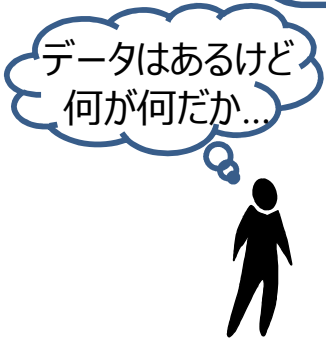
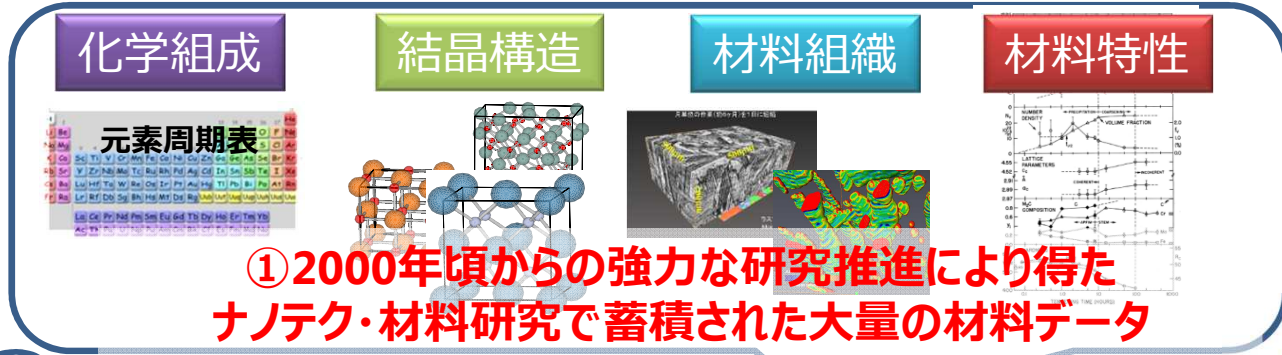


高効率に革新的な物質・材料を
探索・設計するための
マテリアルズインフォマティクスの推進

文部科学省 研究振興局
参事官付 (ナノテクノロジー・物質・材料担当)

平成26年8月1日

何故、今、インフォマティクスをやるのか？



欲しい材料の
特徴を入力

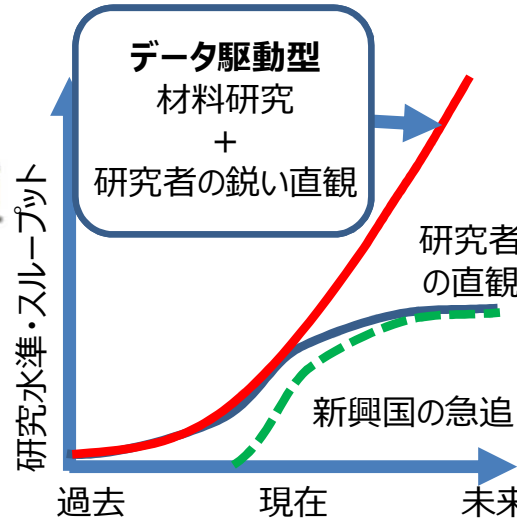


③ 計算機の急速な進歩 (京) データ駆動型

の材料創製!



② 大型施設のビッグデータの増加



	Human inspiration dependent	Cyber-enabled
演繹 (原理駆動型)	理論科学	計算科学 (シミュレーション)
帰納 (データ駆動型)	実験科学	第4の科学 (データ中心科学)

- 組成／組織と物性／特性の相関から多面的な材料探索を可能にし **材料開発の時間とコストを大幅短縮**
- 無機・金属、有機・高分子など **分野に依らない機能に基づく材料設計が大幅に進展**
- 多様な材料データから **材料機能発現の指導原理を見出す可能性も増大**

他国取組のベンチマーク

米国：Material Genome Initiative (GMI)

・データ駆動型研究の重要性に着目、オバマ大統領が2011年に提唱、⇒実効的な動きは少数の研究者の早期実現を目指し着手も、現状、**原理駆動型の取組みから脱していない** 活動でしかない

