

データ・基盤に関する文部科学省、 NIMS、経済産業省、AIST からの発表資料

文部科学省における マテリアル研究開発基盤に 関する取組

文部科学省 参事官(ナノテクノロジー・物質・材料担当)付

ナノテクノロジー・材料科学技術における文部科学省の取組

平成30年8月 ナノテクノロジー・材料科学技術研究開発戦略 策定
(ナノテクノロジー・材料科学技術委員会決定)

- Society5.0やSDGs等の実現に向けて直面する**多くの壁を次々と打破し、産業振興と人類の「幸せ」の両方に貢献**
- そのために、これまでにない機能や従来品を置き換える機能など、社会が応援したくなる**魅力的な機能を持つマテリアルの創出を推進**
- 社会の変革を強力に牽引する「**マテリアルによる社会革命（マテリアル革命）**」を実現

(現状の主な取組み)

(1) 社会変革をもたらす魅力的な機能を持つマテリアルの創出

元素戦略プロジェクト<拠点形成型>

令和2年度予算案 19億円(19億円)
(平成24年～令和3年)

我が国の資源制約を克服し、産業競争力を強化するため、レアアース等の**希少元素を用いない革新的な代替材料を創製**



<材料領域(拠点設置機関)>

- ① 磁性材料(NIMS)
- ② 触媒・電池材料(京都大学)
- ③ 電子材料(東京工業大学)
- ④ 構造材料(京都大学)

(2) 創出された革新的マテリアルを世に送り出すサイエンス基盤の構築

材料の社会実装に向けたプロセスサイエンス構築事業

令和2年度予算案 3億円(3億円)
(令和元年～令和7年)



革新的な機能を有するもののプロセス技術の確立していない材料を社会実装に繋げるため、プロセス上の課題を解決するための学理・サイエンス基盤として**プロセスサイエンスを構築(Materealize)**

(3) 研究開発の効率化・高速化・高度化を実現するラボ改革

ナノテクノロジープラットフォーム

令和2年度予算案 16億円(16億円)
(平成24年～令和3年)

ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する大学・研究機関が連携し**全国的な共用体制を構築**



※「創発的研究の場」の形成(先端共用研究設備の整備)において、物質・材料科学分野の基盤を整備

令和元年度補正予算案
50億円の内数

革新的材料開発力強化プログラム(M-Cube)【NIMS事業】

Society5.0実現の基盤技術であるナノテク・材料分野においてイノベーションの創出を強力に推進するため、

- ①**革新的材料創出のためのオープンイノベーションの推進**
- ②**世界の研究機関や企業の研究者が集う国際拠点構築**
- ③**全国の物質・材料開発のネットワーク化/研究基盤整備**

令和2年度予算案
20億円(19億円)
令和元年度補正予算案
14億円

密接な連携により各機関が推進

を一体的に行う機能を構築する

【物質・材料研究の中核機関】

(国研)物質・材料研究機構



物質・材料分野における**世界トップレベルの研究機関**として、全国の大学等と緊密に連携しつつ、物質・材料科学技術に関する基礎研究及び基盤的研究開発等の業務を総合的に実施

令和2年度予算案 138億円(136億円)
令和元年度補正予算案 37億円



国研等

産業界

背景

- ・ナノテクノロジー・材料科学技術は、基幹産業(自動車、エレクトロニクス等)をはじめ、あらゆる産業の技術革新を支える、我が国の成長及び国際競争力の源泉。しかし近年、先進国に加え、中国、韓国をはじめとする新興国が戦略的な資金投入を行い、国際競争が激化。
- ・「研究力向上改革2019」、「量子技術イノベーション戦略(中間整理)」等においても、研究環境整備の重要性について指摘。
- ・ナノテクノロジーに関する最先端設備の有効活用と相互のネットワーク化を促進し、我が国の部素材開発の基礎力引上げとイノベーション創出に向けた強固な研究基盤の形成が不可欠。

概要

- ・ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する大学・研究機関が連携し、全国的な共用体制を構築。
 - ・部素材開発に必要な技術(①微細構造解析②微細加工③分子・物質合成)に対応した強固なプラットフォームを形成し、産学官の利用者に対して、最先端の計測、評価、加工設備の利用機会を、高度な技術支援とともに提供。
 - ・本事業は、今後のイノベーションを支える量子やバイオ等の分野を推進するためにも重要な共用基盤であり、令和2年度も「研究力向上改革2019」等に基づき、先端的な装置や技術支援の全国共用を促進。
- ①: プラットフォームは一体的な運営方針(外部共用に係る目標設定、ワンストップサービス、利用手続の共通化等)の下で運営。
 - ②: 利用者のニーズを集約・分析するとともに、研究現場の技術的課題に対し、総合的な解決法を提供。
 - ③: 施設・設備の共用を通じた交流や知の集約によって、産学官連携、異分野融合、人材育成を推進。

【事業内容】

○事業期間: 10年(2012年度発足)

○技術領域:

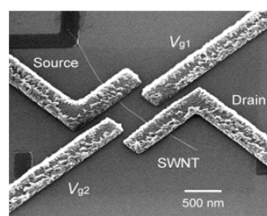
微細構造解析 <11機関>

超高圧透過型電子顕微鏡、高性能電子顕微鏡(STEM)、放射光 等



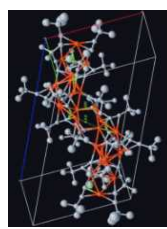
微細加工 <16機関>

電子線描画装置、エッチング装置、イオンビーム加工装置、スパッタ装置 等



分子・物質合成 <10機関>

分子合成装置、分子設計用シミュレーション、システム質量分析装置 等



【プラットフォームの目標】

- 最先端研究設備及び研究支援能力を分野横断的にかつ最適な組合せで提供できる体制を構築して、産業界の技術課題の解決に貢献。
- 全国の産学官の利用者に対して、利用機会が平等に開かれ、高い利用満足度を得るための研究支援機能を有する共用システムを構築。
(外部共用率達成目標: 国支援の共用設備50%以上、それ以外30%以上)
- 利用者や技術支援者等の国内での相互交流や海外の先端共用施設ネットワークとの交流等を継続的に実施することを通じて、利用者の研究能力や技術支援者の専門能力を向上。

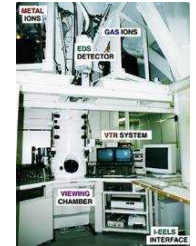
ナノテクノロジープラットフォームの推進体制（全26機関）

センター機関
物質・材料研究機構

代：代表機関
●：微細構造解析
●：微細加工
●：分子・物質合成

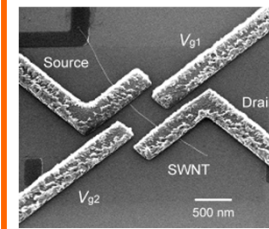
微細構造解析
＜11機関＞

超高圧透過型電子顕微鏡、
高性能電子顕微鏡（STEM）、
放射光 等



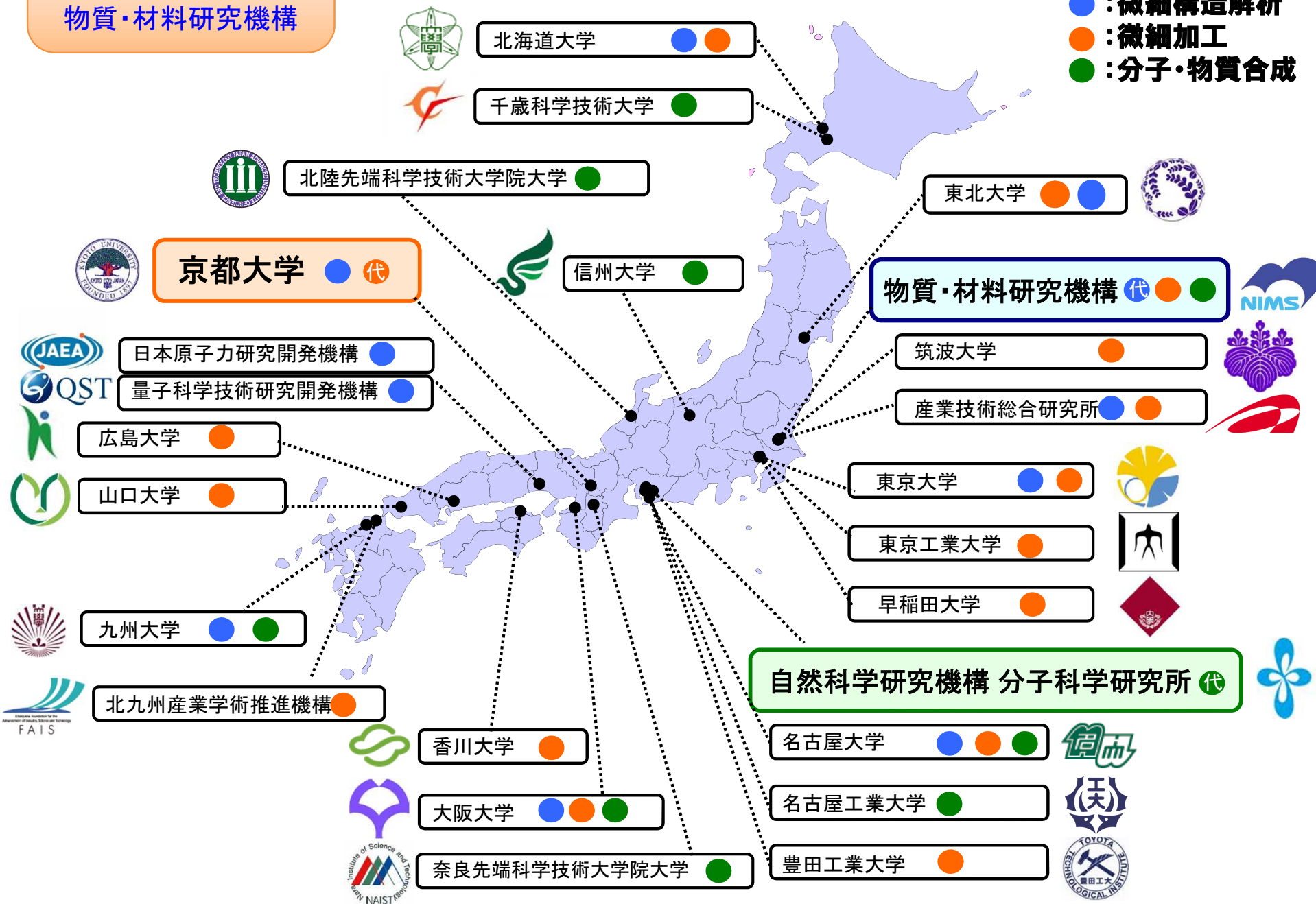
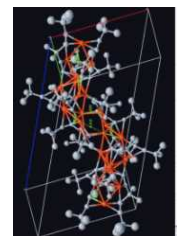
微細加工
＜16機関＞

