

第 1 章

4つのインフォマティクス

マテリアルズ・インフォマティクス（マテインフォ）、プロセス・インフォマティクス（プロセスインフォ）、計測インフォマティクス（計測インフォ）、物理インフォマティクス（物理インフォ）それぞれについて簡単に解説します。



1.1

マテインフォ・プロセスインフォ・ 計測インフォ・物理インフォ

機械学習などのデータ科学を使い材料開発を行う技術領域は、細かく分けると以下の4つの技術領域に分割して考えることができます。

- マテリアルズ・インフォマティクス（略：マテインフォ）
- プロセス・インフォマティクス（略：プロセスインフォ）
- 計測インフォマティクス（略：計測インフォ）
- 物理インフォマティクス（略：物理インフォ）

それぞれの役割を図1.1に示します。「マテリアルズ・インフォマティクス」は、機械学習などを用いて新材料を効率的に予測したり発見したりする技術を指します。「プロセス・インフォマティクス」は、機械学習などを用いて新材料・新デバイスを効率的な方法で実際に作ることに重きを置いた技術です。「計測インフォマティクス」では、機械学習を用いて効率的にデータを測定したり、大量のデータを解析したりします。「物理インフォマティクス」では、材料の“予測”ではなく材料物性の“理解”に重きを置いてデータを解析します。現在、それぞれの定義や境界線は結構曖昧になっている（日々変化している）のですが、大体こんな感じの分類になっています。ちなみにですが、上記4つを全てひっくるめて「マテリアルズ・インフォマティクス」と表現することもあります。

これら4技術は独立したものではなく、図1.1のようにそれぞれがつながってループを組むような関係性にあります。「予測・発見する（マテインフォ）」⇒「作る（プロセスインフォ）」⇒「測定する（計測インフォ）」⇒「理解する（物理インフォ）」⇒「予測・発見する（マテインフォ）」⇒……のループです。まず、マテインフォで特性の良い材料の結晶構造や組成を予測・発見し、その材料組成・構造を目指して実際にプロセスインフォで作り、そこで実際に作られた材料の特性を計測インフォで測定・解析し、これらデータを物理インフォの技術でその材料の物性を理解し、そこで得られた知見をもとにまたマテインフォでより良い材料の構造・組成を予測し……という流れです。この『予測』⇒『作製』⇒『測定』⇒『理解』⇒『予測』⇒……のループ流れは、多く

