

三井情報、東工大とマテリアルズ・インフォマティクスの共同研究を開始
- 「ベイズ最適化」の試作版アプリの提供を通じて、材料研究者からの意見を募集 -

三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:浅野 謙吾、以下 三井情報)は、国立大学法人東京工業大学(所在地:東京都目黒区、学長:益 一哉、以下 東京工業大学)物質理工学院の一杉 太郎教授、中山 亮特任助教と、「ベイズ最適化(*1)」と呼ばれる技術を使った「マテリアルズ・インフォマティクス(以下 MI)」を推進するためのアプリケーションの共同研究において、試作版(以下 試作版アプリ)を開発したことをお知らせします。三井情報では、多くの材料研究者に研究開発で活用してもらうために試作版アプリを提供し、材料研究者からのフィードバック意見を募ります。試作版アプリは三井情報が用意するWeb サイト上で利用できます。(<https://mki-bayesopt.mkilabs.io>)

マテリアルの探索をする研究現場では、マテリアルを構成する元素の多様化および温度や圧力といった合成条件の精緻化によって、それらの組み合わせが急拡大し、効率的なマテリアル探索が求められています。近年、世界各国では情報処理技術を活用して材料開発を進める MI の取り組みが活発になり、国内においても国家プロジェクトとしてマテリアル分野を強化するための取り組みが進められています(*2)。かかる状況を受け、三井情報ではバイオインフォマティクスやケモインフォマティクスへの取り組みを通じて蓄積した計算科学の知見を活かし、材料科学を研究する一杉教授、中山特任助教と共に、「マテリアルズ・インフォマティクスの産業応用に関する研究」を行うことになりました。この研究で開発するソリューションのコンセプトである「革新的データ解析技術を誰でも使えること」「材料開発研究の生産性向上に資すること」を実現するため、三井情報では試作版アプリを材料研究者に無料で提供して意見を募集し、研究を継続していきます。



- 試作版アプリの利用イメージ -

三井情報は一杉教授、中山特任助教との共同研究を通じて、材料研究の効率化により研究者が付加価値の高い「創造的な仕事」に取り組めるよう支援し、日本のマテリアル分野におけるイノベーションを ICT 技術で後押しします。

(*1) ベイズ最適化(Bayesian Optimization)は詳細な形状がわからない関数(ブラックボックス関数)の最大値(または最小値)を求めるための機械学習の手法の1つ。ガウス過程回帰と呼ばれる手法を用いて求めたい関数の事前確率分布を仮定し、既知のデータセットから事後確率分布を最適化する。この中で、既にある程度良いとわかっている事前データの利用(活用)と、未知の領域への挑戦による異なる経験(探索)をバランスよく行うことにより、局所解に陥ることなく最適値を探索することができる。

(*2) 「総合イノベーション戦略 2021」(内閣府) <https://www8.cao.go.jp/cstp/tougosenryaku/2021.html>

【関連ページ】

マテリアルズ・インフォマティクス: <https://www.mki.co.jp/solution/mi.html>

マテリアルズ・インフォマティクスはじめました: <https://www.mki.co.jp/knowledge/column124.html>

【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社(MKI)はキャッチコピー『ナレッジでつなぐ、未来をつくる』を掲げ、ICTを基軸とした事業戦略パートナーとしてお客様のIT戦略を共に創り、デジタルトランスフォーメーションを支援しています。半世紀にわたり培った技術や知見の結実である“KNOWLEDGE”を活かし、お客様と共に価値を創造する「価値創造企業」として絶え間ない挑戦を続けていきます。

ホームページ: <https://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。

【報道関係者からのお問い合わせ先】

三井情報株式会社

広報・CSV推進室

TEL : 03-6376-1008 E-mail : press-dg@mki.co.jp

【試作版アプリに関するお問い合わせ先】

三井情報株式会社

技術推進本部R&D部研究開発室

E-mail : mki-bayesopt-dg@mki.co.jp