電子線描画装置、エッチング
装置、イオンビーム加工装置、
スパッタ装置 等

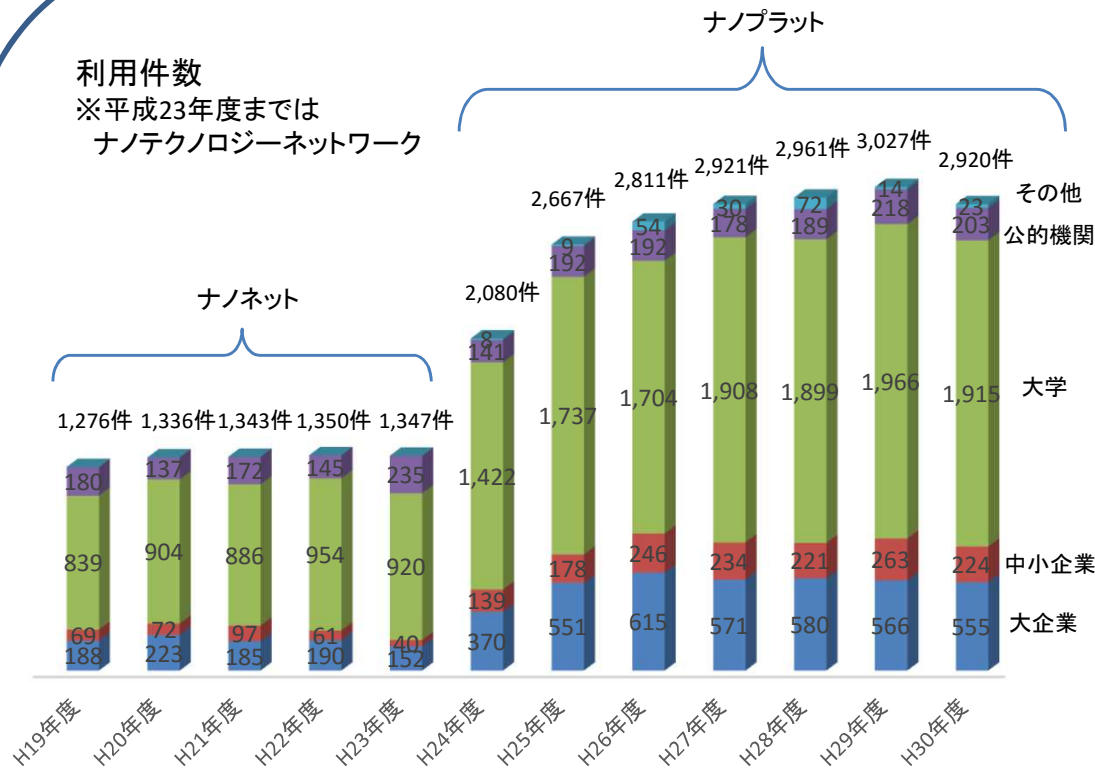


分子・物質合成
＜10機関＞

分子合成装置、分子設計用
シミュレーション、システム
質量分析装置 等



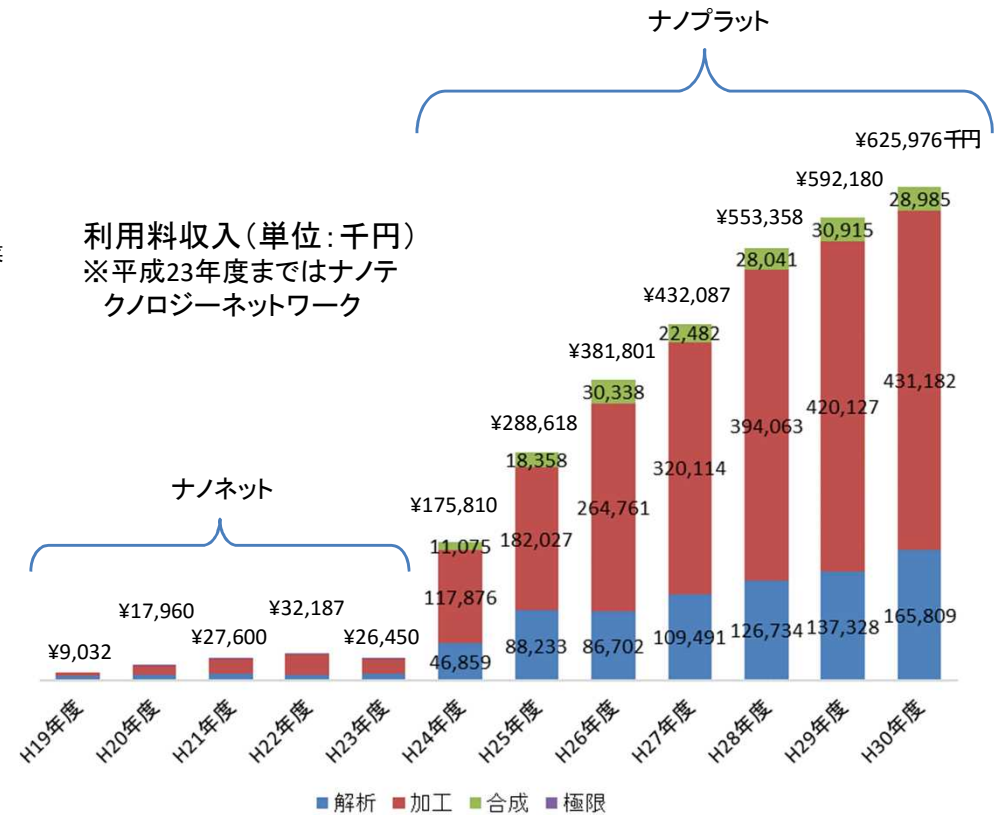
ナノテクノロジープラットフォームの利用件数等



<利用件数の推移>

○本事業においては、利用者から利用料を徴収することとし、徴収した利用料は、設備共用の推進に必要な経費（共用設備の修繕費、消耗品費、光熱水費等）の一部に活用することとしている。

○ナノテクノロジー共用基盤ネットワークの第3期（平成24年度～）にあたるナノテクノロジープラットフォームでは、前期のナノテクノロジーネットワークに比べ、利用件数及び利用料収入が大幅に増加。



<利用料収入の推移>

ナノテクノロジープラットフォームの課題と将来へ向けた方向性

ナノプラ展望WG報告書においては、以下のような課題と、将来へ向けた方向性が示されている。

※ ナノプラ展望WG報告書:わが国の先端共用・技術プラットフォームの展望と課題を、ナノテクノロジープラットフォーム事業の実績と経験にもとづいて示した報告書

➤ 現状の問題と課題

- 新しい技術領域への対応難、プラットフォームの装置群は老朽化が進行
- 高度な専門性を持った技術人材を恒常的に雇用・配置することが困難
- ✓ 先端設備・装置の戦略的な導入、既存設備の高度化・更新
- ✓ 技術者の専門性に関するインセンティブ維持・確保や処遇の改善、キャリアパスの構築

➤ 将来へ向けた方向性

- 日本全国のカバレッジ・アクセス性を考慮した分散ネットワーク的な配置
- 中核的なハブ(フルセットの施設・設備)と、各地の機関が蓄積する特徴的な技術領域を軸とした、「ハブ&スポークのプラットフォーム」体制⇒ 課題解決の最短化(研究力向上)
- 幅広い分野の研究者へ最先端の基盤的技術・情報を提供し、研究力を向上
- 長期的な視野に立ち、先端設備・装置の戦略的導入、既存設備・装置の高度化・更新、高度専門技術(支援)人材の安定的な確保
- ✓ 施設・設備、技術、成果の各情報をデータベース化しプラットフォーム内で共通運用

今後の施策設計に求められること： 技術プラットフォームの配置と体制

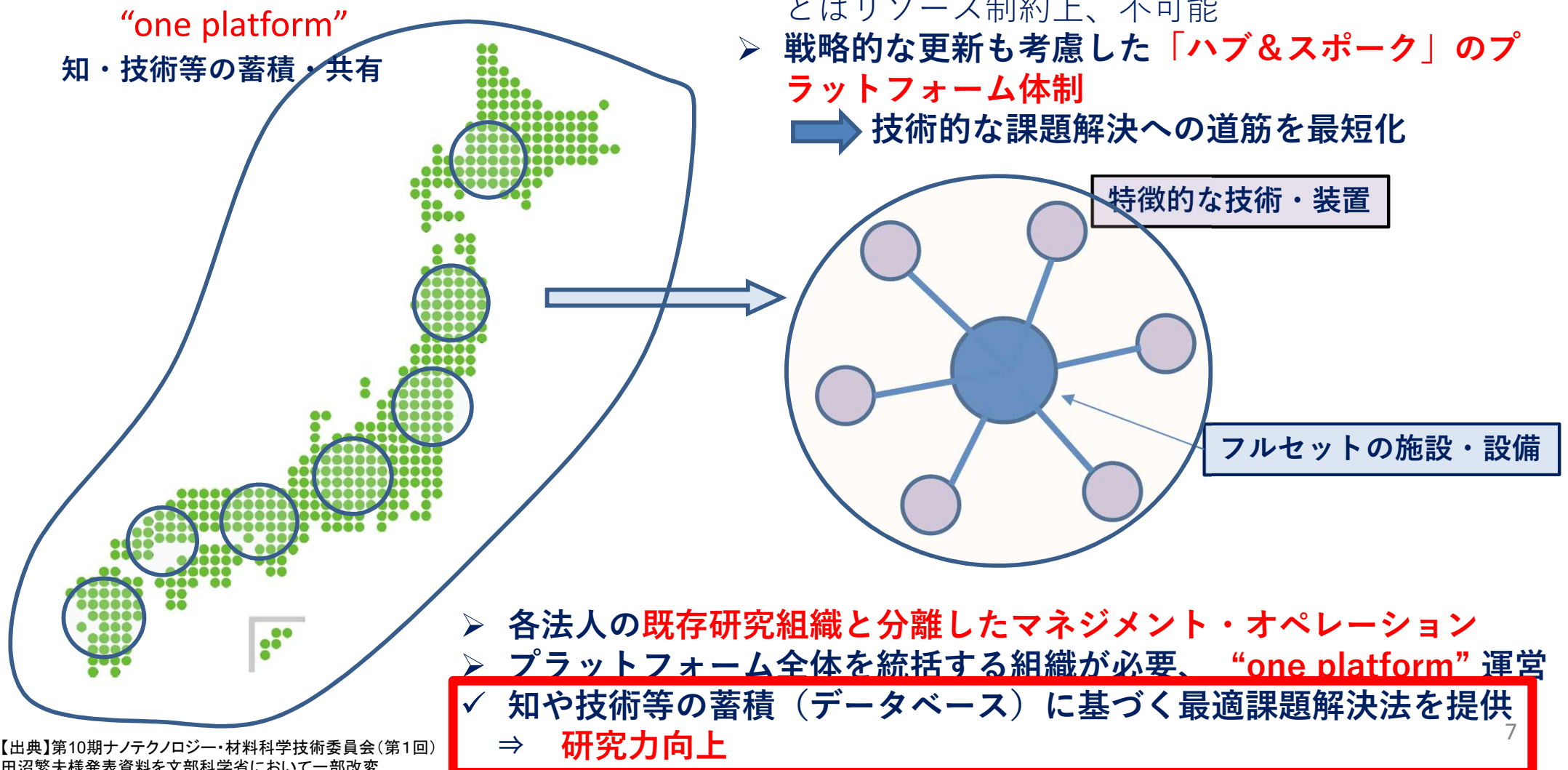
- 日本全国の研究開発者に対して最適な技術プラットフォームを提供

➡ 各地のカバレッジ・アクセス性を考慮した分散ネットワーク的な配置

- フルセットの施設・設備をすべての地に整備することはリソース制約上、不可能

- 戦略的な更新も考慮した「ハブ&スポーク」のプラットフォーム体制

➡ 技術的な課題解決への道筋を最短化



考えられる今後のデータ利活用構想

- これまでに蓄積されたデータを活かすため、**成果公開型利用**における**利用報告書等**はweb上で公開済み。
- 今後は、①**装置利用による実験条件が含まれる生データ**、②**一連の生データを統合したデータセットの公開**や③**データ駆動型(情報統合型)研究拠点との連携等**が課題

データの利活用に必要な成果事例等DBと検索システムの構築、外部連携へ

成果事例等、データ登録・更新

- 装置利用による実験条件が含まれる生データ
(公開可能なもの)
- 一連の生データを統合したデータセット(公開可能なもの)
- ナノプラ利用報告書
- ナノプラ成果等の詳細な解説記事
- ナノテク周辺情報

※c～eは達成済み

成果事例データベース



「データ駆動型(情報統合型)研究拠点」との連携

成果事例を検索して、ナノプラ事業Webサイトに表示

NanotechJapan
(事業総合案内)

実施機関紹介ページ
当該機関利用による
成果事例を表示



共用設備利用案内
イエローページ

設備詳細情報ページ
当該設備利用による
成果事例を表示



NanotechJapan Bulletin
(Webマガジン)

“成果事例アーカイブス”
成果事例の蓄積
検索、ソート等



情報統合型・材料開発
イニシアチブMI²I

戦略的イノベーション
創造プログラムSIP

and more ...