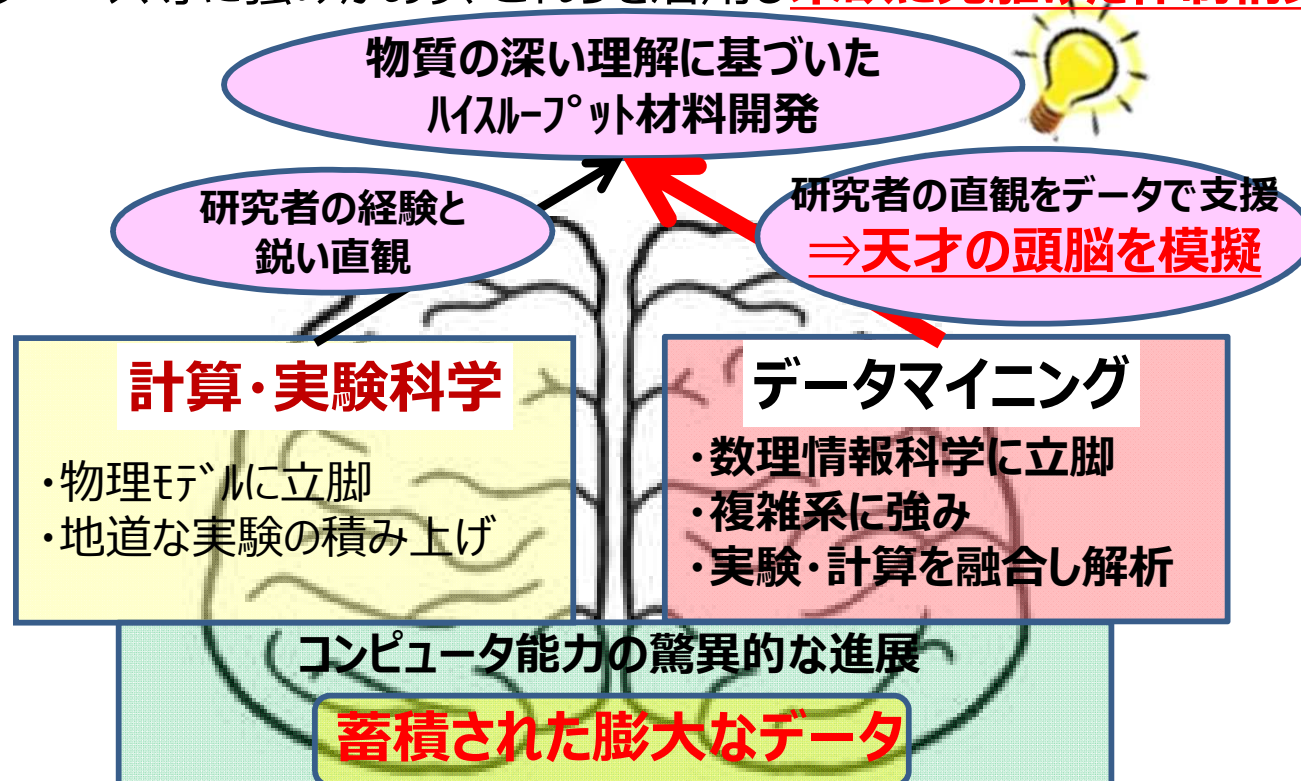
※現状打破に、日本との連携を強く求めている(米国から日米科技協定実務者会議の議題として提案)

欧州：Material Informatics

・計算材料科学の確立で立ち上がり中 (まだ活動的には小規模)

