

事業名	<p>データ創出・活用型プロジェクト（新規）</p> <p style="text-align: right;">令和3年度要求額：調整中 （研究事業総額：未定） 研究事業期間：令和3年度～令和12年度</p>
------------	---

※研究開発事業に関する評価については、科学技術・学術審議会等において、「国の研究開発評価に関する大綱的指針」等を踏まえ、事前評価が行われているため、当該評価をもって政策評価の事前評価に代えることとする。

【主管課（課長名）】

研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付（参事官：黒澤 弘義）

【関係局課（課長名）】

【審議会等名称】

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

【審議会等メンバー】

別紙参照

【目標・指標】

○達成目標

マテリアルの研究開発データが持続的かつ効率的に創出・蓄積・利活用されるマテリアルDXプラットフォームの中で、データ駆動型研究を推進して革新的機能を有するマテリアル創出と社会実装のボトルネックとなるプロセス技術の課題解決に取り組む。

○成果指標（アウトカム）

査読付き論文数、特許出願件数と登録件数、産学連携（共著論文数、共同研究成果による企業への貢献度等）

○活動指標（アウトプット）

データ創出・活用型プロジェクトへの参画研究者数、形成する研究コミュニティへの参画機関数、マテリアル×データ人材数（データサイエンス的手法で導かれた結果を含む論文の執筆者数等）、産学連携による共同研究課題数

【費用対効果】

投入する予定の国費に対して、上記アウトプット及びアウトカムの結果が見込まれることから、投入額よりも大きな成果が期待される。

なお、事業の実施に当たっては、事業の効率的・効果的な運営にも努めるものとする。

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会委員

- 五十嵐正晃 日鉄ケミカル&マテリアル株式会社常務執行役員
射場 英紀 トヨタ自動車株式会社先端材料技術部
CPE（チーフプロフェッショナルエンジニア）
- 上杉 志成 京都大学化学研究所教授
物質－細胞統合システム拠点連携教授・副拠点長
- 加藤 隆史 東京大学大学院工学系研究科教授
菅野 了次 東京工業大学科学技術創成研究院教授
- ◎栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター教授
瀬戸山 亨 三菱ケミカル株式会社エグゼクティブフェロー
Science & Innovation Center, Setoyama Laborator 所長
- 高梨 弘毅 東北大学金属材料研究所教授
武田 志津 株式会社日立製作所専門理事兼 研究開発グループ技師長
兼 基礎研究センター日立神戸ラボ長
- 常行 真司 東京大学大学院理学系研究科教授
中山 智弘 国立研究開発法人科学技術振興機構
研究開発戦略センター企画運営室長・フェロー
- 納富 雅也 東京工業大学理学院物理学系教授
長谷川美貴 青山学院大学理工学部教授
- 宝野 和博 国立研究開発法人物質・材料研究機構理事
馬場 嘉信 名古屋大学未来社会創造機構ナノライフシステム研究所
教授・所長
- 前田 裕子 株式会社セルバンク取締役
国立研究開発法人海洋研究開発機構監事
- 湯浅 新治 国立研究開発法人産業技術総合研究所
スピントロニクス研究センター長
- 吉江 尚子 東京大学生産技術研究所教授
萬 伸一 国立研究開発法人理化学研究所
創発物性科学研究センターコーディネーター

(◎：主査、敬称略、五十音順)

データ創出・活用型プロジェクトの概要

1. 課題実施期間及び評価時期

2021年度～2030年度

中間評価 2023年度(事業開始から3年目)及び2026年度(事業開始から6年目)、
事後評価 2030年度を予定

2. 研究開発概要・目的

本事業は、マテリアルの研究開発データが持続的かつ効率的に創出・蓄積・利活用されるマテリアルDXプラットフォームの中で、データ駆動型研究を推進して革新的機能を有するマテリアル創出と社会実装のボトルネックとなるプロセス技術の課題解決に取り組む。

3. 予算（概算要求予定額）の総額

2021年度概算要求予定額：調整中
(ポンチ絵(参考資料)参照)

