

2023 年 10 月 16 日

情報・システム研究機構 統計数理研究所

三井情報株式会社

**統計数理研究所と三井情報、ブラックボックス最適化の停止基準に関する共同研究を開始  
- マテリアルズ・インフォマティクス向けアプリケーションへの停止基準機能の提供 -**

統計数理研究所(所在地:東京都立川市、所長:椿 広計)と三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:浅野 謙吾、以下 三井情報)は、ブラックボックス最適化<sup>1)</sup>の停止基準アルゴリズム(以下 停止基準)を産業応用するための共同研究を開始したことをお知らせします。統計数理研究所の日野教授らが開発した停止基準は様々な分野で応用が可能な技術ですが、三井情報が開発しているマテリアルズ・インフォマティクス(以下 MI)向けソリューションに組み込み、より効率的な物質探索を目指して実証研究を行います。

近年、世界各国では情報処理技術を活用して材料開発を進める MI の取り組みが活発になり、国内においても国家プロジェクトとして材料分野を強化するための取り組みが進められています<sup>2)</sup>。材料開発の現場では、素材や温度・圧力等の合成条件の組み合わせによって新規機能性材料を探索しているため、それらの膨大な組み合わせから効率的に探索する方法論の確立が MI の大きなターゲットの一つで、近年ではベイズ最適化<sup>3)</sup>が広く用いられるようになってきています。

ベイズ最適化は背景のモデルを仮定しないため非常に汎用的な手法ですが、全ての条件を探索しない限りは最良の条件を知り得ないという普遍的原理から逃れることはできず、材料開発者が探索実験を打ち切るタイミングをなんらかの判断基準で決定しなければならないという課題がありました。その最良のタイミングを統計的に評価する方法が日野教授らによる停止基準であり、材料開発者の恣意的な判断によらず、ほぼ自動的に打ち切りのタイミングを判定することができます。停止基準の導入によって生産性の向上、さらには材料開発の自動化も実現できる可能性があります。

統計数理研究所の日野教授および Le 助教は様々なユースケースに対応できる停止基準の理論研究を、三井情報は材料開発の現場に適用するソリューションの実証研究を、それぞれ担当しながら共同研究を進め、材料研究の効率化により研究者が付加価値の高い「創造的な仕事」に取り組めるよう支援し、日本の材料分野におけるイノベーションを ICT 技術で後押しします。

1) 詳細な形状がわからない関数(ブラックボックス関数)の最大値(または最小値)を求めるための機械学習手法の総称。

2) 「総合イノベーション戦略 2023」(内閣府): <https://www8.cao.go.jp/cstp/tougosenryaku/2023.html>

3) ブラックボックス最適化の一つ。

以上

**【関連ページ】**マテリアルズ・インフォマティクス: <https://www.mki.co.jp/solution/mi.html>マテリアルズ・インフォマティクスはじめました: <https://www.mki.co.jp/knowledge/column124.html>**【統計数理研究所について】**

統計数理研究所は昭和 19 年に文部省直轄の研究所として設置され、統計数理研究の中心的な研究機関として、その発展のための先駆的役割を果たしてきました。平成 16 年からは大学共同利用機関法人情報・システム研究機構の一員となり、共同利用を推進する立場として、研究所内外の研究者の交流の場を提供しながら、統計数理科学の理論と応用における多面的な発展に寄与しています。また総合研究大学院大学の基盤機関として、若手研究者の育成に取り組みながら、一般社会人等を対象とする統計数理科学の知識・技術の普及活動や国際的な研究協力・交流促進の機能を果たすよう努めています。

ホームページ: <https://www.ism.ac.jp/>

### 【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社(MKI)は『ナレッジでつなぐ、未来をつくる』をパーパスに掲げ、ICTを基軸とした事業を展開し、2030 Vision「未来社会の当たり前をつくる」の実現に向け、お客様と共に社会課題の解決や新たな価値の創出に取り組んでいます。第七次中期経営計画では、2023年4月からの3年間で「想創期」と位置づけ、半世紀にわたり培った技術や知見の結実である“KNOWLEDGE”を活かし、お客様と共に価値を創造する「価値創造企業」として絶え間ない挑戦を続けていきます。

ホームページ: <https://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。

### 【報道関係者からのお問い合わせ先】

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

運営企画本部企画室 URAステーション

TEL: 050-5533-8580 E-mail: [ask-ura@ism.ac.jp](mailto:ask-ura@ism.ac.jp)

### 【本製品サービスに関するお問い合わせ先】

三井情報株式会社

技術推進本部 技術戦略部 研究開発室

E-mail: [mki-bayesopt-dg@mki.co.jp](mailto:mki-bayesopt-dg@mki.co.jp)