

## マテリアルズ・インフォマティクスに期待

### ◆世界各国でマテリアルズ・インフォマティクスの国家プロジェクト推進中

これまでの材料開発は実験とシミュレーションなどにより進められてきたが、物質・材料研究に関連する膨大なデータと計算科学を駆使することで材料開発の時間とコストを大幅に削減する手法として、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）が注目され、世界で多くの取り組みが進められている。米国ではMGIに2.5億ドルの予算が投じられているほか、欧州や中国、韓国でも同様なプロジェクト立ち上がっている。国内では物質・材料研究機構（NIMS）を拠点としたMI<sup>2</sup>Iのほか、内閣府主導のSIPでは革新的構造材料や、超超PJなどが進められている。

プロジェクト・概要	
米国	2011年立ち上げMGI (Material Genome Initiative) 2014年「Strategic Plan」公表：材料の発見を2倍に早める
欧州	2005年11カ国参加のTOPCOMBI 2009年MatSEWC (Materials Science and Engineering Expert Committee) 2015年NoMaD (Novel Materials Discovery) Laboratory AiiDa (Automated Interactive Infrastructure Database for Computational Science)
中国	2006～2020年国家中長期科学技術発展計画 China MGI (中国版MGI)
韓国	2013～2016年第3次素材・部品発展基本計画 2015年Creative Materials Discovery Project：10年計画
日本	2014年戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)「革新的構造材料」 2015年NIMS MI <sup>2</sup> I (“Material research by Information Integration” Initiative) 2016年経済産業省 超超PJ (超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト)

各種資料よりARC作成

### ◆機械学習によるMIで材料設計を迅速に行う

17年4月、NIMSと東京大学の研究チームは、熱流を制御する最適なナノ構造の物質の最適設計に成功した。全候補数の数%の構造を計算するだけで、材料科学と機械学習を融合したMIにより最適な構造を短期間で同定できるようになった。

自動車などの素材開発では、開発期間の大幅な短縮を図ろうとMI手法を取り入れる取り組みがある。トヨタは毎年秋に行う研究公募において、16年度はMI、材料の構造制御と機能発現・強化、半導体、ロボットの4領域で募集をした。MIの技術ニーズとしてはトヨタが提供する画像などの実験データや学术论文などをもとに、機械学習によるデータ解析を駆使した自動車用部品・材料開発の技術を掲げている。材料探索の競争力の武器となるMIは今後拡がりそうだ。 【米山久美子】