- ・成果事例をより広範な研究者、技術者に提供
- ・利用機会の増加
- ・オープンイノベーション促進

ナノテクノロジープラットフォームセンター機関作成

NIMSにおけるマテリアル データ戦略



物質・材料研究機構(NIMS)

理事長 橋本和仁

NIMS : 世界最大級の材料データベース



MatNavi

NIMS 物質・材料データベース

専門家がキュレーションした12のデータベース

無機材料



世界最大の無機材料データベース

	Atom Work	Atom Work Adv.
結晶構造	82,000	303,885
状態図	15,000	42,406
特性	55,000	365,517
更新	なし	年1回

Kakusan

SuperCon

CompES-X

高分子



33万物性
(2019.4現在)

国産高分子データベース

- ・ 学術論文からの精選データ
- ・ 人手による高品質データ
- ・ 過去20年の蓄積 (10人体制)

金属・合金



500種以上の鉄鋼材料の
機械的性質、クリープ、
疲労：82,700以上



CCT曲線図：214；硬度：
2213；金属組織図：627

材料データをめぐる国際競争が激化

マテリアルデータをめぐる世界の覇権争い

1. AIに強みを持つ企業 (IBM, Google, etc.,)

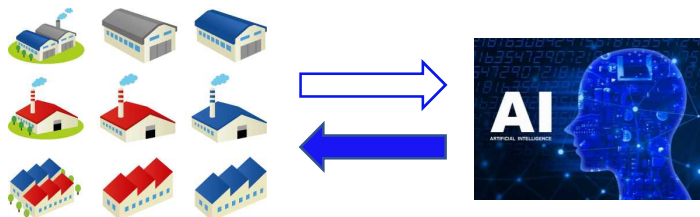
素材レース 相棒はIBM

化学と物理が重なるところに新ビジネス生まれる

JSR、量子計算とAI併用

日本産業新聞
2018年3月27日

材料企業からデータ提供を受け
付加価値を付けて返すビジネス



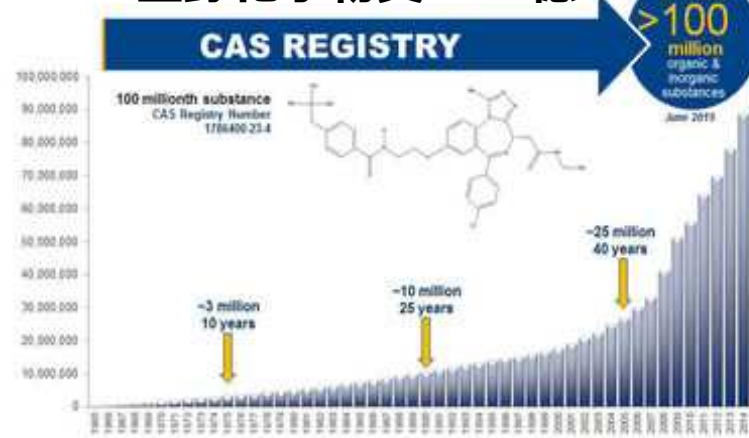
材料企業からデータを根こそぎ集める

2. 学術誌出版社 (エルゼビア、学会傘下の出版社)

米化学会



登録化学物質 > 1億

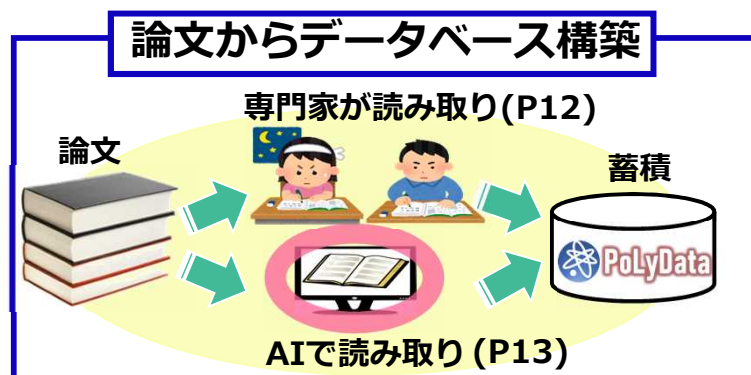


- ・ 完全電子化システムで情報分析
- ・ 人海戦術 (3000人体制?)
- 論文・特許情報 (合成法等)

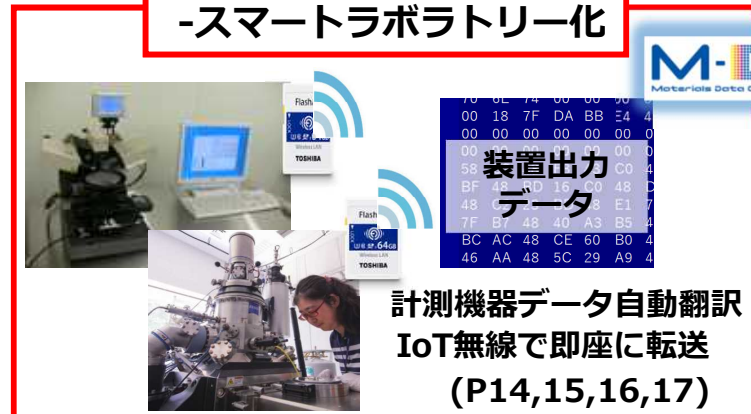
出版社の強みを活かしたデータ収集

NIMSの取り組み (マテリアルデータプラットフォーム)

データをつくる



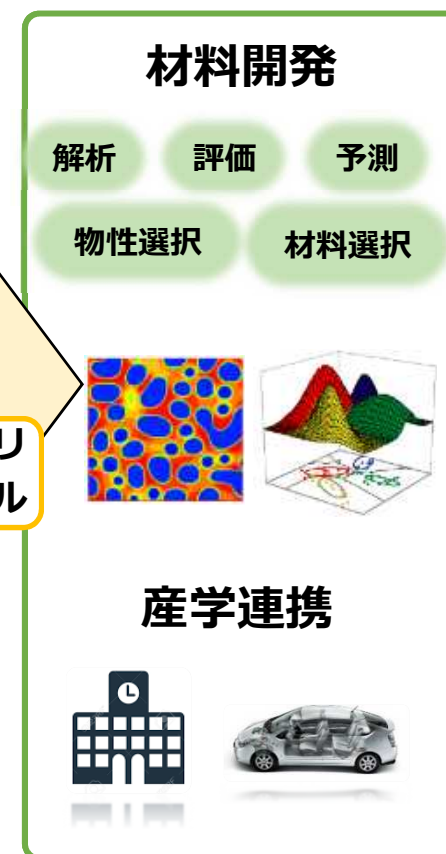
実験データの自動収集 -スマートラボラトリー化



データをためる

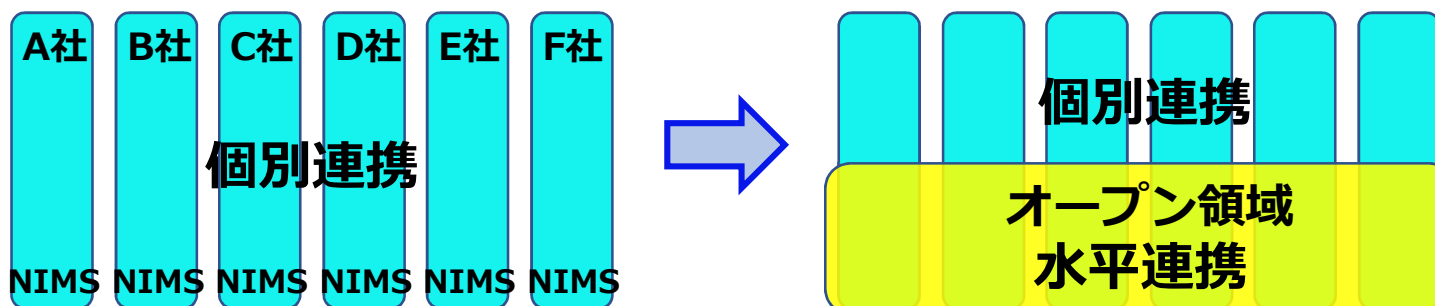


データをつかう



マテリアル研究所の特性を活かして世界
の材料データプラットフォームへ

NIMSを舞台とした同業多社による オープンイノベーション(MOP)



三井化学



三菱ケミカル

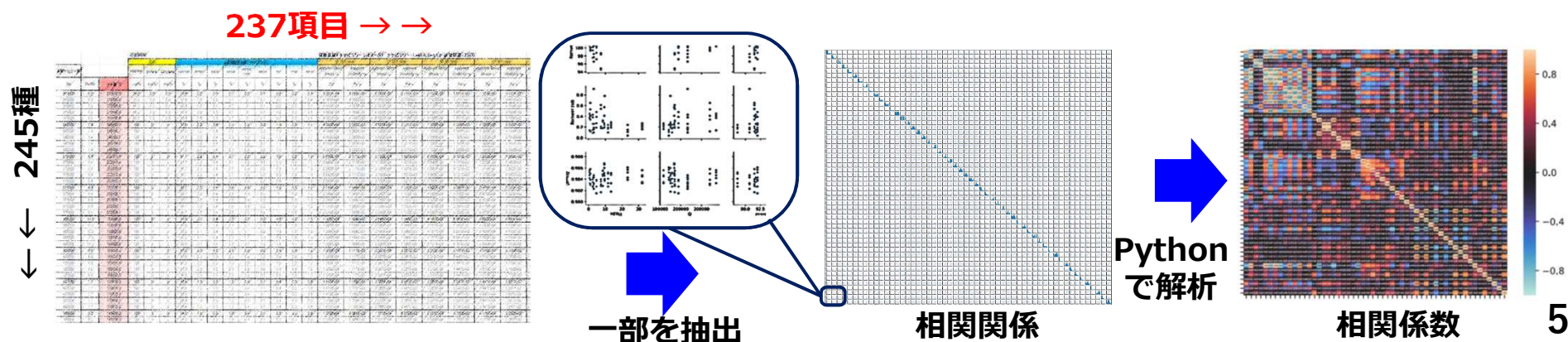


住友化学

AsahiKASEI

オープン領域：データを共有し、MI解析を共同で
 ・データは新たにNIMSが測定 ・ポリオレフィン ・サンプルを共有

化学MOPのデータセット：品質のそろったポリオレフィン実験データ約4万件



AI・データ活用に向けた化学産業 における新たな取組

令和2年2月26日
日本経済新聞 朝刊 1面

高分子を先例に国際競争力を強化： 産学官オールジャパンで結束

- 特許情報のAI用のフォーマット**・材料特性データベースの整備：**共通フォーマット**
- 具体的には、化学系企業のMI責任者とNIMSなどでAI用フォーマットを設計。その後、**化学系企業の知財部員・研究員等が特許情報からデータを手動で抽出**：**信頼性担保**
- データは**NIMSのデータベース**へ蓄積・保管：
Polyinfoなど**他のデータベースとの連結**

