

2019年6月10日

## 統計数理研究所と三菱ケミカルの共同研究部門設置について

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所  
三菱ケミカル株式会社

大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所（所在地：東京都立川市、所長：椿 広計、以下「統数研」）と、三菱ケミカル株式会社（本社：東京都千代田区、社長：和賀 昌之、以下「MCC」）は、新たなマテリアルズ・インフォマティクスの基盤技術を構築することを目的として、2019年10月より共同研究部門「ISM-MCC フロンティア材料設計研究拠点」（以下「本研究部門」）を設置することで合意しましたのでお知らせいたします。

統数研は、統計科学とそれに関連する数理科学に関する日本で唯一の研究機関であり、1944年の設立以降、統計科学の理論と応用において先駆的な役割を果たしてきました。データを原資とするデータ駆動型社会の到来を迎え、統計数理の専門研究機関として、一層その役割が注目されています。MCCは、多種多様な素材の扱う化学企業として、実験化学と計算化学の両面からの材料設計技術の蓄積があります。

このたび設置する本研究部門では、データ科学による解析技術と計算化学による予測技術を融合して新規物質探索を行うマテリアルズ・インフォマティクスの基盤技術を構築することを目的としています。

データ科学に基づく物質探索では入力されたデータとの類似性から物性を予測するため、入力データに類似した範囲でのみ物質の探索が行われます。一方計算化学では既存データの有無とは関係なく未だ現実には作成されていない材料、素材の性質を予測する事が可能です。両者の強みであるデータ科学技術と計算化学技術を融合する事で、既存データの範囲には含まれない革新的な特性を有する材料を見出すための物質探索アルゴリズムを構築するとともに、高分子、触媒、無機材料といった具体的な材料設計課題に適用しながらアルゴリズムの高度化を図ります。

なお、本研究部門には、両者の研究員に加えて、MCCの親会社である三菱ケミカルホールディングスにおいてデジタル・トランスフォーメーションを推進する先端技術・事業開発室のデータサイエンティストも参加する予定です。

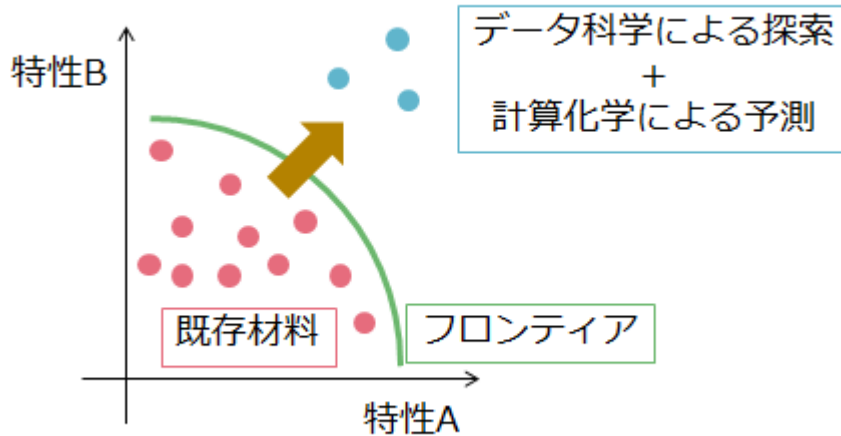


大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

統計数理研究所



本研究部門で構築したアルゴリズムは学術成果として積極的に発信し、マテリアルズ・インフォマティクス分野におけるオープンイノベーション・オープンサイエンスの促進に貢献します。



以上

お問合せ先

統計数理研究所運営企画本部企画室 URA ステーション

TEL : 050-5533-8580

Email : [ask-ura@ism.ac.jp](mailto:ask-ura@ism.ac.jp)

株式会社三菱ケミカルホールディングス 広報・IR室

TEL 03-6748-7140