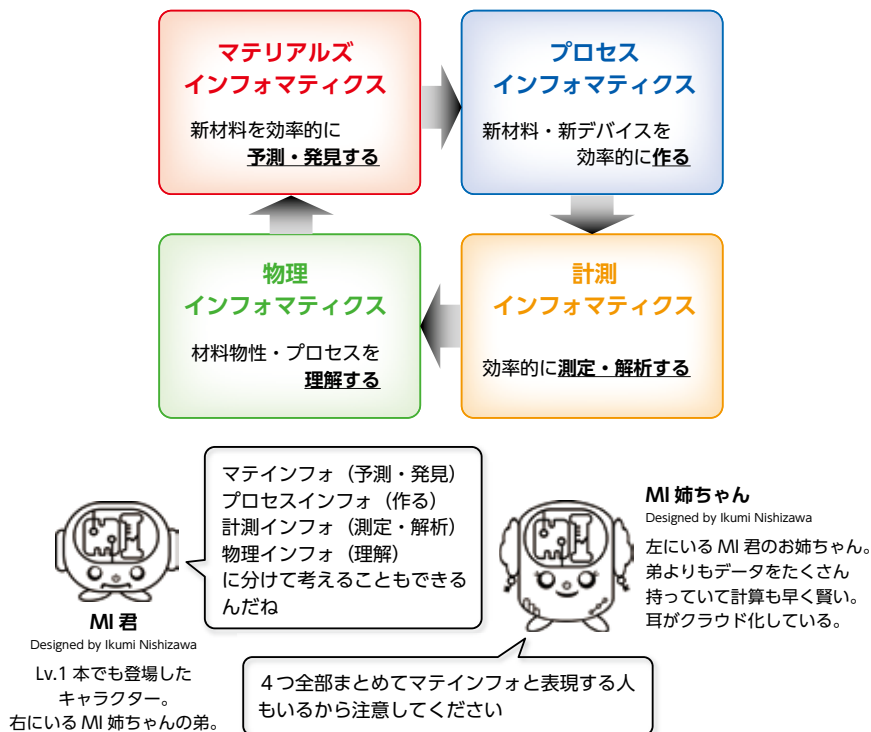


図 1.1 マテインフォとプロセスインフォと計測インフォと物理インフォ

の材料開発に当てはまります（順番は結構メチャクチャになることも多いですが）。

図 1.1 をパッと見ますとインフォマティクスという言葉が4つも出てきます。そのため、何でもかんでもインフォマティクスで解決しようとしているように見えるかもしれませんが、それは間違いです。機械学習などのデータ科学は、材料開発におけるツールの一つにすぎません。Lv.1 本の 1.3 でも述べましたが、実験科学・理論科学・計算科学（シミュレーション）側からアプローチした方が圧倒的に効率的であるにもかかわらず無理やりデータ科学側からアプローチをしてしまうと、時間の無駄となってしまうことが多いのです（筆者がよくこれを経験しました。後々考えると時間の無駄だったなと……）。その

ため、材料開発では『必要に応じてデータ科学を使う』という心がけが大切です。もちろん、データ科学の存在を想定して材料開発を進めていくこと（例えば、機械学習で解析しやすいように、材料データは狙い撃ちではなく、まんべんなく取得した方が良い場合がある、など）は求められてきますが、何でもかんでもデータ科学に頼るのは効率的とは言えません。

最近『マテリアルデジタルトランスフォーメーション（マテリアルDX）』という言葉もよく聞かれます。マテリアルDXは技術名というよりはもう少し広い意味で使われます。マテリアルDXに関しては、コラム1にて簡単に説明します。

さて、ここからはマテインフォ、プロセスインフォ、計測インフォ、物理インフォそれぞれについて簡単に説明していきます。

1.2

マテリアルズ・インフォマティクス (マテインフォ)

「マテリアルズ・インフォマティクス」という言葉は、1.1で述べたように、「機械学習を用いて特性の良い材料の構造や組成を予測・発見する技術」という意味で使われることもありますし、先に述べた4技術すべてをひっくるめた領域全体を意味することもあります。ここでは、細かく分類したときの「マテリアルズ・インフォマティクス」について記載します。

機械学習の技術を用いて材料開発を行いましょう、という研究開発は、2010年代前半頃から活発に行われてきました。そしてこの期間に行われた研究の多くは、“機械学習を用いて物性値を予測する研究”や、“機械学習を用いて新材料の構造・組成を予測する研究”でした。つまり、小分類における「マテインフォ」の研究はすでに活発に行われてきており、多数の研究事例が存在します。図1.2に示すように、今では様々な記述子（数値^{1)~6)}・スペクトル^{7)~10)}・画像^{11)~14)}・グラフ^{15)~17)}・テキスト^{18)~20)}・etc.) から、物性値の予測や新材料の組成・構造の予測ができるようになっていきます。（参考に、この辺の技術のレビュー論文や書籍などの情報をいくつか載せておきます^{21)~37)}）。そこで使われ

【物質・材料に関する記述子】 【マテインフォのいろいろな技術】 【マテインフォの主な目的】

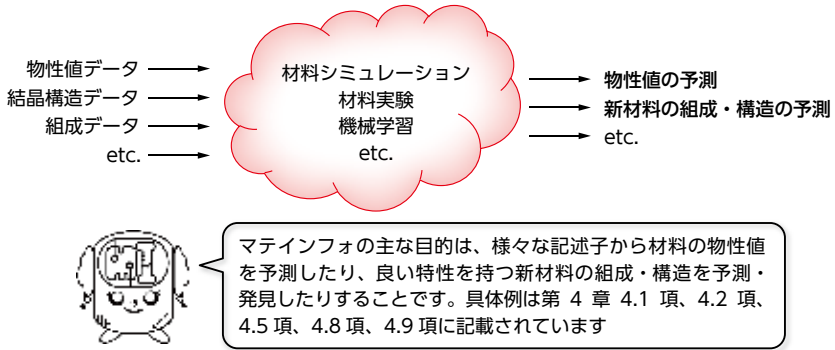


図 1.2 マテリアルズ・インフォマティクス (マテインフォ)

るメジャーな手法は、後で説明するバーチャルスクリーニングやアクティブラーニングです（これらは第2章で説明します）。これらの手法が材料開発業界に浸透してきたため、「機械学習を用いて新材料の構造・組成を予測することは、まあまあ出来るようになってきたなあ」というのが、この領域で活動している人々の現在の認識かと思います（もちろん、細かい話をするすると課題は多々ありますが）。マテインフォの具体的な事例は本書でも第4章4.1項、4.2項、4.5項、4.8項、4.9項に記載しています。

