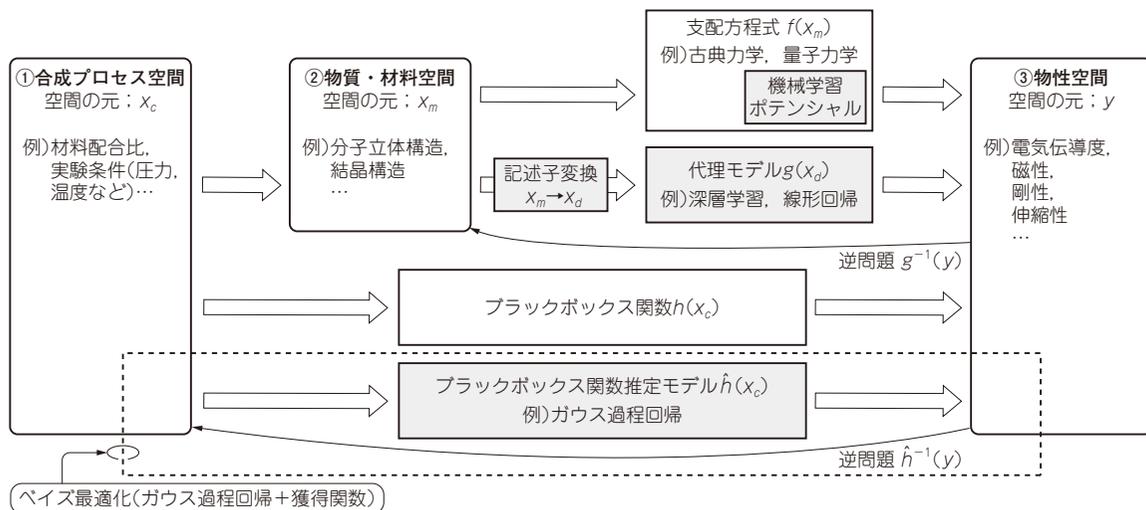


図1 本章で解説するベイズ最適化の範囲

本稿では、近年注目されている「マテリアルズ・インフォマティクス」を題材に、どのようにデータ・サイエンスが活用されているのかを見ていきます。

## ● この章で体験すること

マテリアルズ・インフォマティクスを説明した後、その要素技術の1つ「ベイズ最適化」をPythonで打ちながら理解してもらいます(図1)。

### マテリアルズ・インフォマティクスとは

#### ● 素材と情報科学を組み合わせたもの、2011年から

マテリアルズ・インフォマティクスとは、文字通りマテリアル(物質・素材)とインフォマティクス(情報科学)を組み合わせた造語です。

いつ誰が言い出したのか定かではありませんが、その火付け役となったのは2011年に米国でスタートした国家プロジェクト「Materials Genome Initiative」と言われています。新しい機能性材料の探索から実用化までのリード・タイムを情報技術の力で半分にする

という超意欲的な試みで、5億ドルの巨費が投じられて各種計算モデルやデータベースが整備されました。

「より早く(開発する)」がメインのスローガンでしたが、それと同時に「より高品質(高機能)」に「より低コストで」という要請とも表裏一体ですので、IT業界でよく言われるQCD(Quality, Cost, Delivery)をいっぺんに底上げする試みと捉えていただくと分かりやすいと思います。

#### ● 材料開発は日本のお家芸、遅れをとるわけにはいかない

その後、先進各国にその流れは広がり、5年ほど前から国の研究機関(物質・材料研究機構や産業技術総合研究所)を中心に日本版のインフラ整備が始まりました<sup>注1</sup>。もともとわが国の材料開発産業は長年にわたって世界をリードしてきたので、ここで遅れをとるわけにはいきません。国の重要な研究開発分野に位置付けられました。

#### ● その活用方法は民間に委ねられた

しかし、国はあくまで共通基盤や基礎科学としての

注1: <https://www.nims.go.jp/MII-I/>