企業の素材開発の迅速化のため、各社のAI活用をサポートする共通情報基盤を構築し、日本企業に提供

(連絡先) 素材産業課 沼舘室長、岸補佐
TEL 03-3501-1737

眠る特許 素材開発に活用
三菱ケミカルなど20社 期間大幅短縮へ

三菱ケミカルなど化学大手約20社は、国内の特許情報を活用して先端素材を開発するシステムを2021年度から共同で運用する。幅広い情報を人工知能(AI)で分析し、素材の製造方法を開き出す狙いだ。従来の手

法で10年程度かかる開発期間が数カ月と最大50分の1になる可能性がある。欧米勢も素材開発の効率化に乗り出すなか、日本企業は共通データベースで協力して対抗する。

素材業界では、次世代通信規格「5G」や電動車両向け部品などに使われる先端素材の需要が急増する見込みで、開発のスピード感が試される。各社は実験や論文などのビッグデータをAIで分析する「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」を開発する。システム

は国立研究開発法人の物質・材料研究機構(NIMS)が管理し、参加企業などが有料で活用する仕組みにする方向だ。特許権で保護されている素材自体は許諾なしに製造して実用化できないが、その素材を製造する過程の化学反応などで得られる化合物の情報は広く活用できる。各社はこの点に着目し、国内の特許情報から化合物の製法と物性をデータベース化する。当初は約10万のデータから始め、30年度ま

-  **すべて外注**



參考資料

物質・材料研究機構 (NIMS)



1956～ 金属材料技術研究所

1966～ 無機材質研究所

2001～
NIMS

人員

研究系職員	841	(395)
技術系職員	448	(65)
事務系職員	377	(104)
計	1666	(564)

(カッコ内は定年制職員数)

財務 (2018)

総収入： 294億円

(内運営費交付金143億円)

人件費支出 (運営費交付金)： 62億円

研究費支出： 110億円

(内運営費交付金 39億円)



千現地区 (旧金材技研)



並木地区 (旧無機材研)

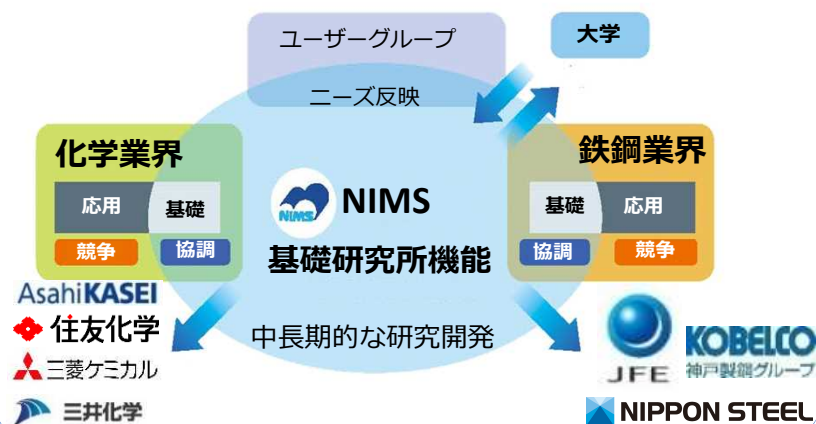


桜地区 (1995年～)