4. その他

有望なシーズ技術に関しては、経済産業省(NEDO事業)・内閣府(SIP)と連携することにより、社会実装の実現を効率的かつ迅速に進める。

データ創出・活用型プロジェクト



文部科学省

○ マテリアル革新力を発揮する重要技術・実装領域において、データ創出・活用と理論・計算・実験が融合する戦略的な研究開発を実施するためには、**研究開発とデータ創出が相互に支え合うマテリアルデータエコシステムを先導して構築**することが重要。

○ そのためには、高品質なデータとデータ構造を創出するための共用基盤の整備とあわせ、**これらの基盤を利用したデータ活用型の先導研究開発が必要不可欠**。
○ また、オープン・シェアードの良質なデータを再利用可能な形で集約し、プロジェクト課題ごとにデータ構造化するためにも、「**データ×マテリアル融合人材の事業参加や人材育成を促進**」することが求められている。

マテリアル研究開発の革新力を強化するため、以下の取組等によりデータ活用型研究を推進

- ① データの創出・活用が大きなブレイクスルーをもたらす研究課題の特定
- ② 理論・計測・実験の人材および、データ人材の結集
- ③ 効率的にデータ収集を行うためのハイスループット設備群の整備

材料開発に不可欠な2つのサイエンスにおいてこれらを実施

マテリアルサイエンス型（新物質・新機能マテリアルの創出）

○ データ創出可能な基盤の整備と高度化を行う一方で、令和4年度より、**従来の試行錯誤型研究にデータ駆動型の研究を取り入れる**ことで、**新物質・新機能**を創出することを目的としたマテリアルの研究開発を加速する。

○ 令和3年度は、重要技術領域に紐づく課題を設定し、**本格実施を行うためのコミュニティ形成と各技術領域で取り組むべき課題を、ワークショップを通じて検討**する。その上で、令和4年度以降の本格実施の判断材料とする。



プロセスサイエンス型（新たな材料開発プロセスの創出）

○ 材料組成×種々のプロセス因子からなる膨大な評価水準を有する課題について、**効率的にデータ収集し、機械学習・AIを取り入れる**ことによりマテリアルの社会実装の加速に貢献する。



参考資料

事前評価票

(2020年9月現在)

1. 課題名	データ創出・活用型プロジェクト
2. 開発・事業期間	2021年度～2030年度
3. 課題概要	<p>(1) 研究開発計画との関係</p> <p>施策目標：未来社会を見据えた先端基盤技術の強化</p> <p>大目標（概要）：</p> <p>ICT（Information and Communication Technology）を最大限に活用し、サイバー空間とフィジカル空間（現実世界）とを融合させた取組により、人々に豊かさをもたらす「超スマート社会」を未来社会の姿として共有し、その実現に向けた一連の取組を更に深化させつつ「Society 5.0」として強力に推進し、世界に先駆けて超スマート社会を実現していく。このため、国は、超スマート社会サービスプラットフォームの構築に必要な基盤技術及び個別システムにおいて新たな価値創出のコアとなり現実世界で機能する基盤技術について強化を図る。</p> <p>中目標（概要）：</p> <p>ナノテクノロジー・材料科学技術分野は我が国が高い競争力を有する分野であるとともに、広範で多様な研究領域・応用分野を支える基盤であり、その横串的な性格から、異分野融合・技術融合により不連続なイノベーションをもたらす鍵として広範な社会的課題の解決に資するとともに、未来の社会における新たな価値創出のコアとなる基盤技術である。また、革新的な技術の実現や新たな科学の創出に向けては、社会実装に向けた開発と基礎研究が相互に刺激し合いスパイラル的に研究開発を進めることが重要である。</p> <p>これらを踏まえ、望ましい未来社会の実現に向けた中長期的視点での研究開発の推進や社会ニーズを踏まえた技術シーズの展開、最先端の研究基盤の整備等に取り組むことにより、本分野の強化を図り、革新的な材料を創出する。</p> <p>重点的に推進すべき研究開発の取組（概要）：</p> <p>①未来社会における新たな価値創出に向けた研究開発の推進</p> <p>イ. 新たな研究開発手法の開発</p> <p>(2) データ駆動型の材料設計手法の開発</p> <p>新たなデータ駆動型の材料設計技術「マテリアルズ・インフォマティクス」は、物質・材料分野における膨大なデータ群に、最先端のデータ科学・情報科学の手法を組み合わせることにより物質・材料の研究開発を飛躍的に加速させ、材料の開発手法にパラダイムシフトをもたらす可能性を持つ。本研究領域の開拓は、国際的な潮流の観点からも、我が国の物質・材料研究の発展にとって重要であることから、様々な研究を通じて蓄積された膨大・高品質なデータを産学官で共有・利活用を行うためのデータプラットフォームを構築</p>

