

マテリアルズインフォマティクスは研究開発に何をもたらすか

素材や化学業界の成功は、革新的な製品をいかに迅速に開発できるかに大きく依存しています。この資料では、その鍵を握るソリューションとして注目を集めているマテリアルズインフォマティクス (MI: Materials Informatics) の特徴をご紹介します。

マテリアルズインフォマティクスは、データ駆動型の手法と高度な計算技術を活用して、新しい材料の発見や開発を効率的に行うアプローチです。具体的には、材料科学、データ科学、機械学習を組み合わせ、迅速かつ低コストで新材料を設計・評価することを目指します。この手法は、効果的に導入することで、人材、プロセス、技術全体にわたる変革をもたらすことができます。

人工知能 (AI) と機械学習 (ML) をワークフローに組み込み、効率化とスピードアップを実現



従来の研究開発プロセスは、多くの時間とリソースを費やす試行錯誤のアプローチです。マテリアルズインフォマティクスは、AIとMLを活用したモデリングによって材料の特性や性質を予測し、コストや時間のかかる試行錯誤を減らすことができます。その結果、ワークフローが最適化され、研究プロセス全体が合理化されるため、研究開発のスケジュール

ルや市場投入までの時間が短縮されます。

科学的専門知識と高度なデジタルスキルを併せ持つ研究者



研究開発におけるデータ駆動型アプローチが普及する中で、研究者にとってデータを競争優位性に変えるデジタルスキルは不可欠です。AIやML、データ分析を学んだ研究者は、ワークフローを刷新し、生産性を向上させることができます。高度なデジタルスキルは、データ駆動型の方法論の構築や実験計画の最適化などにおいて、従来の方法では不可能だった革新を可能にします。研究所をビジネス価値創出の中核とするためにも、企業経営者は研究者のデジタルスキル育成に投資すべきです。

研究開発に最適化された優れたデジタルツールが可能にする科学的革新



科学研究開発領域における複雑なデータやプロセスを取り扱うには、柔軟かつ適応性のあるデジタルツールが必要です。MIツールは、研究開発での使用に適応するように設計される必要があります。例えば、実験の特徴である反復や繰り返し作業、複雑な材料の特性評価データの扱い、新しい素材の探求のための科学的発見プロセスへの対応、新たな課題などにスムーズに対応する必要があります。研究所には、必要なデータにアクセスでき、クリーンで統一されたインターフェースを備えた、セキュリティが高く、柔軟で拡張性のある研究開発プラットフォームが必要です。このようなプラットフォームを使用すれば、データの保存場所に関係なく、使い慣れたツールでデータを分析し、同僚とアセットをシームレスに共有することができます。また、最小限のITコストでカスタムMIアプリケーションを構築・展開することも可能です。



マテリアルズイン フォマティクスの 技術知識

主な技術領域

生成AI、大規模言語モデル (LLMs)、グラフニューラルネットワーク、ベイズ最適化、機械学習、深層学習、生成対向ネットワーク (GANs)、自然言語処理 (NLP)、画像処理、デジタル信号処理、材料インフォマティクス、ビッグデータ、データサイエンス、アナリティクス、データビジュアライゼーション、オープンデータ、分子動力学 (MD)、密度汎関数理論 (DFT)、マルチスケールモデリング、電気化学シミュレーション、最適化、数理モデル、分子表現、クラウド、高性能コンピューティング、データベース、データパイプライン、データオペレーション (Data Ops)、機械学習オペレーション (ML Ops)、ウェブおよびデスクトップUI、科学データエンジニアリング、シミュレーション、実験計画法、マルチプロセッシング、アプリケーション開発、デジタルツインズ

主なユースケース

特性予測、材料発見、製剤最適化、構造生成、材料適合性、材料安全性、代理モデル、テキストデータマイニング、データ管理、データ拡張、自動データ分析、文献および特許検索、チャットボット、グリーントランスフォーメーション、インダストリー4.0、ワークフローの再設計



エンソートは、科学とデジタル技術の融合における先駆者です。20年以上にわたり、データおよびAI/MLを活用した課題解決、人材育成、組織改革、プロセスの改善を通じて、科学研究開発のDXを支援してきました。

材料

ポリマー化合物、炭素利用触媒、有機エレクトロルミネッセンス (OLED)、固体電解質、ポリマー電解質燃料電池電極、高エントロピー合金、エンジニアリングプラスチック、合成ゴム、フォトレジスト、絶縁膜、異方性導電膜、潤滑剤、光起電力、カラーフィルター、ペロブスカイトセラミックス



初回30分の無料コンサルテーションをお試しいただけます。QRコードからフォームで
または、info@enthought.com までメールでご連絡ください。