M-cube(M³) プログラム

産業界、研究機関によるオープン
イノベーションを推進

MOP Materials Open Platform



世界中の人・モノ・資金が集まる
国際研究拠点を構築

MGC Materials Global Center



センサ・アクチュエータ研究を中核とした国際
研究拠点の形成によるSociety5.0の実現の加速

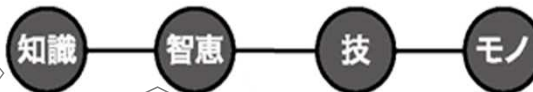
データプラットフォーム

世界最高水準の研究基盤

MRB Materials Research Bank

世界最高のデータバンク

物質・材料データ
プラットフォームの構築



地方創生に貢献

知のネットワークの構築



魅力的な研究環境の共用

世界最先端計測設備の整備



マテリアルデータプラットフォーム フォームの環境整備

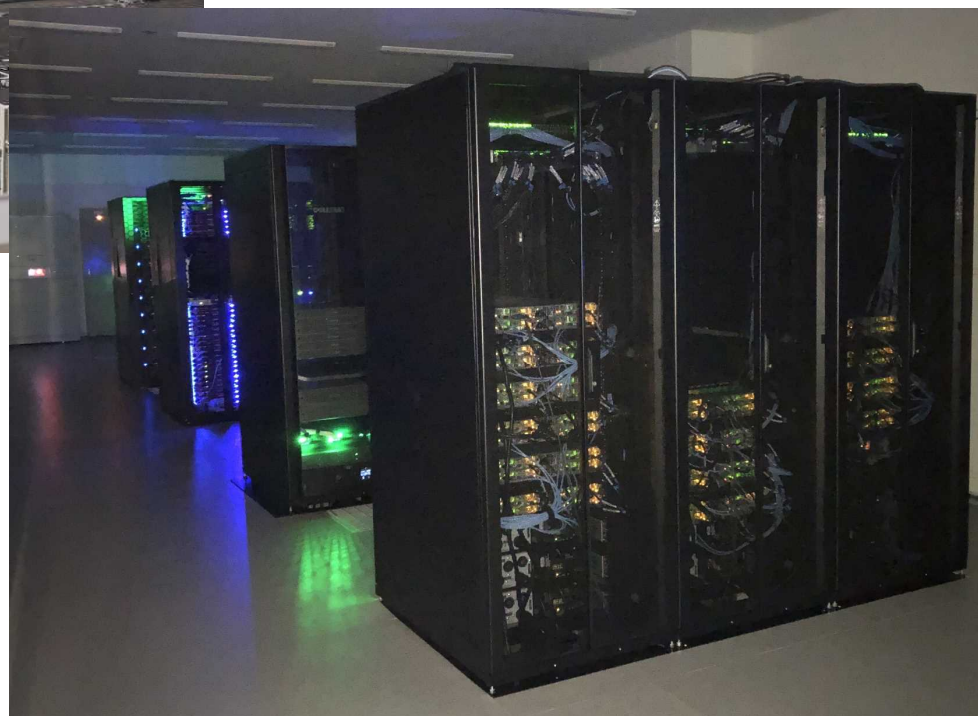


M-cube (M³)棟
4974.6/m²
平成28年度補正予算

データサーバー

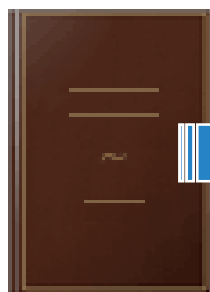
10PB/0.5PFLOPS

平成29年度補正予算



NIMS高分子DB, PoLyInfo

16年の歴史と培われてきた特徴



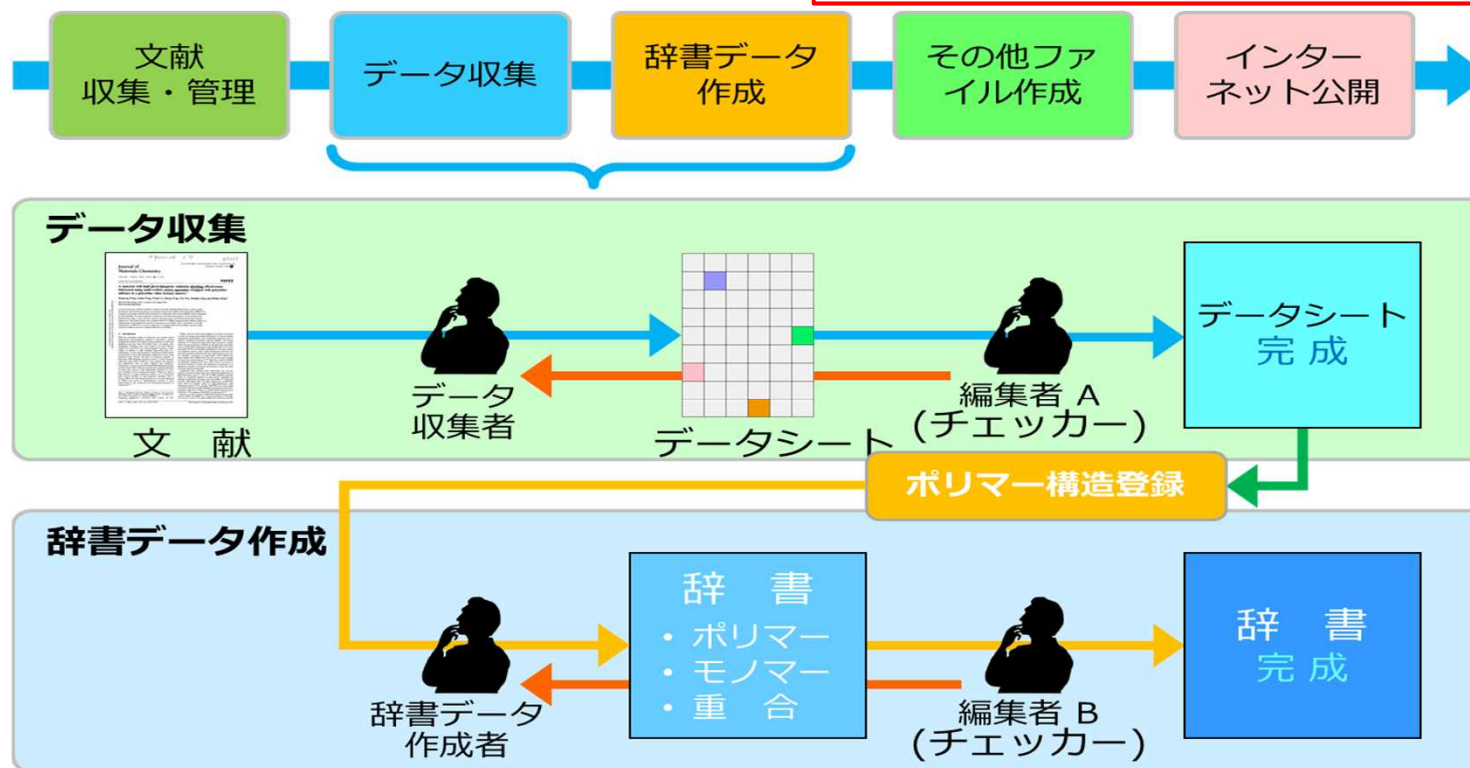
高分子データハンドブック
(1986刊) PoLyInfoの発端

2003年4月
科学技術振興事業団
(当時) からNIMS
へ譲渡

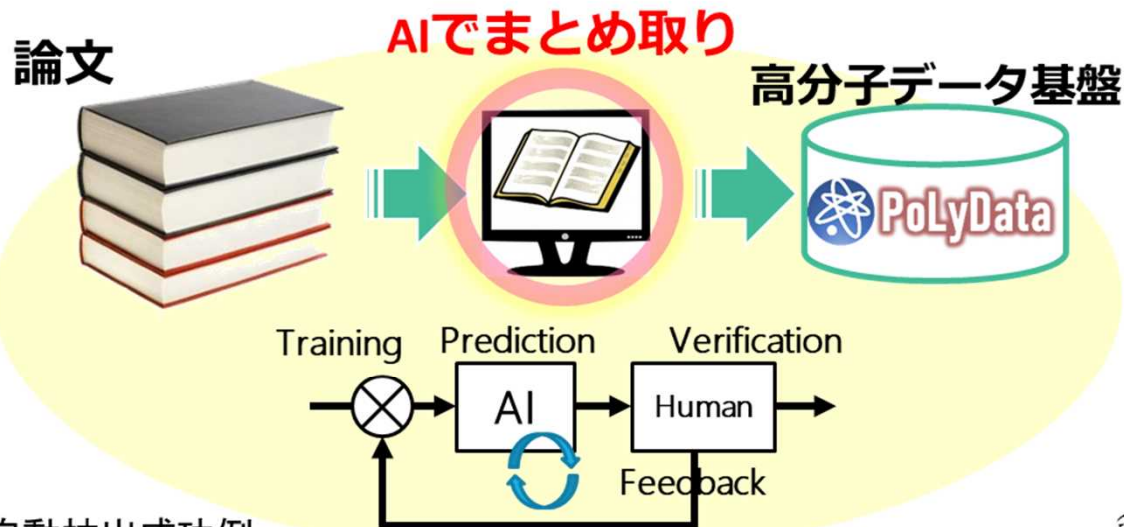
公開データ数	
ホモポリマー	16,228
コポリマー	5,871
ポリマーブレンド	2,005
コンポジット	2,351
モノマー	17,825
物性ポイント	334,738
文献データ	16,857

2019年4月
サンプル数 26,455
物性値 334,738

世界でも稀な高分子データベースに成長



テキストデータマイニングによる 論文からの自動データ抽出



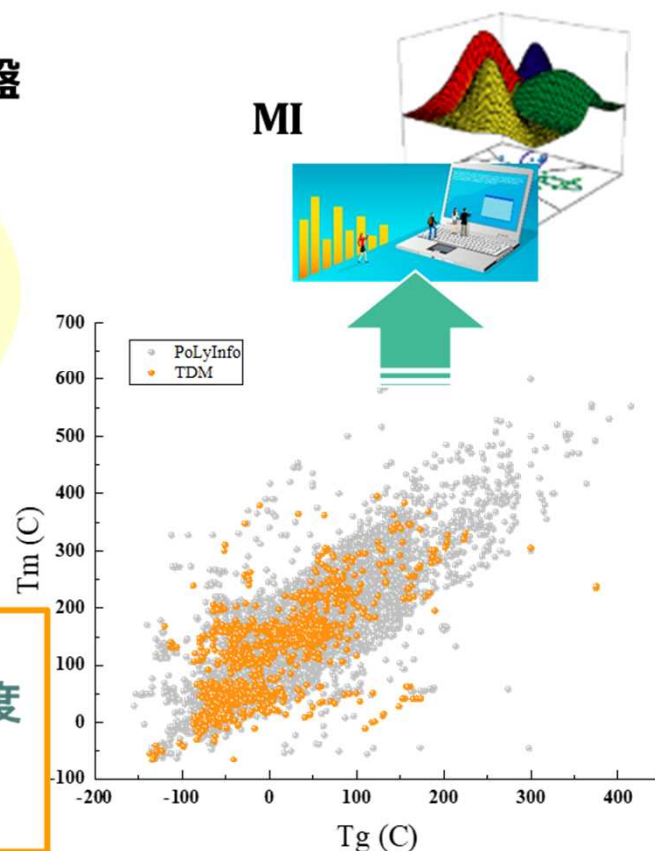
自動抽出成功例：

- ・ 平均分子量 21,169 点
- ・ 熱分解温度 10,085 点
- ・ ガラス転移温度 7,581 点
- ・ 溶融温度 5,583 点
- ・ 破壊伸び 4,193 点
- ・ 引張弾性率 4,187 点
- ・ 結晶化度 3,349 点
- ・ 引張破壊応力(強さ) 3,318 点
- ・ 結晶化温度 3,144 点
- ・ 溶融熱 3,035 点
- ・ 電気伝導度 2,209 点
- ・ 密度 2,083 点
- ・ 結晶化熱 1,371 点

61,046論文から
・ 7,581点のガラス転移温度
・ 5,583点の融点
を自動抽出

今この瞬間も増量中

85物性 (対PoLyInfo
72.0%)
86,415点 (同 25.8%)



共同研究機関

理化学研究所

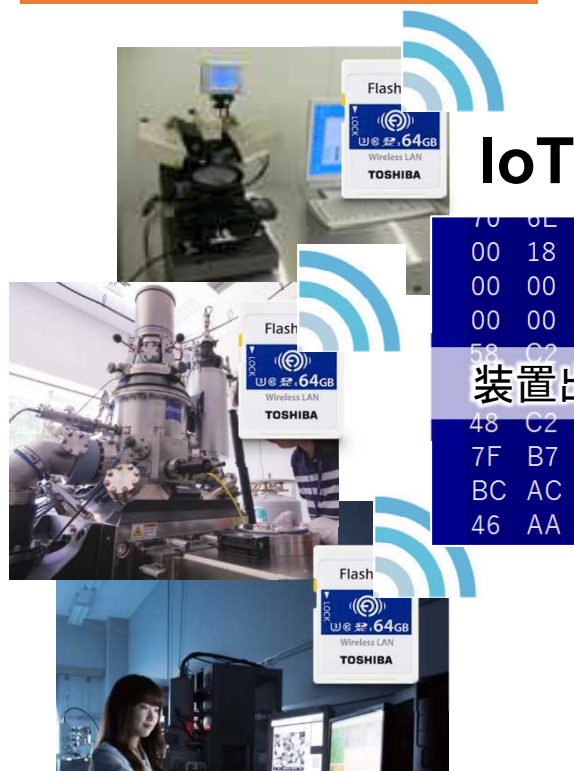


国立大学法人
奈良先端科学技術大学院大学
NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY

実験データの自動収集

測ったそばから**使える形**でためる！

実験装置いろいろ



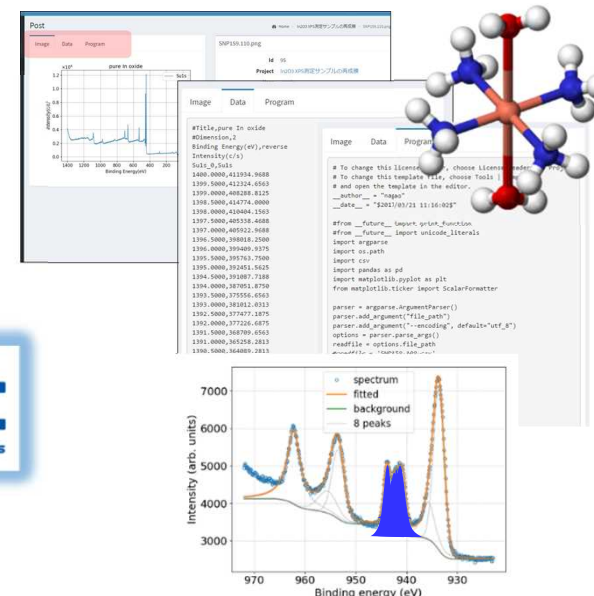
装置出力データ

```

70 8E 74 00 00 00 0
00 18 7F DA BB E4 4
00 00 00 00 00 00 0
00 00 00 00 00 00 0
58 C2 48 F8 43 C0 4
48 C2 23 BD 48 E1 7
7F B7 48 40 A3 B5 4
BC AC 48 CE 60 B0 4
46 AA 48 5C 29 A9 4
  
```

M-DOC
Materials Data Conversion Tools

データをためる



実験データを解析に使える形に！
計測機器メーカーの協力で、XPS及びXRD
について**自動翻訳ツール**を製作し、一般公開

機械可読性を高める計測データのメタ情報 抽出ツールの公開プラットフォーム



ダウンロードサイト

 <https://www.nims.go.jp/MaDIS/about/M-DaC.html>

AIや機械学習で利用しやすい計測データの創出・蓄積・共有をより効率的に、より簡便に

X線光電子分光 (XPS) と X線回折 (XRD)



変換 ～Convert～

- ・ 機械固有のバイナリーデータから人間可読かつ相互運用・再利用可能なデータへ
- ・ 計測データのスペクトルなどによる可視化

抽出 ～Extract～

- ・ 再現測定などに必須となる最小限度の計測条件を「主要パラメータ」として抽出
- ・ 計測装置独自の用語を一般的な用語に共通化した主要パラメータの再定義

出力 ～XML Output～

- ・ メタ情報を付与した主要パラメータのXML形式の出力

データ強化に向けたスマートラボトリ化

AI, IoT, ビッグデータ, ロボット技術等を導入し
研究開発環境をスマート化

生産性の高い材料研究 環境の実現

- 研究の効率化・高速化・省力化
- AI・MIを用いた材料研究開発の促進
- 匠の技のデジタルアーカイブ化による技術伝承
- 単純作業からの解放

2019年度に試行的取り組みを開始

数千種類の電解液添加剤の組合せから、
リチウムイオン電池の性能向上に資する
全く新しい電解液添加剤を発見！

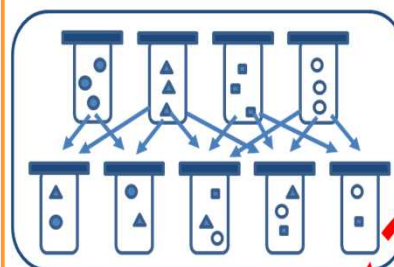
2020年度より本格実施を目指す

令和元年度補正予算を活用

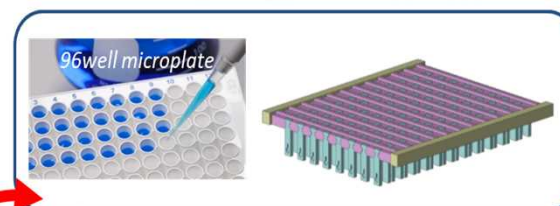
取り組み 事例

リチウムイオン電池用 電解液添加剤の探索

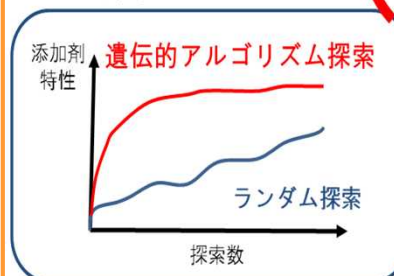
電解液ライブラリーの高速合成



マルチ微小電極による高速評価



探索アルゴリズム



連動制御
自動化



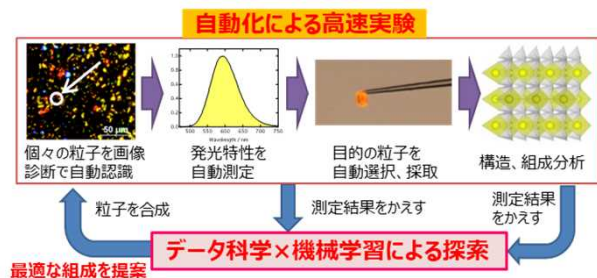
オートメーション運転 (≒1週間)