し、これを活用した材料開発に積極的に取り組む。データプラットフォームの構築に当たっては、様々な研究機関からデータを集めるための制度設計や体制整備等に取り組む。

(3) 材料開発に資するプロセス技術の開発

材料を開発し、社会実装へと繋(つな)げるため、スマート生産システムへの対応や経済合理性等を考慮した製造(プロセス)技術の開発等に注力する。これらの開発を一体で推進することにより、機能発現の本質と製造プロセスに用いられる要素反応・要素過程の理解を同時に進め、その知見に基づき高機能材料を開発する。

ウ. 新たな技術領域・未来社会を切り拓(ひら)く挑戦的な基礎・基盤研究の強化

研究者の自由な発想による研究を格段に発展させる学術研究や、将来のプロジェクトの芽を創出するような探索型研究、国内外の研究動向を踏まえ、組織や分野の枠を超えた研究体制の下で将来社会に大きな影響をもたらす新技術シーズの創出を目指す戦略的な基礎研究、さらには社会経済や科学技術の発展、国民生活の向上に寄与する研究成果の実用化を見据えた研究等を進める。また、従来技術の延長では実現し得ないナノ構造の自在制御による新規材料創製技術の開発にも取り組む。

上記のような取組を通じて、ナノテクノロジー・材料分野の新たな技術領域を切り開くとともに、当該分野の発展によりどのような新しい未来社会が創り出されるかについて検討を進め、必要な措置を講ずる。

本課題が関係するアウトプット指標：

- データ創出・活用型プロジェクトへの参画研究者数
- 形成する研究コミュニティへの参画機関数
- マテリアル×データ人材数
(データサイエンス的手法で導かれた結果を含む論文の執筆者数等)
- 産学連携による共同研究課題数

本課題が関係するアウトカム指標：

- 研究開発の量と質(査読付き論文数、Top10%補正論文数)
- 特許出願件数と登録件数
- 産学連携(共著論文数、共同研究成果による企業への貢献度等)

(2) 概要

鉱物資源やエネルギー資源の大半を他国からの輸入に依存するわが国において、世界市場シェアが大きい素材産業とそれを支えるマテリアルの基盤技術が重要な役割を担っている。近年は、米中貿易摩擦・感染症パンデミックにより、サプライチェーンの強靭化が求められており、マテリアル産業の国際競争力を高い水準で維持するためにも、高度な機能を持つマテリアルをいかに効率的に創出し、迅速に社会実装できるかが我が国の生命線となる。マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けての準備会合においても、欧米中がマテリアルの研究開発を加速するためにデータ駆動型研究への積極的投資を進めていることが指摘されている。その状況を踏まえて、我が国においてもデジタルトランスフォーメ

ーション（DX）を進めることの重要性が提言されており、マテリアルDXプラットフォーム構想下で、当該事業ではマテリアル・イノベーション創出を加速するとともに、データを有効に活用して、迅速に社会実装につなげることができる「ジャパンモデル」を確立することを目指す。その目的達成に向けて、当該事業では、マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けての提言で定められているマテリアルの重要技術領域に紐づき、データ利活用によって研究開発が加速することが期待される研究課題に取り組み、効率的な成果創出を目指す。

具体的には、①革新的な機能を有する新材料創製を目的とした「マテリアルサイエンス」と、②有望な材料を対象に社会実装されるまでのボトルネックとなるプロセス課題解決を目的とした「プロセスサイエンス」をデータ駆動型研究に軸足を置いて推進する。また、最先端の共用装置が配備されるマテリアルデータインフラを積極的に活用することで、高品質なデータ創出と蓄積・構造化を加速し、データ中核拠点に登録することで、汎用的で利活用可能なデータ基盤構築に貢献する。

