概要

データ活用による材料科学分野における「予測モデル」の進化は、開発の試行錯誤のサイクルを従来以上に効果的にし、ひいては材料開発の加速につながるものと期待される。ただし、そうしたデータ活用を行なうためにはデータの蓄積が不可欠である。この観点から、本稿では、データベースと計測・分析が、予測モデルと三位一体的に運用され、それらの間で効果的なデータ流通がなされながら、効率的な研究開発を遂行する「データ活用型材料研究」のコンセプトを議論する。低炭素社会構築のための技術課題からブレークダウンされた物質・材料の課題の解決に、このコンセプトに包含される様々な手法を適用することで、低炭素社会実現に向けた効率的な物質・材料研究開発が可能になる。

Summary

Evolution of "Prediction models" used in the area of materials science and engineering by data-utilization can make a typical try-and-error cycle in this area more effective than ever, while it would lead to speed-up of materials-development. Because it is necessary to accumulate data before such utilization, a concept of "material research with data-utilization" is discussed in this article, under which efficient R&D could be performed by data-circulation among prediction models of materials, databases and experimental measurements and analysis. By applying the methods included in this concept to solve problems on materials, which is derived as a part of breakdowns of technological issues on implementation of low-carbon society, we can find important issues to be solved and the solutions of problems and consequently establish low-carbon society in more efficient ways.