日本：Materials Informatics

・NIMSの基盤データベース等に強みがあり、これらを活用し**米欧に先駆けた体制構築を狙う**



マテリアルズインフォマティクスによるデータ駆動型の材料創製のイメージ

総務省の取り纏め・・・ビッグデータ活用で2012年の国内全産業の売上高60.9兆円分向上と試算
 ビッグデータの活用の潮流は世界中の様々な分野で進んでいる！

一般的なビッグデータ活用

(例) 宿泊ホテルの検索システム
 顧客データを収集

顧客データ

年齢 性別
 ホテル利用履歴
 検索端末情報
 etc

有効データ： 年齢、性別 etc.
 その他データ： 検索端末情報

目的データ： 利用履歴
 ホテルの質・宿泊期間・宿泊時期

データ入力

重要データ： 利用履歴

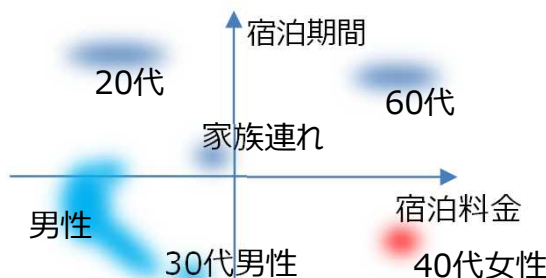
データベース

フィードバック⇒データベース精度向上

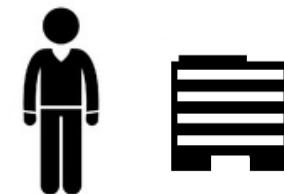
データを解析

顧客の求めるサービスを視える化

主効果： 推薦ホテルの提示



利用履歴の収集



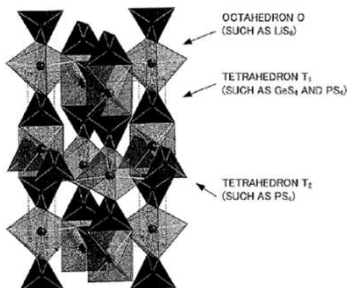
実際に宿泊した
 ホテルの情報

モデル化
 (インフォマティクス)

モデル修正

マテリアルズインフォマティクス

実験データ・計算データ



構成元素 A、B、C・・・
 イオン化傾向・価数・原子半径
 etc

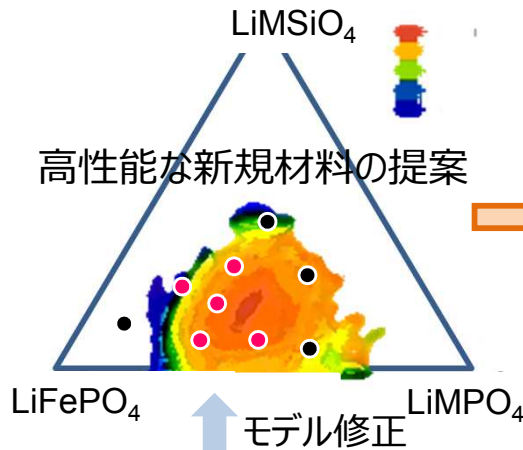
材料データを収集

有効データ： 組成・組織 etc
 その他データ： 評価法・解析法

目的データ： 材料特性
 性能・物性・プロセス

フィードバック⇒データベース精度向上

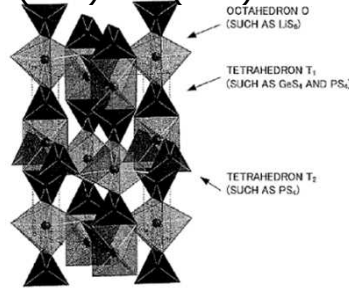
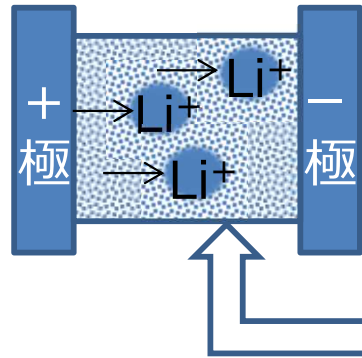
重回帰解析・・・重要パラメーターの抽出



材料性能の確認
 実験・シミュレーション

モデル修正

マテリアルズインフォマティクス的手法での材料開発事例



固体電解質

(固体でもリチウムイオンが移動できる物質)



リチウムイオンの移動速度が電池の定常出力を決める

海外では、インフォマティクス的な手法を活用し材料開発を既に実施！

国内

2011年5月：国内A社 特許出願
(特許公開は2012年11月)