① マテリアルサイエンス型：

令和3年度はFS課題を設定する。ここでの課題は、我が国において産業競争力が高く未来社会の実現に重要な役割を担う重要技術領域である①高度デバイス機能マテリアル（パワーエレクトロニクス・MEMSデバイス・IoTセンサ等）、②量子・電子マテリアル（超電導材・ナノエレクトロニクスデバイス等）、③エネルギー変換マテリアル（蓄電・磁性・熱電素子等）、④高度循環マテリアル（サステナブル材料等）、⑤極限機能マテリアル（超軽量、耐熱、耐圧、高強度等）、⑥バイオマテリアル（バイオアダプティブ材料等）、⑦ナノスケールマテリアル（ナノカーボン・ナノ多孔体・二次元薄膜等）、及び⑧マルチマテリアル（接着接合技術・積層技術、コンポジット材等）に紐づける。①～⑥は、目指すべき未来社会像からのバックキャスト型の「戦略的」研究開発であるのに対して、⑦と⑧は他領域との融合要素が強い点を考慮して、フォアキャスト型で未来社会を開拓する「創発的」研究開発を推進する。各領域の代表機関は公募・推薦等で選定し、設置機関の代表者を中心に、（1）データ駆動型の研究開発体制・（2）マテリアル×デジタル人材の育成計画・（3）取り組む研究課題の素案を策定する。具体的に検討する際の指針は、以下の通りである。

- （1）研究開発体制：令和3年度で終了する文部科学省内局事業の元素戦略プロジェクトにおいても既に実績がある、わが国発の研究基盤システムである研究体制（①物質・材料創製・②計測評価・③理論計算グループ）に、DX促進のため④データ活用促進グループを新たに加えた4グループを設定する。
- （2）マテリアル×デジタル人材育成：設置機関の代表者が中心となり、グループ間のシナジー効果により双方がマテリアル×デジタル人材としての成長が促進される体制・企画等を計画立案し、①～③の各グループがデータサイエンス的手法を活用して研究開発を推進する拠点への成長と発展を目指す。
- （3）取り組む研究課題：社会実装に向けてのマテリアル課題をブレイクダウンし、データサイエンスとの親和性を十分に考慮して取り組むべき研究開発テーマを具体化する。また、課題解決に必要なデータ群とそれらのデータ構造設計（フォーマ

ット)を④データ活用促進グループの中核となる人材を中心に立案する。取り組む研究課題に対応したハイスループット装置等が必要となる場合は、設計コンセプトを装置研究課題としてまとめて提案する。

(1)～(3)に関する検討内容について、各機関主催のワークショップを開催する。ワークショップの趣旨は、(I)領域の活動方針について、社会的ニーズの高さ・技術的難易度と実現性・データ駆動型研究との親和性等の観点で協議することと(II)共通の研究開発目標を持ちデータ駆動型研究を積極的に取り入れる研究機関とのコミュニティ形成である。ワークショップを経て、令和4年度本格移行時の拠点体制の姿と取り組む研究開発テーマを具現化し、革新的機能を有するマテリアルの効率的な創出を目標とした研究を推進する。

② プロセスサイエンス型(材料の社会実装に向けたプロセスサイエンスの構築事業【Materealizeプロジェクト】の改組):

マテリアル機能はプロセス設計に大きく依存することは周知であるものの、性能を決定づける要因については未解明な点が多く、産学官ともに学理構築が強く望まれている。プロセス因子と性能の相関は単純ではなく、複数のプロセスパラメーターの間で非常に複雑で深い階層に相関性が潜むことから、データサイエンス的手法によるアプローチが強く期待される分野である。革新的な機能が期待できるマテリアルにおいて、社会実装に向けてプロセス設計がボトルネックとなる課題に取り組むことで、学理・サイエンス基盤としてのプロセスサイエンスの構築を推進していく。有望なプロセス基盤技術は、早期の段階から製造装置メーカー等の意見を取り入れながら、それに立脚した新たな設計・開発指針を効率的かつ有効的に提案することを目標とする。