従来の人手による手法
1日10サンプル

試行的取り組みの成果
1日1000サンプル

その他のスマートラボトリ（令和元年度補正予算）

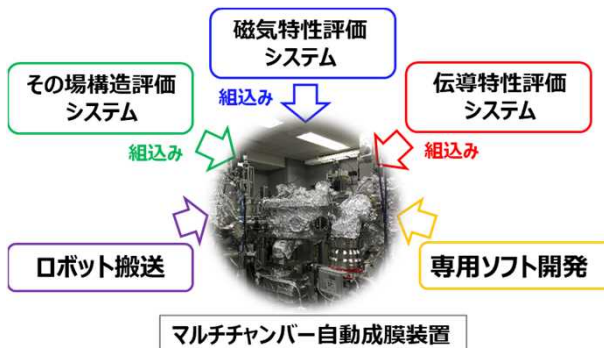
レーザー励起用蛍光体開発 ハイスループット蛍光体探索システム



多試料のスクリーニングと自動解析

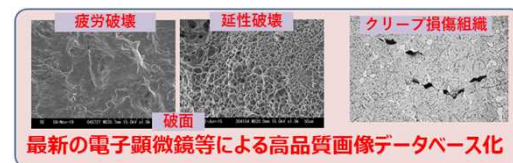
多試料の解析を自動化し、機械学習と組み合わせて
高効率で探索

超低消費電力メモリ開発 ハイスループット成膜・評価システム

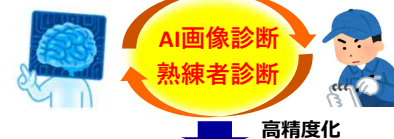


AI・ロボットを活用した自律運転
機械学習による積層の最適化
ハイスループット自動成膜・評価による高品質化

「匠の目」システムの開発 組織・破面画像の自動AI診断システム

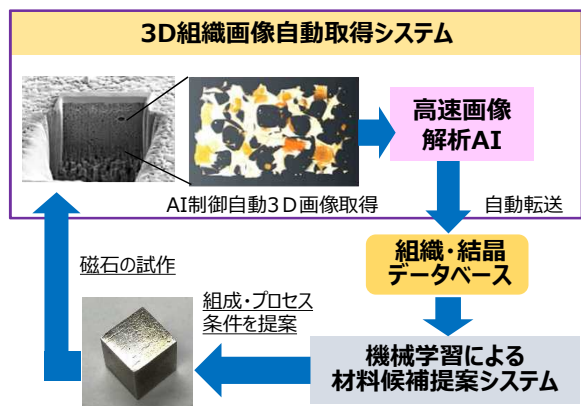


画像データからの機械学習 画像認識・解析技術



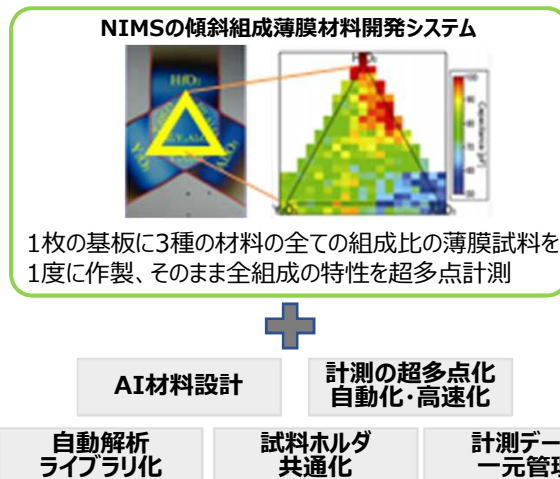
育成に20～30年かかる「匠の目」の技術継承をAIで

EVモーター用新規材料開発 ハイスループット新磁石材料探索統合システム



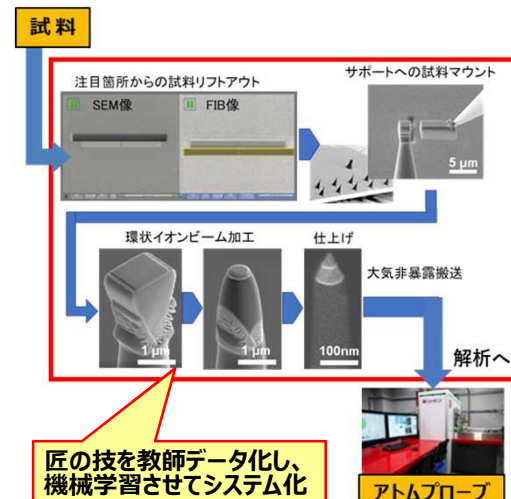
新規磁石開発のボトルネックであった
微細組織3D情報の取得時間を大幅短縮

6G通信用エレクトロニクス材料開発 傾斜組成薄膜ハイスループット探索システム



従来の実験手法より大幅な高速化

「匠の技」システムの開発 アトムプローブ用スマート試料作製システム



匠の技を教師データ化し、
機械学習させてシステム化

アトムプローブ

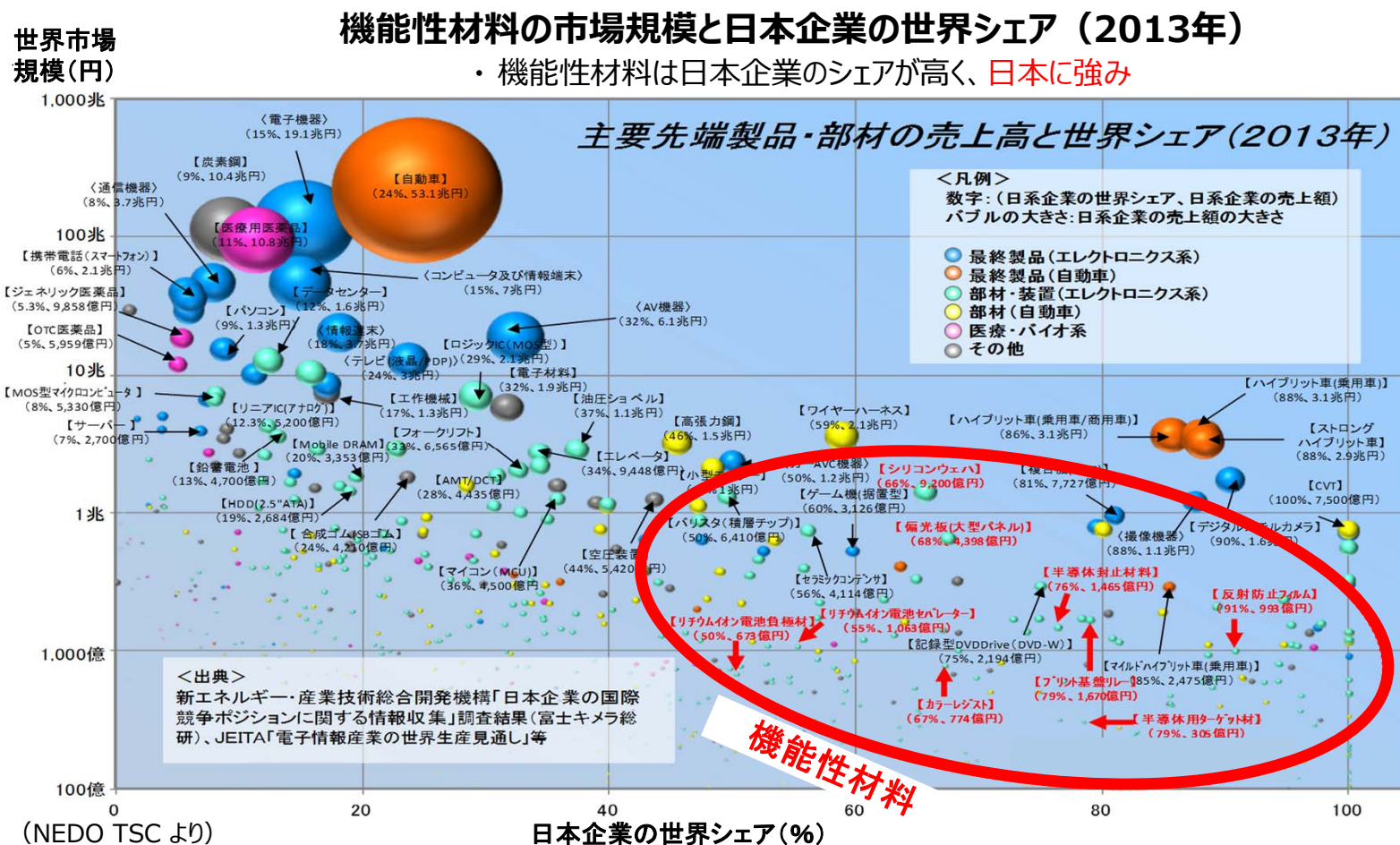
加工条件を自律的に判断して自動加工

マテリアルデータ活用に関する取組について

製造産業局
素材産業課

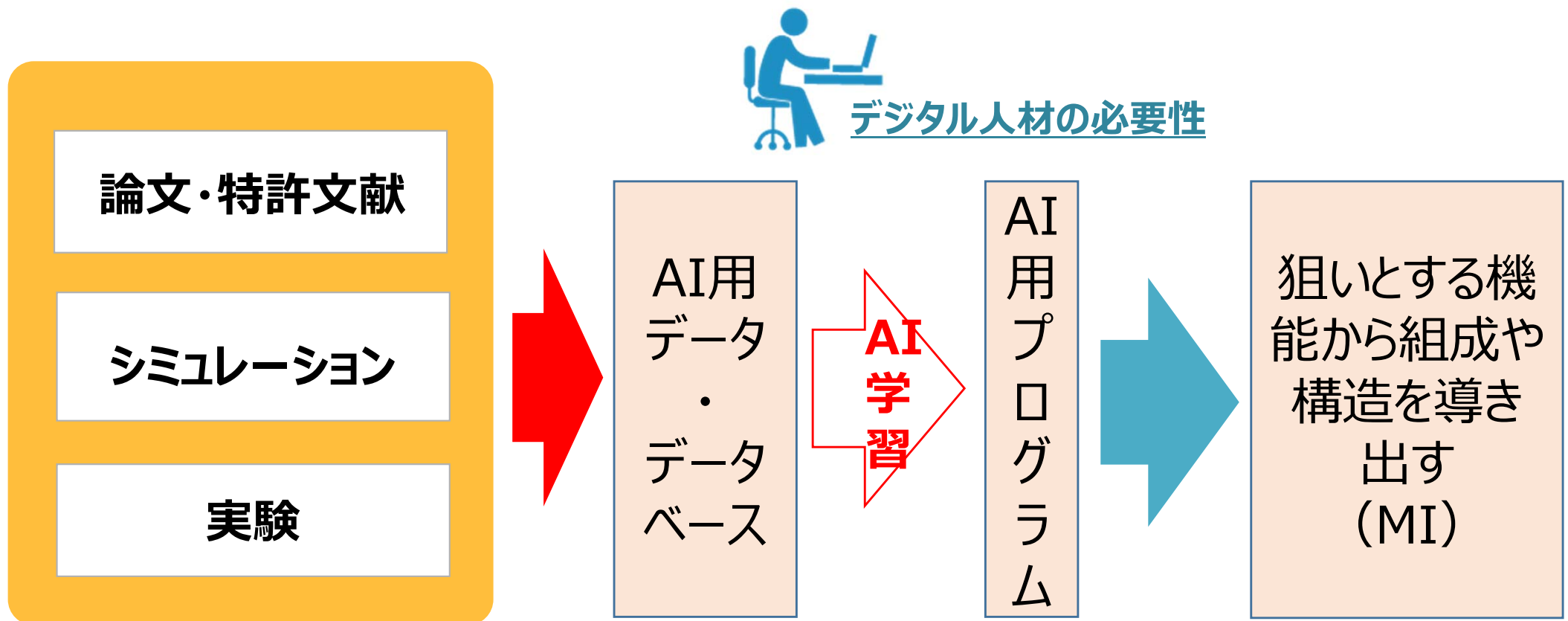
素材開発のデジタル化

- 機能性素材産業は個々の製品の市場規模は小さいものの、世界で高いシェアを有しており、日本が強い分野
- 諸外国の材料開発の追い上げが激化する中、引き続き国内素材産業の競争力を維持・強化していくためには新素材の実用化までの時間やコストを削減していくことが重要
- 加えて、世界的なAI技術の進展や人海戦術による研究開発加速の限界もあり、**材料開発のデジタル化**対応が急務に



