

これまでの材料開発は、研究者の経験や勘、そして膨大な試行錯誤に依存しており、非常に多くの時間とコストを要する作業だった。材料の性能は、元素の種類や組成比率、製造工程での温度、圧力、冷却速度、さらには熱処理や機械加工の条件など、非常に多くの要素に左右される。そのため、これらのパラメータの組み合わせは膨大な数にのぼり、それらすべてを実験的に検証することは現実的ではなかった。従来の手法では、既存の理論や過去の知見をもとに、ある程度の見通しを立てて実験を行っていたが、それでも探索可能な範囲は限られ、優れた性能を持つ新規材料を見落とす可能性も少なくなかった。

こうした中で登場したマテリアルズインフォマティクスは、材料開発の手法を根本から変える革新的な技術であり、これまでに蓄積された実験データやシミュレーション結果を AI や機械学習に学習させることで、材料の特性を高い精度で予測することが可能となる。これにより、開発の初期段階であっても、目的の性能を実現する可能性の高い材料の候補を事前に絞り込むことができる。試作や実験にかかる手間やコストを大幅に削減しながら、成功の確率を高めることが可能となる。

さらに、マテリアルズインフォマティクスは「逆問題」への対応も可能にしている。これは、研究者が「このような特性を持った材料が欲しい」といった目標を設定すると、その性能を実現するために最適な組成や結晶構造、加工条件などを AI が逆算して提案するという手法である。これにより、従来の「材料を作ってから評価する」という順序とは逆に、「性能を設定してから材料を設計する」という全く新しいアプローチが可能となる。

また、マテリアルズインフォマティクスは、複数の性能を同時に最適化する「多目的最適化」にも有効である。これにより、これまで見過ごされてきた“トレードオフ関係”にある性能同士のバランスを最適化し、全体として最も望ましい材料を見つけることが可能となる。

このように、マテリアルズインフォマティクスによって、従来の経験と直感に頼る材料開発から、データと論理に基づいた戦略的な開発へと大きく転換していくと考えられる。