

特集 製品開発を変えるマテリアルズ・インフォマティクス

現在、材料科学データベースの整備の進展やAI技術の発展、計算機の高性能化に伴い、統計分析やAIを活用した新しい材料開発手法であるマテリアルズ・インフォマティクスの活用が様々な企業で進み始めている。マテリアルズ・インフォマティクスの活用により材料開発の効率化が進み、かつ新しい材料の発見にも繋がっている。

現在においては、マテリアルズ・インフォマティクスの根幹技術の一つであるAIに関する研究は大学・研究機関で活発に進んでおり、予測モデルや化学構造の記述子など様々である。一方産業においては、その研究成果を基盤として、無機材料や有機材料など様々な材料分野において、従来の実験技術や計算技術と融合させて新規材料開発に取り組む企業が多くなってきている。マテリアルズ・インフォマティクスに取り組む大学・研究機関・企業、そしてそれに携わる技術者は今後、更に増えていくと思われる。本稿では、日本国内におけるマテリアルズ・インフォマティクスに関して最新の取り組み事例を紹介したい。

なお、本特集は連続企画であり次月号は材料開発の次のステージであるプロセス・インフォマティクスをテーマとして取り上げる予定である。 (編集担当：山田剛史・末宗咲子・柏井利之)†

超超プロジェクトの成果と材料設計プラットフォーム

三宅 隆

■大学の取り組み

物質科学のためのデータ同化

原嶋 庸介・藤井 幹也

誰もがマテリアルズインフォマティクスを実践的に活用できるようになった

金子 弘昌

材料研究におけるデータ資源不足の問題とデータ科学・計算科学の役割

吉田 亮

■企業の取り組み

創薬研究へのAI／機械学習の活用

山口 貴也・鷹羽 健一郎・大川 和史

熱硬化性ポリウレタンフィルムの開発におけるマテリアルズインフォマティクスの活用

中陳 巧勤・南 拓也

高分子材料の最適設計・評価支援ツールの開発

藤元 伸悦・小林 哲也

バイオマスイノベーションにおけるMIアプローチ

兼子 祐・森 太郎・大野 充

† Yamada, T. 令和3・4年度化工誌編集委員(6号特集主査)(株)ダイセルイノベーション・パーク 生産本部 生産技術センター シミュレーショングループ

Suemune, S. 令和4・5年度化工誌編集委員(同上)ライオン(株)プロセス技術研究所

Kashiwai, T. 令和4年度化工誌編集委員(同上)ライオン(株)信頼性保証部