リチウムイオンが速く動ける
構造を持つことを**実験的**に見出した
従来型研究

海外

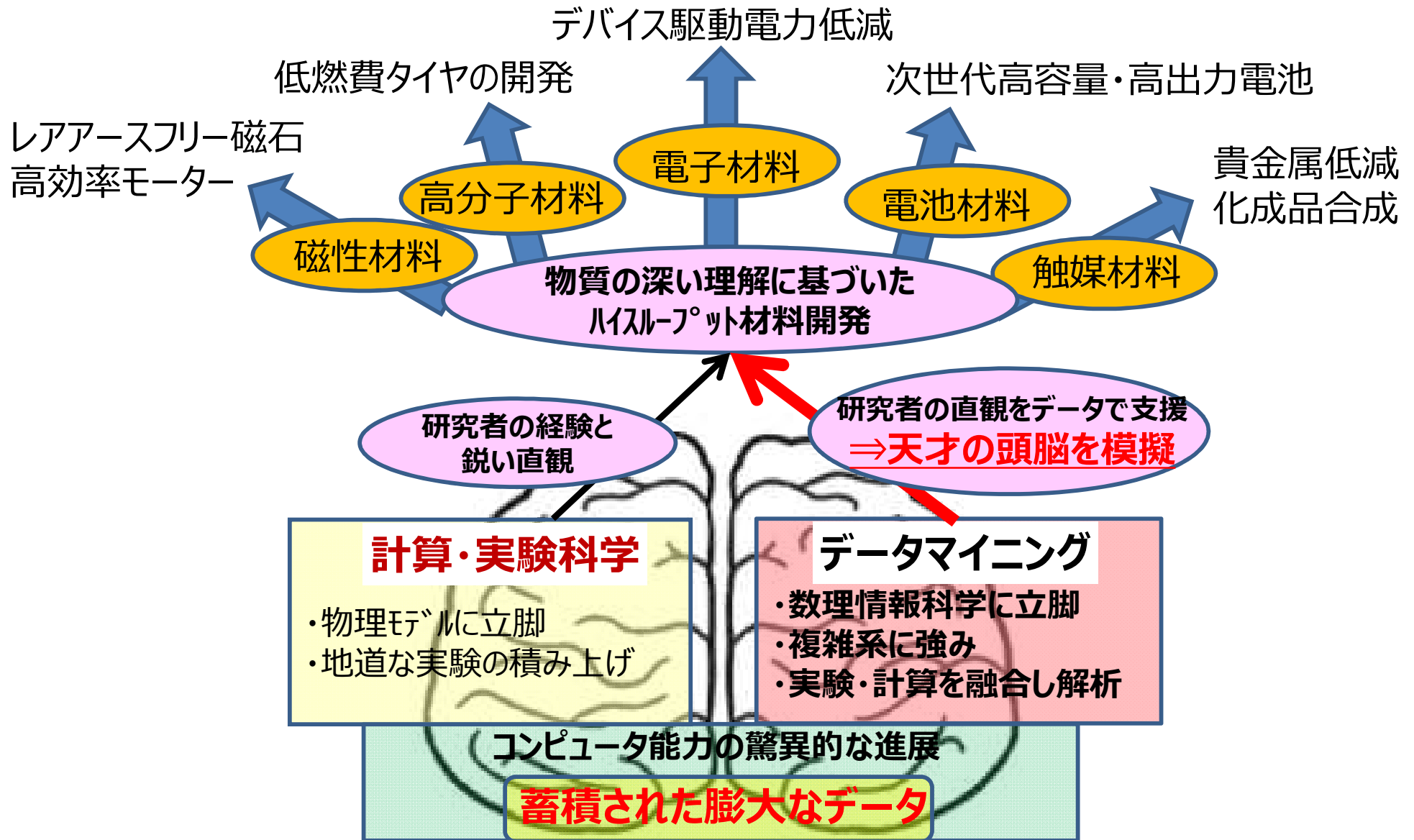
'12年10月：韓国B社・MIT論文公開
*この系の開発情報なく、突然特許公開前に論文発表



