

さきがけ インフォマティクスについて

東大院理／東大物性研 常行真司
stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp

平成 27 年度に JST の戦略的創造研究推進事業（さきがけ）で、「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」という新しい領域が設定され、研究総括をお引き受けすることになった。本研究領域は、物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤構築と、それを牽引する研究者の輩出を目指すもので、募集要項では 1)新物質発見の促進、設計指針の構築、2)大規模データからの相関・法則の帰納的解明、3)候補物質の高速・大量スクリーニング、4)物質・材料データの包括的記述、5)データ取得・蓄積・管理手法、6)計算・解析ツール、などを例にあげつつも、必ずしもこれらに限定されることなく、物質・材料開発にもたらす科学技術的インパクトや産業や社会への貢献を見据えた、挑戦的な研究の応募を推奨した。

物質・材料の研究者は必ずしもインフォマティクスになじみがなく、逆に情報科学分野の研究者は一般には材料の知識に乏しいと思われることから、個人研究であって分担者の認められないさきがけへの応募は、かなりハードルが高いと予想していた。しかしながら幸いにも 115 件という多数の応募があり、内容的にも優れた提案が多かったことから、さきがけとしては多目の 15 名を 1 期生として採択することができた。採択者のバックグラウンドは、実験科学 3 名、理論・計算科学（物性、分子、材料）8 名、データ科学 4 名、対象とする物質で分類するならば、固体・結晶（磁性、伝熱、強相関）6 名、分子（発光、触媒）3 名、高分子・液体・ガラス・マイクロ組織 6 名となり、きわめて分野横断的な顔ぶれとなった。なお惜しくも採択されなかった提案の中にも、非常に興味深いものが多数含まれていたことを付け加えておく。

さきがけは個人研究のための予算ではあるが、領域内で各自のバックグラウンドを活かした共同研究が生まれることを奨励している。また MI²I の寺倉清之プロジェクトリーダー、伊藤聡プロジェクトマネージャーには領域アドバイザーとしてご協力いただいております、MI²I とは様々な形で連携を考えている。名実ともに分野横断型という難しい領域ではあるが、「バーチャル・ネットワーク型研究所」であるというさきがけの特徴を活かし、若手研究者が率先して新しい道を切り開いてくれることを期待したい。