マテインフォから新しい材料の組成・構造が予測できると、次に我々はその材料を実際に合成したくなります。そこでプロセス・インフォマティクス（プロセスインフォ）の登場です。次の項目ではプロセスインフォを簡単に説明します。

- (1) T. Yamashita et al. Crystal structure prediction accelerated by Bayesian optimization. *Phys. Rev. Materials* 2, 013803 (2018)
- (2) K. Terayama et al. Fine-grained optimization method for crystal structure prediction. *npj Comput. Mater.* 4, 32 (2018)
- (3) A. R. Oganov et al. Crystal structure prediction using ab-initio evolutionary techniques : Principles and applications. *J. Chem. Phys.* 124, 244704 (2006)
- (4) Y. Iwasaki et al. Machine learning autonomous identification of magnetic alloys beyond the Slater-Pauling limit. *Commun. Mater.* 2, 31 (2021)

- (5) L. Ward et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *npj Comput. Mater.* 2, 16028 (2016)
- (6) V. Stanev et al. Machine learning modeling of superconducting critical temperature. *npj Comput. Mater.* 4, 29 (2018)
- (7) S. Kiyohara et al. Learning excited states from ground states by using an artificial neural network. *npj Comput. Mater.* 6, 68 (2020)
- (8) T. Mizoguchi et al. Machine learning approaches for ELNES/XANES. *Microscopy* 69, 2, 92-109 (2020)
- (9) S. Kiyohara et al. Data-driven approach for the prediction and interpretation of core-electron loss spectroscopy. *Sci. Rep.* 8, 13548 (2018)
- (10) M. Umehara et al. Analysing machine learning models to accelerate generation of fundamental materials insights. *npj Comput. Mater.* 5, 34 (2019)
- (11) S. Kajita et al. A Universal 3D Voxel Descriptor for Solid-State Material Informatics with Deep Convolutional Neural Networks. *Sci. Rep.* 7, 16991 (2017)
- (12) Z. Cao et al. Convolutional Neural Networks for Crystal Material Property Prediction Using Hybrid Orbital-Field Matrix and Magpie Descriptors. *Crystals* 9 (4), 191 (2019)
- (13) T. L. Pham et al. Machine learning reveals orbital interaction in materials. *Sci. Technol. Adv. Mater.* 18 (1), 756-765 (2017)
- (14) Y. Wang et al. Porous Structure Reconstruction Using Convolutional Neural Networks. *Math. Geosci.* 50, 781-799 (2018)
- (15) C. Chen et al. Graph Networks as a Universal Machine Learning Framework for Molecules and Crystals. *Chem. Mater.* 31, 9, 3564-3572 (2019)
- (16) K. T. Schütt et al. SchNet – A deep learning architecture for molecules and materials. *J. Chem. Phys.* 148, 241722 (2018)
- (17) T. Xie et al. Crystal Graph Convolutional Neural Networks for an Accurate and Interpretable Prediction of Material Properties. *Phys. Rev. Lett.* 120, 145301 (2018)
- (18) V. Tshitoyan et al. Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature. *Nature* 571, 95-98 (2019)
- (19) M. C. Swain et al. ChemDataExtractor : A Toolkit for Automated Extraction of Chemical Information from the Scientific Literature. *J. Chem. Inf. Model.* 56, 1894-1904 (2016)
- (20) M. Krallinger et al. Information Retrieval and Text Mining Technologies for Chemistry. *Chem. Rev.* 117, 7673-7761 (2017)
- (21) K. T. Butler et al. Machine learning for molecular and materials science. *Nature* 559, 547-555 (2018)
- (22) T. Mueller et al. Machine learning in material science : recent progress and emerging applications. *Rev. Comput. Chem.* 29, 186-273 (2016)
- (23) R. Jose et al. Materials 4.0 : Materials big data enabled materials discovery. *Appl. Mater. Today* 10, 127-132 (2018)
- (24) H. Senderowitz et al. Materials informatics. *J. Chem. Inf. Model.* 58, 2377-2379 (2018)
- (25) R. Ramprasad et al. Machine learning in materials informatics : recent applications and prospects. *npj Comput. Mater.* 3, 54 (2017)
- (26) A. Agrawal et al. Perspective : Materials informatics and big data : Realization of the