実験なしでデータ分析だけで
実験と同じ結果を導出
マテリアルズインフォマティクス的手法

米国“Material Genome Initiative”の中心研究者が深く関与し推進

マテリアルズインフォマティクス概念イメージ



既存材料を超える新たな材料を膨大なデータから発掘

マテリアルズインフォマティクス事業推進体制（案）

1. 戦略立案：MEXT（+関係機関）

マテリアルズインフォマティクスに関する全体の戦略企画

- ・施策実現に向けた**ロードマップの策定**
- ・データベースの**利用／連携ポリシー**をどうするか？

2. 研究推進：JST

多様な材料データから材料機能発現の指導原理を見出し体系化を物質・材料科学と統計・数理・情報科学の融合で実現

- ・知識発見のためのツールの開発
 - ・融合型の人材育成
- } マテリアルズインフォマティクスを活用した研究の加速

3. 基盤整備：中核機関NIMS

膨大な材料情報から新たな知識の発見に不可欠なデータを抽出し、研究に活用されるための環境整備と実装

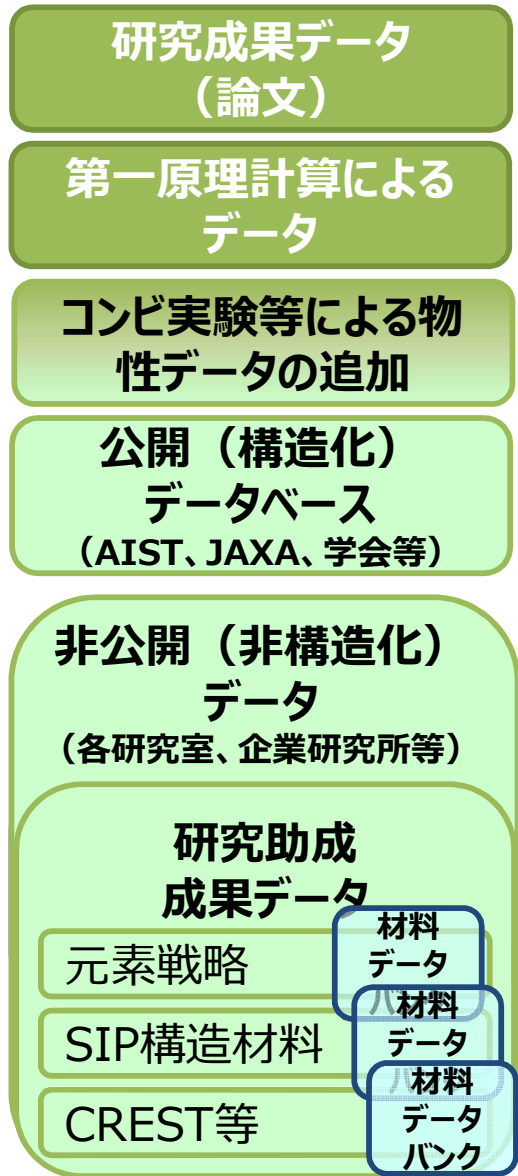
- ・データ収集・統合化
 - ・基幹データベースの整備、拡充
 - ・可視化のためのツール開発
- } NIMSを中核として
大学・産総研・民間企業の研究所等のデータを跨ぎ**クラウド化**

マテリアルズインフォマティクス項目

- 1. 戦略立案機能
- 2. データ活用型研究開発プログラム
- 3. データインフラ中核拠点整備プログラム

司令塔機能 (TF)

- 1. 全体戦略の立案
(人材育成、国際連携含む)



- 3.4 既存DBとの連携
- 3.5 MatNavi運営+改築
- 3.6 研究データバンク構築・運営



- 2.1 研究データを活用した研究助成 (融合FS型)
- 2.2 特定テーマに対し、研究データの収集からデータを活用までを目的とした研究助成(NW型)

- 3.1 論文等からのデータ収集 (現行のMatNaviの活動)
- 3.2 各研究室など固有の研究データ収集 (取りまとめ・連携の促進)
- 3.3 データエンジニア派遣による効率的な研究データの収集

マテリアルズインフォマティクスTF (案)

マテリアルズインフォマティクスTF

- プロジェクト全体の組織体制のあり方
- ロードマップの策定
- データの公開ポリシーの策定
(公開範囲、利用者制限、登録・課金制度など)

