

知っておきたいキーワード

マテリアルズ・インフォマティクス

岩崎 悠真[†][†] 国立研究開発法人物質・材料研究機構

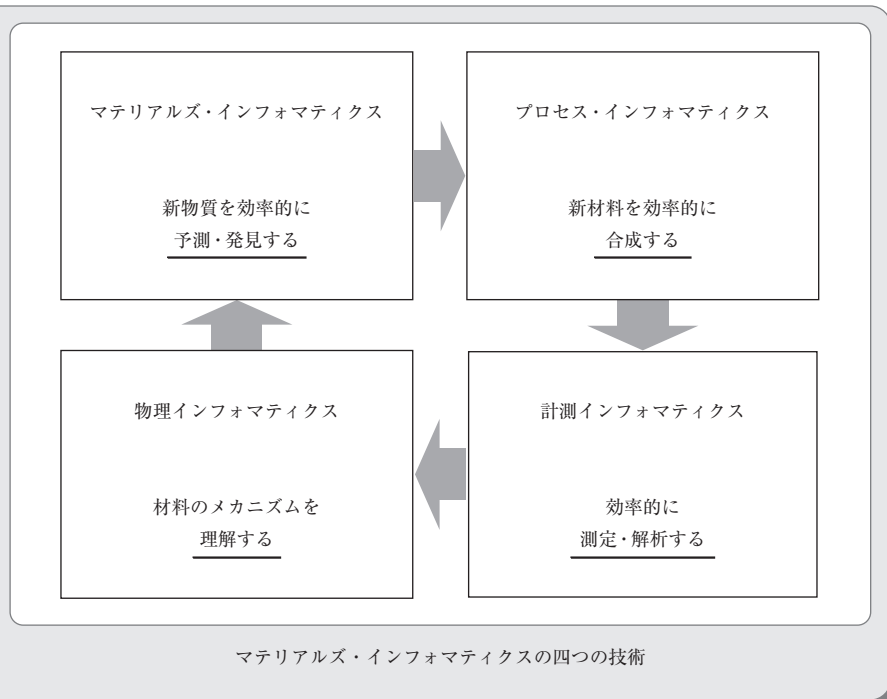
"Materials Informatics" by Yuma Iwasaki (National Institute for Materials Science, Tokyo)

キーワード：マテリアルズ・インフォマティクス，プロセス・インフォマティクス，計測・インフォマティクス，物理・インフォマティクス

まえがき

近年，物質・材料研究の分野でもデータ科学が使われ始めています^{1) 2)}。この分野は，新規物質をデータ科学で予測する「マテリアルズ・インフォマティクス」，材料合成プロセスの最適化・可視化を目的とする「プロセス・インフォマティクス」，材料計測を効率化する「計測・インフォマティクス」，材料メカニズムの理解を深める「物理・インフォマティクス」に分けて考えることができます（*ただし，上記四つの技術を全部含めて「マテリアルズ・インフォマティクス」と表現することもあります）。

本記事では，上記四つの技術を簡単に説明します。



マテリアルズ・インフォマティクス

データ科学を用いて新規物質を予測する「マテリアルズ・インフォマティクス」の研究は、2010年前半頃から活発に行われてきました。材料の物性値、結晶構造、組成などのデータから、さまざまな新規物質の組成・構造の予測が可能となっています。すでに書籍やレビュー論文も多数出版されているため、興味のある方は読んでみると良いでしょう^{3) 4)}。



マテリアルズ・インフォマティクス

プロセス・インフォマティクス

「マテリアルズ・インフォマティクス」で新規物質の組成・構造の情報がわかったら、次はそれを実際に合成したくなります。しかし、合成される材料およびその物性は、その時のプロセス条件（温度、圧力、時間、など）に大きく依存します。適切なプロセス条件を見つけるのは簡単なことではありません。このプロセス条件の最適化にデータ科学を活用する技術は「プロセス・インフォマティクス」と呼ばれています。例えば、データ科学とロボ

