

マテリアルズインフォマティクス(MI)は、データ科学の手法によって材料を開発するという、材料科学における変革的アプローチを提唱する。ただし、社会的インパクトのある成果を示すには、実験・分析科学、計算化学、データ科学の研究者連携が不可欠であり、マテリアルサイエンス、情報科学、知識科学から成るJAISTは、その連携にかなう稀有な機関。マテリアルズインフォマティクス国際研究拠点には、ハイスループット実験、材料ビッグデータの谷池グループ、ハイスループット物性計算、ベイズ構造探索の本郷グループ、新規材料の探索と検証の西村グループ、チャミンクワングループ、説明可能なMI手法のダムグループの学内5研究室が集結する。

### MIは国際競争力を左右する 基盤技術

材料科学では従来、新規の材料や機能の開発に対し、研究者の経験や直観で仮説を立て、検証実験に時間と労力を費やしていました。MIでは、データ科学の方法論を適用し、目標性能に相関する特性は何か、その特性を発現するにはどのような材料をつくるべきかを学習機に予測させます。その狙いは、研究開発を加速させること、そして、膨大なデータに潜む系統性を抽出する、つまり、人間には把握できないような複雑な因果関係を見つけ出すことです。MIの確立が遅れることになれば、ものづくりの競争力には埋めがたい差が生まれるでしょう。

では、データ科学を駆使するには？ サンプル数が多く、特徴量が詳細であ

# 4 マテリアルズインフォマティクス 国際研究拠点

ビッグデータ自動生成とデータ科学の手法を駆使し、材料科学の新時代を拓く

エクセレントコア  
紹介

物質化学領域 谷池 俊明 教授



## 谷池 俊明

Taniike Toshiaki

東京大学 博士(理学)。2006年北陸先端科学技術大学院大学 助手(2007年より助教)、2013年より同准教授、2020年10月より現職。2020年4月よりマテリアルズインフォマティクス国際研究拠点長。専門は、マテリアルズインフォマティクス、ハイスループット材料実験、実験と計算化学の相互利用。



国内外の学生・研究員が集う研究室

### 有効データの集積と 研究者育成が課題

MIが日本で始動した当初、ものづくりの実績を鑑み、大きなデータが期待されていました。しかしながら実際には、論文などに蓄積されたデータは極めて少ないことが分かりました。その主な原因は、研究者それぞれが特定の材料系を研究対象とし、独自のプロセスや検証条件によって成果を残してきたことにあります。

データ駆動には、それを前提としたデータ収集が必須であり、MIの基盤構築には、実験・計算・分析によるデータの収集からデータ解析までを行う一貫体制が必要となります。現状、上流にあたるデータ生成から下流にあたるデータ解析までを設計できる研究者はほとんどいません。私たちの拠点では、研究室間の日常的な連携により、上流から下流までを設計でき、国際的、学際的環境で活躍できる若手研究者を育成したいと考えています。

### ものづくりのあり方を 根本的に変える

私たちの研究成果として、直近では、高

分子材料の長寿命化があります。プラスチックは材料の種類が多いことから分別にコストがかかり、リサイクルが困難という廃棄問題が生じています。私たちは打開の一策として、安定化剤による長寿命化を検討しました。安定化剤の有効な配合をハイスループット実験と機械学習などで探索し、5.5年間分のデータを50日間で取得、ポリプロピレンの寿命を約3.5倍に延長しました。

西村グループや他大学との共同研究では、触媒インフォマティクスを試みました。日に4000以上の触媒評価データを自動取得するハイスループット装置を設計し、3日で12000点以上のデータを取得、現在は6万点以上を取得できるようになっています。この触媒ビッグデータを機械学習などで分析し、メタンの酸化カップリング反応の収率を大幅に改善することに成功しています。

ダムグループとの共同研究では、グラフエン製造用の剥離剤を探索しました。グラフエンの工業的応用を促進するには、高効率なグラフエン製造プロセスが重要です。私たちは、グラフアイトを剥離剤中で超音波処理し、グラフエンを得るトップダウン的製造法に注目。2種以上の混合溶液を試作・評価し、グラフエン収率を高める剥離剤を発見、同時に、多種の剥離剤も見出しました。

このような研究成果のマテリアルがSDGsに貢献できれば、それは有意義なことです。しかしながら、材料科学の研究開発のあり方を不可逆的に変革することこそ重要な社会貢献である、と私たちは考えています。