データ生成系研究者

- データの収集分野 (どういうデータが必要か)
- データの収集方法
- プロジェクトからのデータ供給 (連携) のあり方

データ連携系研究者

- 既存DB間の連携
(プラットフォーム、インタフェースのあり方)
- インフォマティクスに向けたDBのあり方

データ解析系研究者

- インフォマティクスの研究テーマ (手法)
- データ (ベース) のあり方

★TFでの検討項目 (短期 (案))

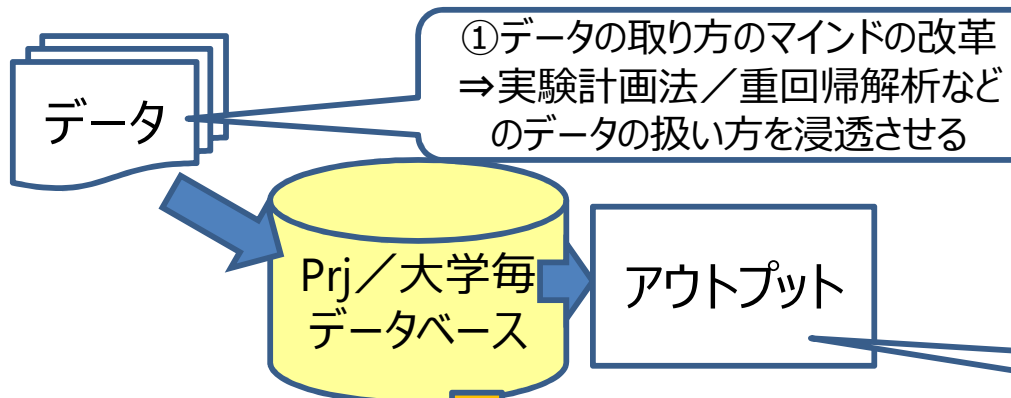
- NIMSの組織的なあるべき姿と求められる人の専門性の明確化
- インフォマティクス先導研究の研究チームとしての人材構成 (専門性) を明確化
- 実効的にTFがPrjの司令塔となるために必要な機能の明確化

★TFでの検討項目 (長期 (案))

- マテリアルズインフォマティクス研究の5年後・10年後のビジョンの策定
- 継続的なDBの充実に向けたDB運営組織 (NIMS) の運営方針の策定
- データを使いこなす研究コミュニティを構築するための人材育成方針の策定

マテリアルズインフォマティクスの制度設計上のその他諸課題

2.2 特定材料テーマでのデータ収集も含めた研究プロジェクト



⑫ 実効的にTFがPrjの司令塔となるための権限は？

⑨ 情報系の技術者の巻き込みをどうするか？
⑩ 材料データの使いこなせる人材育成をどうするか？
⑪ 如何に使いやすいインターフェースを作るか

② どのようなタイミングでデータを共有するか？
③ どうやってデータを繋ぐか？
④ データの構造化
⑤ データのタグ付 (オントロジー)