ティクスを組み合わせ、自律的に材料合成と計測を繰り返し、プロセス条件を最適化する技術が開発されています^{5) 6)}。



プロセス・インフォマティクス

計測・インフォマティクス

材料を合成したら、その物質の情報（物性値、結晶構造、など）を実験によって計測する必要があります。この計測をデータ科学によって効率的に行う技術を「計測・インフォマティクス」と呼びます。例えば、計測によって得られた大量のデータをデータ科学で高速に解析したり⁷⁾、計測プロセスそのものをデータ科学で効率化したりする技術が開発されています⁸⁾。



計測・インフォマティクス

物理・インフォマティクス

マテリアルズ・インフォマティクス、プロセス・インフォマティクス、計測・インフォマティクスの研究を進めていくと、物質に関する大量のデータが集まります。データ科学を駆使して、これらデータに隠されている新しい法則（物理）を探求する技術を「物理・インフォマティクス」と呼びます（※ただし、物理・インフォマティクスの守備範囲は非常に広く、材料物性だけでなく、宇宙物理、量子コンピューティング、超紐理論等の機械学習の応用も物理・インフォマティク

スと言われています）。最近では、わかりやすい日本語の書籍もいくつか登場

しており、盛り上がりつつある領域です^{9) 10)}。



物理・インフォマティクス

むすび

物質・材料研究の分野における四つのインフォマティクス技術について簡単に説明しました。本記事で紹介したように、物質・材料研究の分野でデー

タ科学は使われ始めていますが、その成熟度はまだまだです。（おそらく本記事の読者である）データ屋さんからすると当たり前のデータ科学が、物質・材料研究領域では使われていない、ということが多くあります。つま

り、データ屋さんが活躍するチャンスが多い領域です。本記事をきっかけにマテリアルズ・インフォマティクスの分野に飛び込むデータ屋さんが一人でもいてくれたら、筆者は幸いです。

(2022年12月14日受付)

参考文献

- 1) 岩崎悠真：“マテリアルズ・インフォマティクス材料開発のための機械学習超入門”，日刊工業新聞社（2019）
- 2) 岩崎悠真：“マテリアルズ・インフォマティクスⅡ機械学習を活用したマテリアルDX超入門”，日刊工業新聞社（2022）
- 3) R. Batra, et al: "Emerging materials intelligence ecosystems propelled by machine learning", Nat. Rev. Mater, 1-24 (2020)
- 4) R. Ramprasad, et al: "Machine learning in materials informatics: recent applications and prospects", npj Comput. Mater. 3, 54 (2017)
- 5) B. Burger, et al: "A mobile robotic chemist", Nature 583, 237-241 (2020)
- 6) C.W. Coley, et al: "A robotic platform for flow synthesis of organic compounds informed by AI planning", Science 365, eaax1566 (2019)
- 7) T. Matsumura, et al: "Spectrum adapted expectation-maximization algorithm for high-throughput peak shift analysis", Sci. Technol. Adv. Mater. 20:1, 733-745 (2019)
- 8) A.G. Kusne, et al: "On-the-fly closed-loop materials discovery via Bayesian active learning", Nat. Comm. 11, 5966 (2020)
- 9) 田中章詞ほか：“ディープラーニングと物理学”，講談社（2019）
- 10) 橋本幸士ほか：“物理学者機械学習を使う”，朝倉書店（2019）



いわきま ゆうま
岩崎 悠真

2011年，東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了。同年，NEC中央研究所入社。2015年，メリーランド大学客員研究員。2017年，JST-さきがけ「マテリアルズインフォ」研究員。2019年，産業技術総合研究所（AIST）特専研究員。2020年，社会人博士号取得。2021年，物質・材料研究機構（NIMS）主任研究員。同年，東京大学Beyond AI研究所客員研究員。同年，JST-CREST「未踏物質探索」研究代表者。