

「R&D 懇話会 241 回」マテリアルズインフォマティクスの最前線

主催 公益社団法人 日本化学会 産学交流委員会

【会 期】 2025 年 2 月 12 日（水） 15 時～17 時

【会 場】 Zoom を利用したオンラインセミナー

【企画概要】 マテリアルズインフォマティクス (MI) は、材料開発において統計解析などのデータサイエンスの手法を駆使して開発の効率化を実現する手法です。最近では、機械学習や AI の進歩によるシミュレーション技術の進化や、ロボティクスなどの自動化・自律化技術との融合により、材料開発の効率化が飛躍的に向上しています。従来の人手による仮説検証型の研究開発では実現し得ない研究効率が可能となるため、学術界のみならず産業界でも応用が積極的に進められています。本講演会では、MI の理論的考察から具体的な材料開発の応用例まで、最新の研究事例についてご講演いただきます。

【プログラム】

15:00-15:05 開会挨拶、趣旨説明

安宅 由晴（産学交流委員会 懇話会小委員会・委員／花王株式会社）

15:05-15:50 最先端のマテリアルズインフォマティクス原子レベルシミュレーションによる材料設計の現状と今後の発展

浅野 裕介 氏（株式会社 Preferred Computational Chemistry カスタマーサクセス統括）

材料科学の分野における最近の進展は、新しい材料の発見と設計を加速させ、産業のさまざまな側面において革命的な変化をもたらしている。近年のマテリアルズインフォマティクス (MI) は、実験データのみならず、計算化学と機械学習技術を融合することで、材料開発のプロセスを大幅に効率化している。本講演では、特に原子レベルシミュレーションに焦点を当て、現代の MI がどのようにして材料設計に貢献しているかについて解説する。また、研究成果や課題、将来展望についても議論する。

16:00-16:45 「自律実験」と「データ」を活用した新しい研究開発法

一杉 太郎 氏（東京大学大学院理学研究科 教授／東京科学大学物質理工学院 特任教授）

コンピュータが次の実験を決定し、ロボットが実験を進めて材料特性の最大化をする『自律実験』に注目が集まっている。この技術により、多量の実験データを活用して研究を進める時代が到来した。本講演では、『自律実験』と『データ』を活用したマテリアル研究のあり方を議論する。特に、機械学習(ベイズ最適化・生成 AI)と計算・シミュレーションを組み合わせた手法が急速に立ち上がってきている。そして、機器の標準化への取り組みも進んでいる。これら動きはラボの変革だけではなく、研究者の働き方や研究開発の進め方に大きな変化をもたらすのは確実である。その現状と展望について議論する。さらに、人材育成についても議論をしたい。

16:55-17:00 まとめ、閉会挨拶

棚瀬 省二郎（産学交流委員会 懇話会小委員会・委員／出光興産株式会社）

【参加費】 R&D 懇話会会員 9,000 円（R&D 懇話会無料参加券が利用可能）、日本化学会会員（個人・法人 9,000 円、非会員 12,000 円。※いずれも「税込」で、課税区分は「課税」です。

【申込】 チケット申込サイト「Peatix」よりお申込みおよび事前決済を行ってください。詳細はリンク先にてご確認ください。 <https://peatix.com/event/4177378>

【問合せ】 日本化学会企画部 田口・河瀬 sangaku@chemistry.or.jp