4. 各観点からの評価

(1) 必要性

○「統合イノベーション戦略2020」(令和2年度7月17日閣議決定)において、目指すべき将来像として、

- ・我が国のマテリアル企業が国際市場における高い競争力と信頼性を獲得し、マテリアル製品の輸出規模の拡大、そうしたマテリアル製品を利用する我が国ユーザー企業の国際競争力向上を実現
- ・マテリアルの知が高確率でスピード感を持って実装され、AI、バイオ、量子技術、環境といった重要政府戦略の実現の加速や、国内外の重要課題の解決に貢献するとともに、我が国発のマテリアルから新しい価値、研究領域、産業領域が創出されることを実現

と掲げられている。また、それに向けた目標として、

- ・マテリアルが大きなバリューをもたらす社会実装領域(超低消費電力で駆動するEco-Society 5.0の実現、資源の海外依存国から資源産出国への実質的転換等)と、それを実現するための重要技術領域を明らかにした上で、産学官の協力の下、研究開発を戦略的に推進

と掲げられている。その目標達成に向けた施策・対応策としては、

- ・高品質なマテリアルデータを用いて優れた研究成果を創出することを目的とした、重要技術・実装領域に狙いを定めた、データ収集・活用と理論・計算・実験が融合する戦略的な研究開発プロジェクトについて、2020年度から検討を進め、必要となる取組を速やかに実施する。スマートラボラトリの推進方策についても検討を行い、プロジェクト等を通じて展開を図る。

とされており、本施策を実施する必要性は高いと考えられる。

○マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けての提言では、

- ・近年、米中貿易摩擦等に伴いマテリアルのグローバル・サプライチェーンに大きな変化が発生し、新型コロナウイルス感染症の世界的流行に伴い、サプライチェーン断絶のリスクの存在が改めて浮き彫りとなっている。経済安全保障上の観点から、我が国のサプライチェーンを強靱化するためのマテリアル・イノベーションが求められている。我が国の輸出産業の要であるマテリアルの取組が、今後の日本経済の行方に大きな影響を与える。

と記載されている。

マテリアルに求められる機能が極めて高度化する中で、DXを積極的に進めデータ駆動型研究に軸足を置くことにより、革新的機能を持つマテリアルの効率的創出と社会実装の早期実現に向けたプロセスサイエンスを世界に先駆けて推進することの必要性は極めて高いと考えられる。

評価項目：

- (1) マテリアル研究を従来の試行錯誤型に加え、データ駆動型研究との両輪とする施策の意義
- (2) マテリアル産業競争力を支える基盤技術強化に向けた施策の意義

評価基準：

- (1) 我が国のマテリアル革新力の強化に資する施策内容になっているか。
- (2) 本事業における取組が、素材産業の競争力強化につながるものであるか。

(2) 有効性

○新たな知の創出と研究開発の質向上への有効性：

本事業では、令和3年度にFS期間を設置し、マテリアルが大きなバリューをもたらす社会実装領域に必要となる重要技術領域にターゲットを絞り、データ駆動型研究との親和性を十分に吟味して研究開発テーマを選定する。また、創出されるデータを蓄積する際のフォーマットを拠点ごとに予め定めておき、利活用可能なデータとしてデータ中核拠点に登録することで、マテリアルDXプラットフォーム構想を具現化していく。

各拠点では、研究目的に対応したハイスループット型装置等の開発も行い、従来の試行錯誤型研究だけでは到底検討できなかった物質群からの材料創製や革新的なプロセス技術の提案を目指すことにより、新たな知の創出が期待される。また、データサイエンス的な手法を取り入れることで、データに対する信頼因子も含めた統計学的解析が可能となるた

め、研究開発・データの質が今まで以上に問われ、研究の質の向上への貢献も大きい。

○連携体制：

経済産業省（NEDO）・内閣府（SIP）と密接に関連する技術領域・開発課題については、ガバニングボードを設置して本事業から生みだされたシーズ技術を迅速に引き渡すために開発フェーズ間の連携を明確にして、社会実装や実用化・事業化への段階を見える化し、スピーディーな開発体制を目指す。また、共通課題に取り組む産学からの研究機関の積極的な呼び込みを通じたコミュニティ形成により、ニーズとシーズが接続する研究課題に取り組むことで、有望なマテリアル基盤技術・プロセス技術を効率的かつ迅速に産業界へ引き渡すことができる体制を構築していく。他事業（世界トップレベル研究拠点プログラムや新学術領域研究等）のマテリアル研究開発において、データの観点での共通課題に関しても、適宜、取組内容を共有・議論しながら、より質の高いデータ駆動型研究を目指していく。

