

# 巻頭言

## マテリアルズインフォマティクスは 研究の仕方のフィロソフィーである



船津 公人

2011年にマテリアルズインフォマティクスの大波がアメリカから押し寄せて12年経とうとしている。その大波に日本の産官学が大きく揺れ、データから生み出される様々な価値に気付き始めたきっかけである。ただ、その時に多く聞かれたのは「研究の効率化」、「開発の効率化」に繋がるという金銭面への注目であり、今もその意識は続いている。確かにマテリアルズインフォマティクスがもたらす材料探索の加速化は材料開発のスタイルを変えつつある。今後この流れが研究・開発のカルチャーとなることはあっても、最早後戻りすることはないであろう。

ここで強く意識しなければならないことは、マテリアルズインフォマティクスを支えているのは計測データだということである。それは原料の特性であり、合成された材料のスペクトルも含めた様々な特性でもある。更には材料の作り方を示すプロセスデータでもある。これらの計測データは材料設計のための方向性をもたらす。こうした枠組みが意識できたら、その枠組みの先にあるのは目的特性を満たす材料の自動探索である。ここでの自動化の推進力は例えばバイズ最適化である。データ駆動化学とロボティクスの融合。まさに計測 → 設計 → 合成は目的を持って繋がるデータの流れる姿である。何のための計測か、何のための設計か、設計を合成に繋げるにはどんなデータが求められるのか。こうしたことを考えることでこのサイクルを流れるデータの形が決まってくる。いわゆる材料開発の仮説をこの自動化に仕込んだことになる。この自動化によって、利用したデータの有効性に関する仮説も自動的に検証したことになる。しかしながら、大切なことはこの先に人は何を考えるかではないだろうか。自動化の姿の先にあるものは何か。

計測 → 設計 → 合成サイクルの姿を改めて図1に示した。このサイクルを流れるデータはこれで十分だろうか、探索範囲を広げるには何が必要か、特定の材料開発から分野の異なる材料への展開には、分野間を繋ぐ計測 → 設計 → 合成サイクルの3次元的な展開も必要になるだろう。分野融合のためのデータの形やその流れは、自動化の仕組みとは別に人が考えるべき仕組みと言える。

当たり前のことだが、材料設計にあたっては環境対策や社会的要請などから自ずとその制約の反映が求められる。そうした条件を先取りしながら、必要とされるデータを設計に反映させる意識も大切な課題である。そうした観点に立った時、マテリアルズインフォマティクスに何を解とし

Materials Informatics as Philosophy of Research Approach  
Kimito FUNATSU (正会員)

1983年3月 九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了理学博士

1984年3月 豊橋技術科学大学工学部物質工学系 助手

1992年4月 同上 知識情報工学系 助教授

2004年4月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授

2017年10月 奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター 研究ディレクター/教授(兼務)

2021年3月 東京大学定年退職(2021年6月 同大学名誉教授)

2021年4月 奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター センター長/特任教授

現在に至る

連絡先: 〒105-0004 東京都港区新橋1丁目12-9 新橋センターブレイス Business-Airport 新橋6F R615室(奈良先端大東京オフィス)

て期待するのか。研究や開発の効率化とは別の意識、つまりデータに語らせるには研究者の学術的・社会的視点からの価値観、つまり何のために何をしたいのかという見識が今まさに強く求められているのではないだろうか。

自動車、飛行機、そしてコンピュータの発明も人の能力を拡張したいとする意志の反映であり結果である。それを使うことで新しい多くの価値を生んできた。マテリアルズインフォマティクスは人のどのような能力の拡張と意思の反映なのであろうか。単に研究や開発の効率化を求めただけでは、恐らく新しい着想に帰着しサイエンスを発展させることには繋がらないと思われる。マテリアルズインフォマティクスというデータに語らせる道具を手にした今、それに何を語らせるかを深く考える時期に来ているのではないだろうか。マテリアルズインフォマティクスは人に現象の本質を洞察するフィロソフィーを問うている。

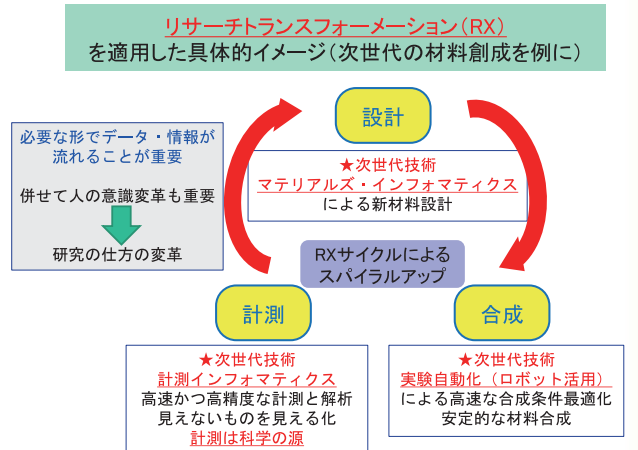


図1 リサーチトランスフォーメーション (RX) を適用した具体的イメージ(次世代の材料創成を例に)