

題目：情報統合型物質・材料研究の現状と課題

要旨：通常の研究では、与えられた物質や材料について、因果関係を基礎としてそれらの性質や機能を調べる。一方、物質設計、材料設計では、望ましい性質や機能を満たす物質や材料は何か、という問いに答えなければならない。つまり、通常の研究では順問題を解いており、物質・材料設計では逆問題を解かなければならない。一般に逆問題を解くことは非常に難しく、情報統合型物質・材料研究（マテリアルズ・インフォマティクス）とは、データからの帰納的な解析によって逆問題を解く処方箋を与えるものと捉えることができる。本講演では、MI²I プロジェクトのこれまでの研究活動に基づき、それを実行する方法としての機械学習（人工知能）、あるいはデータマイニングの基本的な考え方と、逆問題へのアプローチのいくつかの可能性を説明する。また、情報統合型物質・材料研究を進める上で可及的速やかに整備しなければならない基盤的技術・ソフト・システムなどについて言及する。

Title:

Present status and near-future tasks of Materials research by Information integration (MI²)

Abstract:

In most of our research activities so far, we study properties and functions of given materials according to causality relations. On the other hand, for materials design, we have to give answers to the question which material will satisfy the required properties and functions. In other words, while forward problems are solved in our ordinary research, inverse problems have to be solved in materials design. Solving the inverse problem is generally quite difficult. MI² (or Materials Informatics, MI) is regarded as an approach to providing prescriptions for solving inverse problems in the materials science. In this lecture, I will explain the basic concept of machine learning (artificial intelligence) or data mining, and possible approaches to the inverse problems, based on the research activities carried out in the MI²I project. I will also mention some basic tasks to be solved as soon as possible to further the project.