

# 第79回RISMセミナーシリーズ データ駆動型AIセミナー(第21回)

## Catalyst Informatics: Revolutionizing Catalyst Design through Data-Driven Approaches

Professor Keisuke TAKAHASHI (Hokkaido University)

Catalysts and materials have been developed by researchers through a trial-and-error process over the years. To accelerate the development time, catalyst informatics is proposed, which involves designing catalysts based on hidden patterns and trends in data. In this talk, the development of high-throughput experiments to acquire catalyst big data will be demonstrated. Machine learning, along with developed informatics methodologies, will be presented for designing catalysts from data. Throughout the talk, recent developments in catalyst informatics platforms and 3D printer catalyst synthesis devices will be introduced. The goal is to explore how informatics can be used in the synthesis of materials and catalysts in principle.

## マテリアルズ・インフォマティクスの実践活用に向けたスキルアップ

高原 渉 氏 (株式会社日立製作所、奈良先端科学技術大学院大学)

情報科学を駆使した材料開発を掲げるMaterials Genome Initiative (MGI) が提唱されて早くも10年が経過し、近年ではMaterials Informatics (MI) という技術領域が大分と普及し、様々な取り組みの報告がなされてきた。しかしながら、MIは材料と情報科学の複合領域であること、材料開発の場面には様々な形式のデータが存在すること、そしてMIのコア技術となるAI分野の技術進歩の速さなどから、MIスキルの磨き方はまだまだ体系化されていないように思う。そこで本講演では、材料工学出身から現在はMI領域のデータサイエンティストとして活動している講演者の経験から、MIの実践活用のためにはどのようなスキルアップの道筋があるのかについて紹介する。