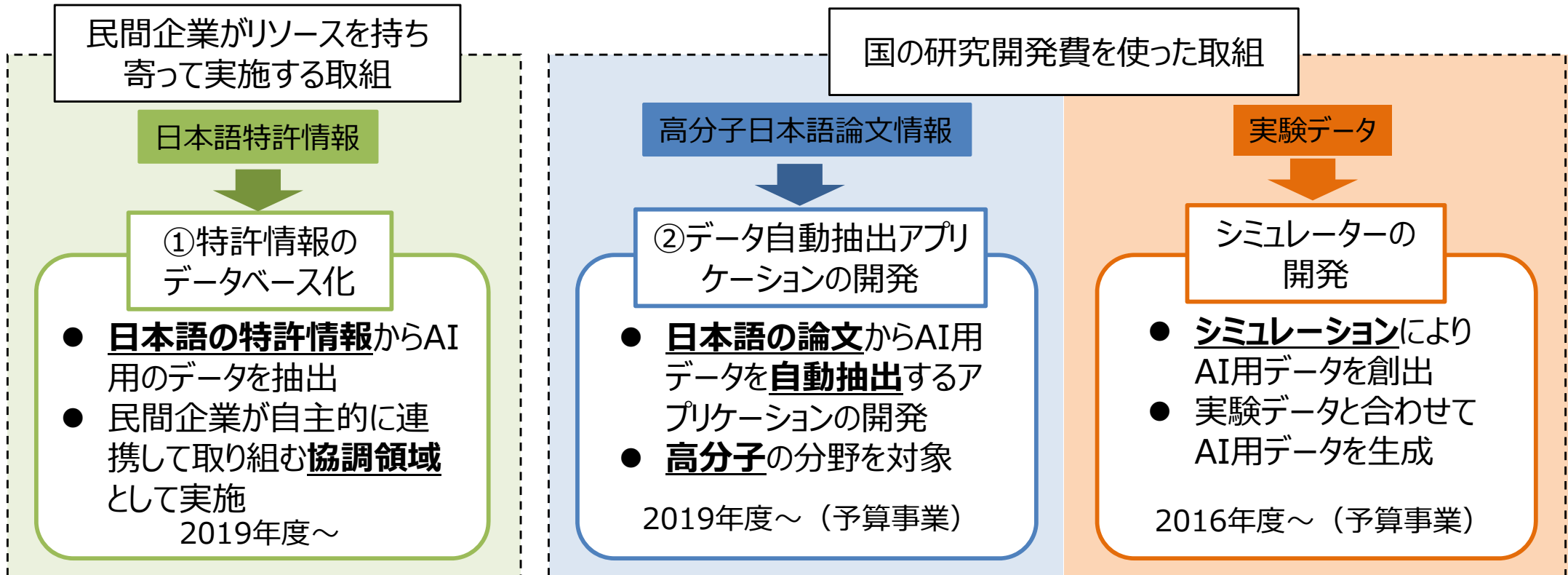
素材開発のデジタル化に求められるもの

- 材料開発のデジタル化には、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）が有効
- MIは材料の知識と情報・統計の知識を用いて、狙いとする機能から組成や構造を効率よく導き出す手法
- MIの実施には、多くのAI用データの準備、データを格納するデータベースの整備などのほか、MIを実施できるデジタル人材が必要



AI・データ活用による素材開発力の強化

- AI・データ活用の取り組みとして、特許情報からのAI用データの整備、論文からのデータ自動抽出、シミュレーターの開発を行っている
- いずれも官民連携の取り組みとしてAI・データ活用のための共通基盤を構築する



- ✓ 各社のAI活用をサポートする共通情報基盤を構築し、日本企業に提供
- ✓ 企業の素材開発の迅速化に貢献

(参考) データ活用のイメージ

競争領域

企業



MI実施

企業独自のDB等

利用

抽出

社内文書・論文等

データ創出

仮想実験シミュレータ

②

データ自動抽出
アプリケーション

適用

NEDO：超先端材料超高速開発基盤技術PJ成果

①

特許情報DB化の取組

特許情報DB

MI用データ
抽出

特許文献

応用

協調領域

①特許情報のデータベース化

- 公開されている「特許情報」を、各企業がMIで活用できるようにデータベースとして整備し、利用を促進するもの。
- MIに積極的に取り組んでいる化学系企業が約20社が集結し、MIに有効なデータの整理ルールやデータベース設計などを検討中。

【参加体制】

- －事務局：METI
- －アドバイザー：NIMS
- －検討主体：化学系企業（20社程度）

【実施内容】（全参加企業で検討・実施）

（設計作業）

- －データベースのフォーマット
- －データ抽出のルール
- －データベースの利活用方法
- －スケジュール

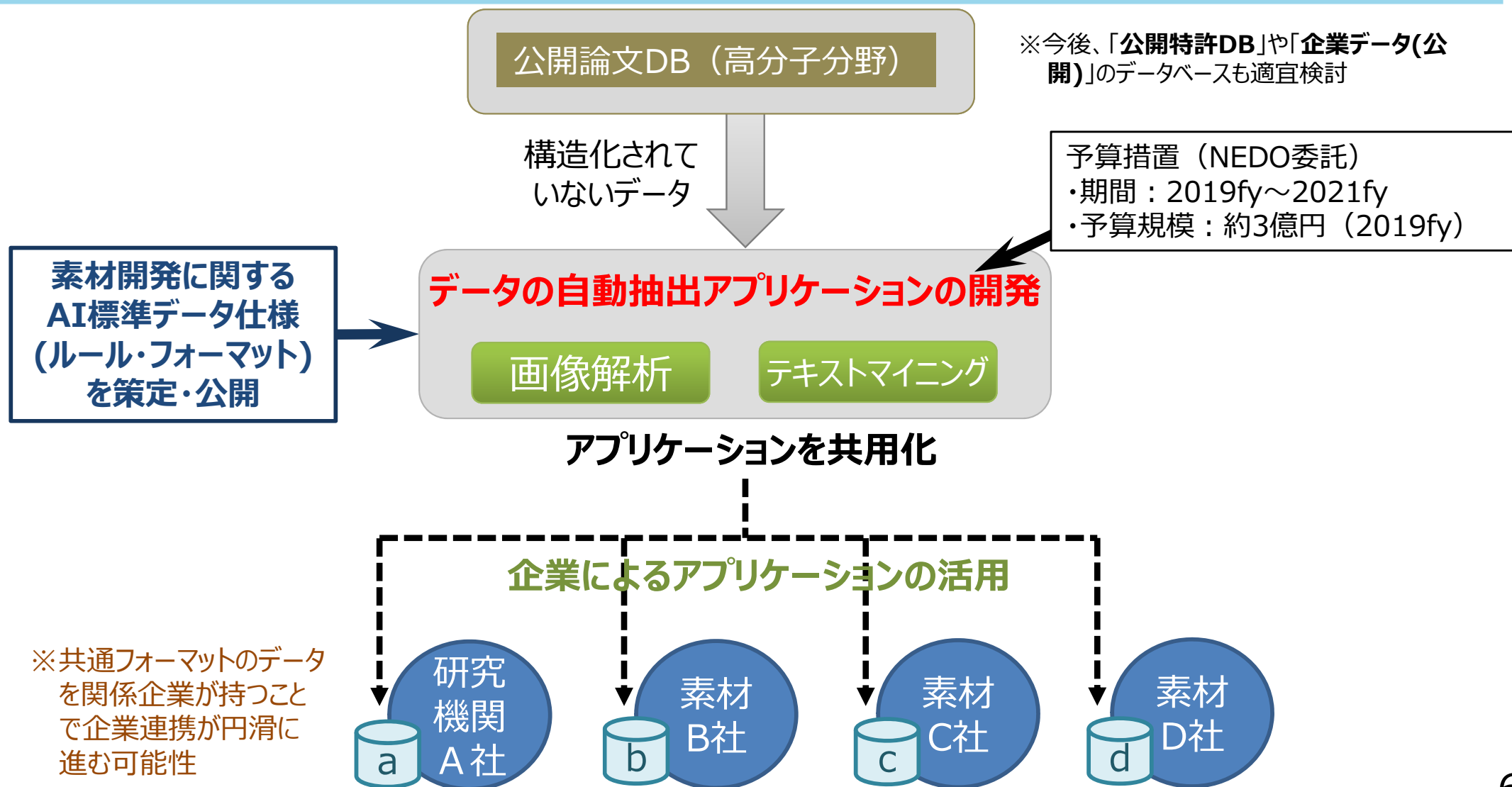
（データベース入力作業）

- －参加企業が手入力により抽出

②データ自動抽出アプリケーションの開発（１）

- ・ NEDOへの研究開発委託により、AI向けフォーマットで論文から自動的にデータを抽出するアプリケーションを開発（2021年度完成予定）

⇒公表情報への適用のほか、競争領域で各企業内での独自データの整備にも有効



②データ自動抽出アプリケーションの開発（２）

- 高分子分野の論文等のすでに公開されている材料データや、素材企業が保有し、共有できる材料データを、AIが機械学習できる状態にする（構造化：フォーマット整備）ためのソフトウェアの開発を実施する。2019年度より、標準データフォーマットを検討。
- AIを活用した材料開発（マテリアルズ・インフォマティクス：MI）の取組を一層加速させる

構造化材料データの例

	書誌情報				物性情報		原料組成			合成条件				…
	文書名	著者	タイトル	…	分子量	…	モノマー α	モノマー β	…	温度	時間	湿度	…	
論文A 材料1														
論文B 材料1														
論文B 材料2														
論文B 材料3														
論文C 材料3														
論文C 材料4														
論文C 材料5														
論文D 材料1														
…														

