

科学技術の潮流

JST 研究開発戦略センター

③

MI が力示す

現在、科学は大きな変革点にある。これまでの科学の方法は実験・観測データを収集し、そこから共通的・普遍的な学理を抽出し、理論体系を打ち立てていくというものであった。多くの場合、理論体系は数学的な形で表現されるが、これをスーパーコンピュータ（スパコン）で数値的に解くことで定量的な議論ができるようになる。その結果、また新しい現象・分野が見いだされて、科学はスパイラル的に進化してきた。

発に大きな力を示しつつある。

物質科学においては基礎方程式が確立しているの、スパコンに

よる計算物性データが大量に得られる。このデータを利用して物質探索を行うことができ、転移学習という学習手法が効果的の研究もある。

しかし、近年、これまで蓄積されたデータを基に行うデータ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開

発に大きな力を示しつつある。データ駆動型科学が進展している。マテリアルズインフォマティクス（MI）と呼ばれる分野で、二次電池電解質や高熱伝導性高分子などの新材料の設計開



科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター 特任フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット） 伊藤 聡
 筑波大学大学院工学研究科博士課程修了。東芝、理化学研究所を経て、物質・材料研究機構。現在、JSTイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」プロジェクトリーダー。工学博士。

データ駆動型 物質科学・材料開発を変革

ロボティクス

材料データの生成・収集を高効率に行うた

データを得るにはコストがかかるため、実験技術を活用することが提案されている。ロボティクス技術の活用により、プロセスデータを精緻に取得できるの、これを解析するプロセスインフォマティクスによって合成工程を合理化できる。ただし、ロボティクス技術によって合成段階が省力化・短縮化されたとしても、得られた物質の特性評価に時間がかかっている。全体の研究開発効率が落ちてしまう。計測結果からノイズなどを除去し適切に物理量を抽出することは、これまで実験研究者の技量とスキルに依存していたが、ここにデータ科学を取り入れた計測インフォマティクスにも取り組まなければならない。（金曜日掲載）