○マテリアル×デジタル人材育成：

マテリアル領域におけるデータ人材が不足している問題に対し、本事業では、マテリアル研究人材がデータサイエンス的手法を自らの研究開発テーマに取り入れることでマテリアル×データ人材育成を目標の一つとして設定している。新たにデータ活用促進グループを設置し、物質・材料創製、計測評価、理論計算グループとのシナジー効果により、各グループが有機的に連携してデータ駆動型研究を推進できる拠点への成長を目指す。

評価項目：

- （１）マテリアルの新たな知を効率的に創出するための研究開発体制の妥当性
- （２）FS期間設置・コミュニティ形成・ガバニングボード設置による研究推進の有効性
- （３）マテリアル×データ人材育成に向けた拠点内４グループ体制の有効性

評価基準：

- （１）データ駆動型研究による新たな知の創出・研究開発の質の向上が期待できるか
- （２）①データ駆動型研究による効率的な成果創出に向けた段階的な取組が期待できるか
②社会実装への道筋をつけるまでの段階的な取組が期待できるか
- （３）マテリアル研究人材とデータ人材のシナジー効果による人材育成を期待できるか

（３）効率性

○データ駆動型研究による成果創出に向けた施策：

本事業では、社会的ニーズが高いことに加えて、情報科学的ツール（マテリアルズ・インフォマティクス、プロセス・インフォマティクス、計測・画像インフォマティクス、機械学習等）が効率的な研究推進に有効であることを予め協議してテーマ選定することにより、従来の試行錯誤型の研究手法のみでは対応できなかった研究開発テーマに着手することが可能となり、新たな成果創出が期待される。

○データ駆動型研究の推進に向けた施策：

従来のデータ駆動型研究の課題は、活用できるデータ量が圧倒的に不足していたことである。そのため、研究者が自ら一つずつ必要なデータを取得・蓄積しデータ構造化するしか術がなく、結果的に効率的な研究推進ができないことが実態である。これは、データサイエンス的手法を活用する前提で必要となる大量のデータを利活用できる環境を構築するための施策なくしては解決しない問題である。本事業は、マテリアルDXプラットフォーム構想下で、データ中核拠点に蓄積されたビッグデータを利活用することとで、研究開発が迅速に推進できることが期待される。

○高度・高品質・高効率データ創出に向けた施策：

- ・データ創出においては、マテリアルデータインフラを積極的に活用することで、高度で高品質なデータを効率的に収集することが可能となる。創出されたデータは、データ中核拠点に登録し利活用可能とすることで、我が国の研究開発のためのデータ基盤の強化に貢献することが可能となる。
- ・研究課題に対応したハイスループット装置等を設計・開発する必要がある場合は、設計段階での取得すべきプロセス因子と物性等の選定が研究の肝であり、物質創製・プロセス・計測等の専門性を交えることが重要となる。本事業では、拠点内に設定するグループごとの英知が結集することで、多面的な観点を交えて装置設計を検討することができるため、独創的なハイスループット装置等が開発され、世界を先導するデータ駆動型研究の促進が期待される。

評価項目：

- (1) データ駆動型研究の推進体制における施策妥当性
- (2) データ創出を加速するための施策妥当性

評価基準：

- (1) 従来のデータ駆動型研究における問題への対策が施されており、効率的に研究を推進できる仕組みになっているか
- (2) 効率的に高度・高品質なデータの創出から利活用できることが期待されるか

5. 総合評価

(1) 評価概要

上述の通り、社会情勢の変化でマテリアルは益々重要な役割を担い、デジタルトランスフォーメーションを進める中において、効率的に成果を創出するためにデータ駆動型研究を確立し、我が国を支えるマテリアル基盤技術を強化することは極めて重要であり、その必要性・有効性・効率性の観点から、本事業は積極的に推進すべき課題であると判断する。中間評価は3年目と6年目、事後評価は10年目に実施する。

(2) 科学技術基本計画等への貢献見込み

第6期科学技術基本計画に向けて目指す方向性として研究開発の生産性向上が掲げられており、本事業における効率的な成果創出を目指す取組を通じて貢献見込み。

(3) その他
特になし