⑧ 基盤データベースの拡充をどうやるか？

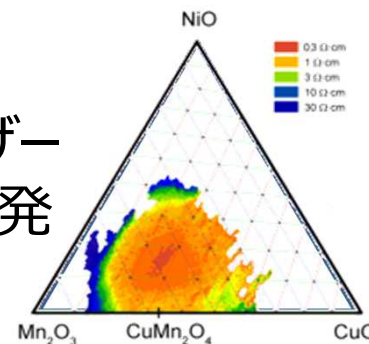
⑥ 誰がどうやってデータベース間を繋ぐか？
⑦ 公開ポリシーをどうするか？



基盤データベース

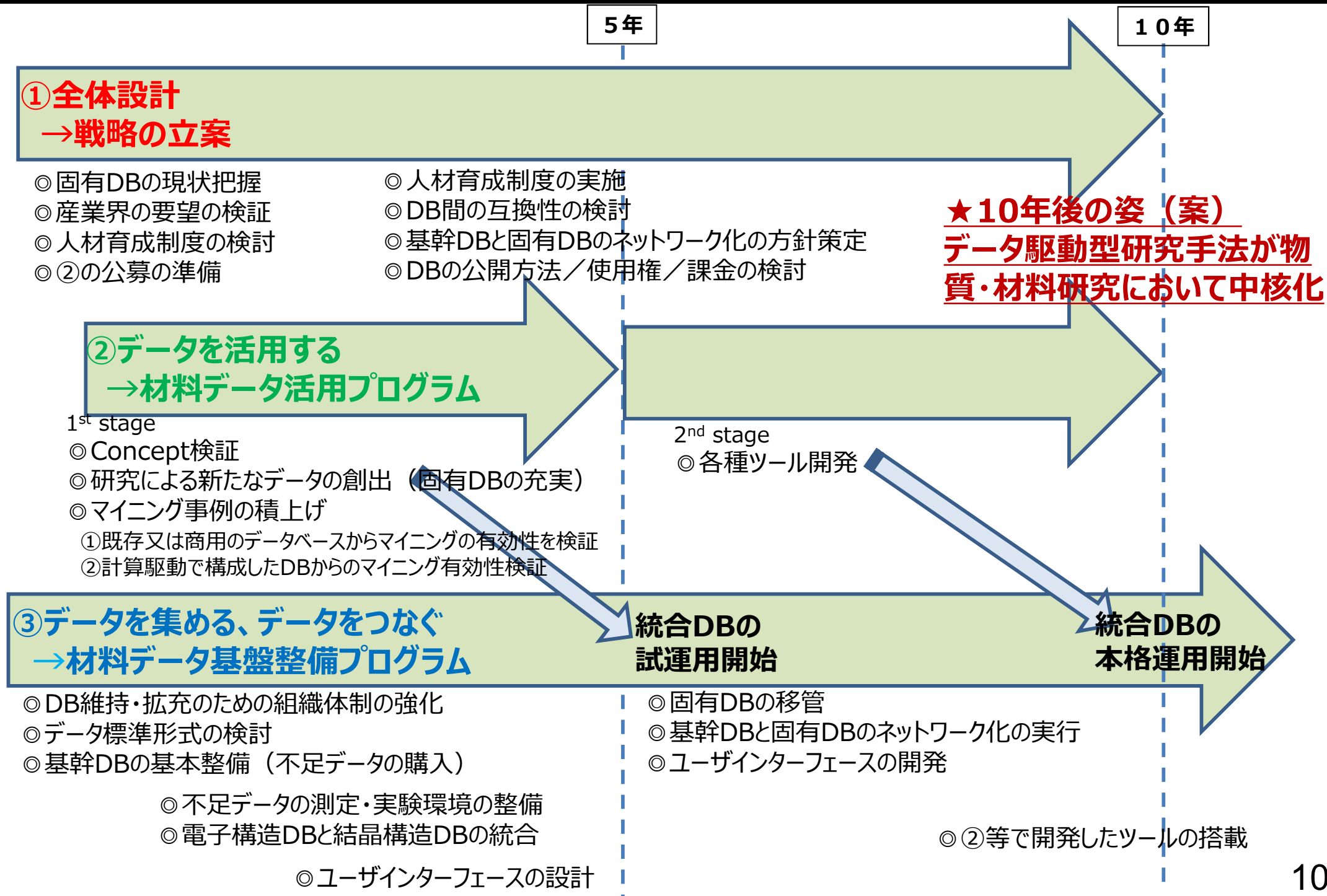
2.1 データ活用に特化した研究プロジェクト

データベース/ユーザー
インターフェースの開発



データマイニング手法検討の先導研究
データベースから情報を取り出す

マテリアルズインフォマティクスのロードマップ（案）



推進体制に関して

- ・タスクフォースで議論すべきポイントと司令塔として付与すべき機能
- ・研究プロジェクトに参画する研究者の構成に関して
- ・DB運営組織（NIMS）の持つべき役割とそれを担う研究者・エンジニアの構成に関して
- ・マテリアルズインフォマティクスプロジェクト遂行にあたっての諸課題に関する議論

プロジェクトの進め方に関して（ロードマップ等）

- ・ロードマップ（案）に関する妥当性
- ・ロードマップ（案）の漏れ・抜けなどがないかについて