2018年度

材料データ構造化のための共通データプラットフォームの検討

【学官】

- ・テキストマイニング専門家（産総研AIセンター）
- ・MI専門家、オントロジー専門家（大学教授）
- ・素材アカデミア（産総研、NIMS）

【産】

- ・素材企業（日化協CI素材分科会参画企業）



2019年度～

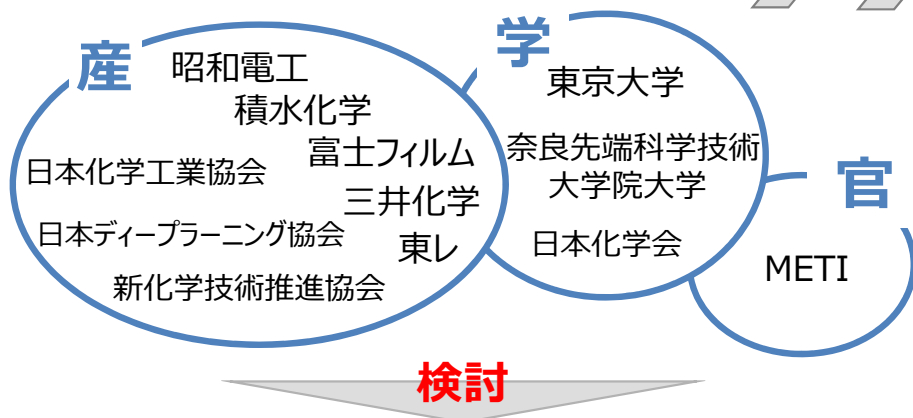
材料データ
構造化ツール開発



(参考) 化学×デジタル人材の育成プログラムの構築

- MIをビジネスに取り込むためには、実際の研究現場でデジタル化を進める人材が必要。
- 産学参加のコンソーシアムを形成し、実践講座のカリキュラムを設計。
- データ科学を理解した化学系人材（化学×デジタル人材）の育成を開始（**5年間で1500人を育成予定**）。

カリキュラムの開発（2018年度）



カリキュラム例

■ 多変量データの把握法

- ・多変量の解析、データ作成
- ・線形代数基礎
- ・正規化テーブル
- ・階層化クラスタリング
- ・PCA

■ 多変量データ把握法についての解釈討論

■ 課題創出（グループ討議&発表）

座学

実習

■ 機械学習

- ・モデル評価（Bayes法、Gaussian Process）
- ・変数評価（ジニ係数、エントロピー）

■ 課題創出（グループ討議&発表）

グループ学習

座学

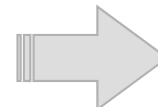
カリキュラムの運営（2019年8月1日～）

第1クール（終了）

- 日程：8月1日～9月25日（39時間／全7日間）
- 参加者：主要化学メーカー等**67社113名**
- 講師：船津公人 教授（東京大学）
金谷重彦 教授（奈良先端科学技術大学院大学）
- 事務局：新化学技術推進協会（JACI）
- 受講料：15万円

第2クール（開講中）

- 日程：2020年2月20日～3月31日（全7日間）
- 場所：東京大学本郷キャンパス及びその近隣
- 講師、事務局、受講料：同上



2020年度以降も開催予定

超先端材料超高速開発基盤技術 プロジェクト(超々PJ)* 説明資料

産総研 材料・化学領域
機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター
センター長 浅井美博

* NEDOの委託を受けて先端素材高速開発
技術研究組合(ADMAT)と産総研が実施

超々PJの実施体制とターゲット産業素材



先端素材高速開発技術研究組合（ADMAT）組合員企業

出光興産(株)/ 宇部興産(株)/ (株)カネカ/ コニカミノルタ(株)/ JSR(株)/ 昭和電工(株)/ 積水化成工業(株)/ DIC(株)/ 東ソー(株)/ 東レ(株)/ 日鉄ケミカル&マテリアル(株)/ (株)日本触媒/ 日本ゼオン(株)/ パナソニック(株)/ 日立化成(株)/ 古河電気工業(株)/ (株)村田製作所/ 横浜ゴム(株)

半導体材料

高透明なサーモクロミクフィルム、有機半導体等

冷房時
機能性ナノ粒子
可視光透過
近赤外光遮断

暖房時
可視光・近赤外光透過

高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等

高性能高分子材料

高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

自動車系部品など

機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等

フローリアクターによる自在合成

機能性モノマー → 機能性材料

ディスプレイ材料
機能性ゴム材料など

ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電材料等

自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など

導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など

フレキシブルディスプレイ・照明など

- **光機能性微粒子MDPF**
✓ 調光材料、インク、医療イメージング等
- **電子部品MDPF**
✓ 高周波対応回路基板材料等
- **機能性高分子MDPF**
✓ ゴム材料、微多孔膜等
- **触媒MDPF**
✓ バイオマス原料の材料合成用触媒等
- **配線／半導体MDPF**
✓ ナノカーボン電線材、フレキシブルデバイス等

材料設計データプラットフォーム（MDPF）群の構築

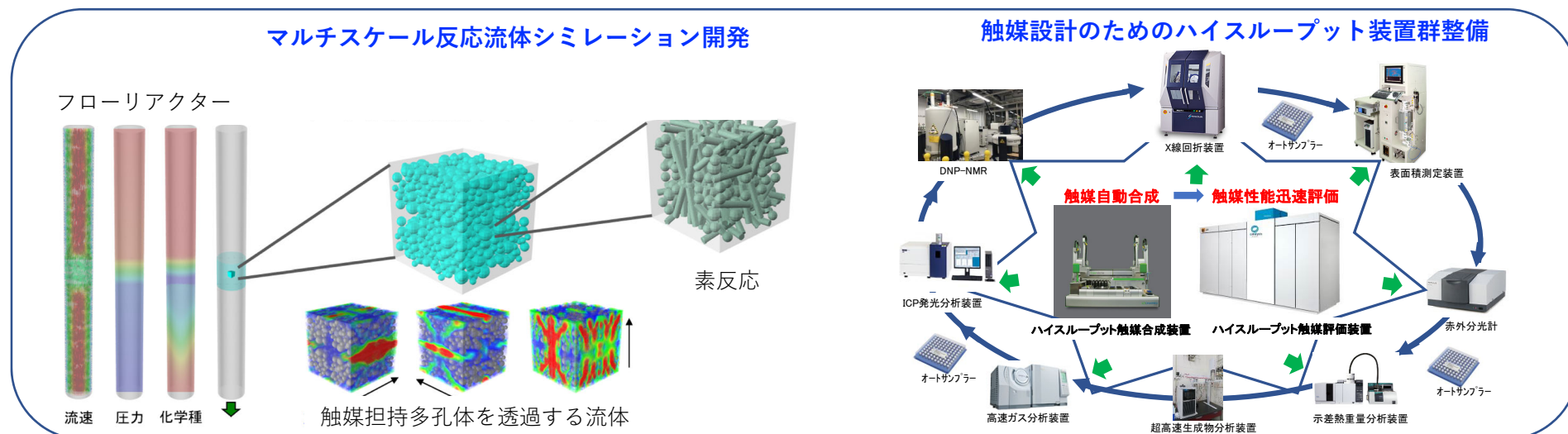
計算シミュレーション・計測・プロセス実験の三位一体 連携による素材データの創出



**素材データの
高速オンデマンド創出**



触媒MDPFの例



マテリアル革新力強化につなげるための課題

- ◆ 乱立したデータ・システムの連携・統合によるオールジャパン体制の構築
 - 相互連携できないデータベース(独自に構築された学術DB・企業保有DB)
 - 学術DBと実用材料とのギャップ

- ◆ 川上から川下までレイヤーの異なる企業の垂直連携による産業界のニーズに基づいた材料開発
 - 大学・国研での材料開発と産業界のニーズにギャップ
 - 川上企業での材料開発と川下企業(ユーザ企業)のニーズにギャップ

第2回マテリアル革新力強化に向けた準備会合

データ駆動型研究開発を推進するための 産学官連携研究開発拠点整備 説明資料

2020年3月23日(月)

産業技術総合研究所
理事(材料・化学領域長)
村山 宣光

現状の課題

大学や国研等の生み出す先端材料技術を如何にしてオールジャパン体制で我が国の産業競争力強化につなげるか？

マテリアル革新力強化のために必要と考える取り組み

材料の強み × 垂直連携 × MIプラットフォーム

- 材料に強みを持つ大学・国研等にそれぞれ研究開発拠点を整備
- 各拠点では、大学・国研等と川上から川下までレイヤーの異なる企業の垂直連携により、産業界のニーズと課題を共有するすり合わせ型技術開発を推進
- MIプラットフォーム（材料設計ツール・材料データベース・データ基盤の3階層）を共通基盤として整備・運用

研究開発イメージ

材料の強み

大学や国研等の生み出す
先端材料技術



垂直連携

ニーズと課題を共有する
すり合わせ型技術開発

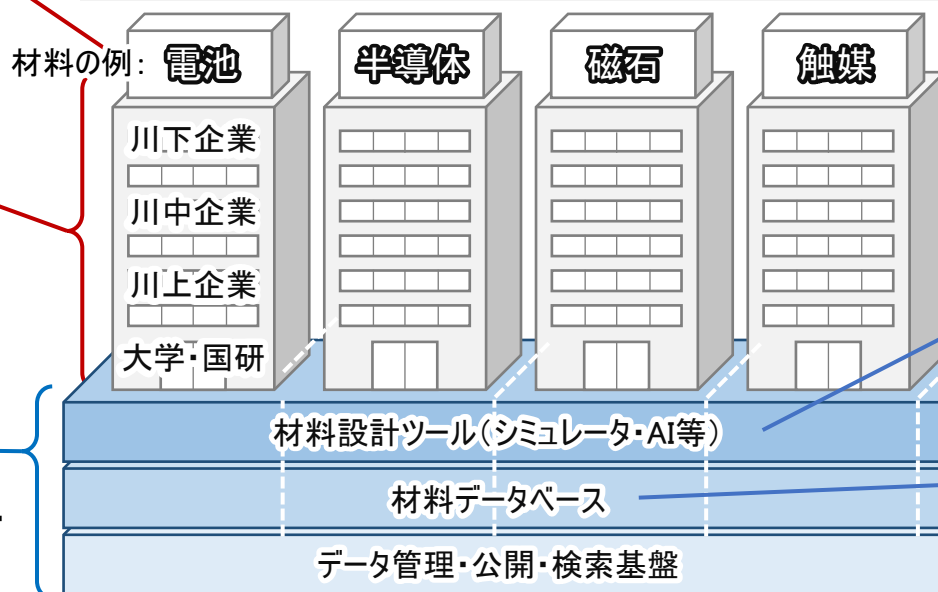


MIプラットフォーム

材料設計ツール・データベース・
データ基盤の3階層

拠点イメージ

材料毎に施設を整備して拠点化し、それぞれで国プロ等を推進
MIプラットフォームを共通基盤として整備・運用

MIプラットフォーム
運用イメージ材料開発
(大学・国研・企業)

物性予測
最適化



産業界ニーズ
材料データ

材料設計ツール

シミュレータ・AI等のツールをイン
ターフェイスとして、個別の材料
開発を支援

ツール強化



データ集約

材料データベース

データ集約とその活用により材
料設計ツールを強化

期待される効果

材料データのMIプラットフォームへの集約により、データベース・材料設計ツール拡充
産業界のニーズに基づいた確度の高い材料の開発を
データ駆動型研究で加速することにより、我が国の産業競争力を強化