

# データ中核拠点の取り組み： マテリアルDXプラットフォーム事業 ALCA SPRINGデータの構造化・収集

物質・材料研究機構

出村 雅彦

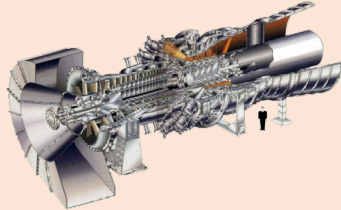
## DX化による材料開発効率化への期待

## 欲しい性能から

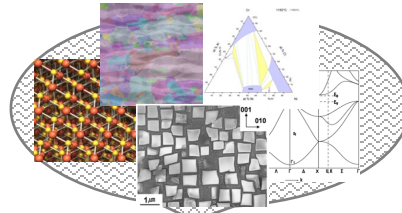
さらに強く、軽い材料を！



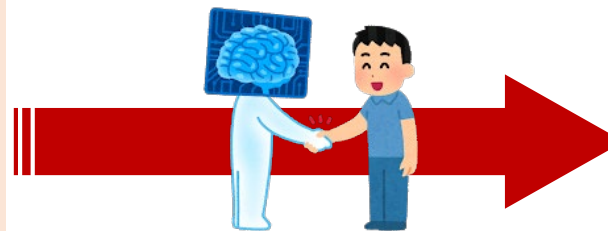
より熱に耐える材料を！



もっと発光する材料を！



影響因子が多く、  
網羅的な検討が困難



# AIとビッグデータで 高速開発

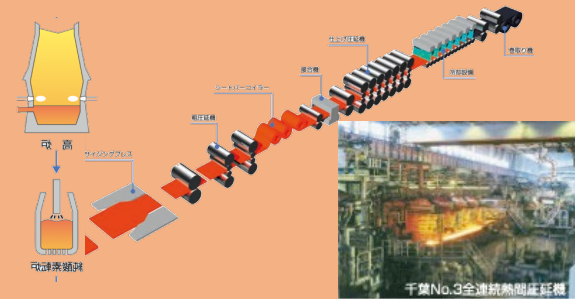
## 最適な材料をデザインする

## 元素の組み合わせ

|          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |          |          |          |         |         |          |          |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|----------|----------|---------|---------|----------|----------|
| 1<br>H   |          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |          |          | 2<br>He  |         |         |          |          |
| 3<br>Li  | 4<br>Be  |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |          | 5<br>B   | 6<br>C   | 7<br>N  | 8<br>O  | 9<br>F   | 10<br>Ne |
| 11<br>Na | 12<br>Mg |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |          | 13<br>Al | 14<br>Si | 15<br>P | 16<br>S | 17<br>Cl | 18<br>Ar |
| 19<br>K  | 20<br>Ca | 21<br>Sc | 22<br>Ti | 23<br>V  | 24<br>Cr | 25<br>Mn | 26<br>Fe | 27<br>Co | 28<br>Ni | 29<br>Cu | 30<br>Zn  | 31<br>Ga  | 32<br>Ge  | 33<br>As  | 34<br>Se | 35<br>Br | 36<br>Kr |         |         |          |          |
| 37<br>Rb | 38<br>Sr | Y        | Zr       | Nb       | Mo       | Tc       | Ru       | Rh       | Pd       | Ag       | Cd        | In        | Sn        | Sb        | Te       | I        | Xe       |         |         |          |          |
| 55<br>Cs | 56<br>Ba | La-Lu    | Hf       | Ta       | W        | Re       | Os       | Ir       | Pt       | Au       | Hg        | Tl        | Pb        | Bi        | Po       | At       | Rn       |         |         |          |          |
| 87<br>Fr | 88<br>Ra | Ac-Lu    | Rf       | Db       | Sg       | Bh       | Hs       | Mt       | Ds       | Rg       | Cn        |           |           |           |          |          |          |         |         |          |          |
|          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |          |           |           |           |           |          |          |          |         |         |          |          |
| 57<br>La | 58<br>Ce | 59<br>Pr | 60<br>Nd | 61<br>Pm | 62<br>Sm | 63<br>Eu | 64<br>Gd | 65<br>Tb | 66<br>Dy | 67<br>Ho | 68<br>Er  | 69<br>Tm  | 70<br>Yb  | 71<br>Lu  |          |          |          |         |         |          |          |
| 89<br>Ac | 90<br>Th | 91<br>Pa | 92<br>U  | 93<br>Np | 94<br>Pu | 95<br>Am | 96<br>Cm | 97<br>Bk | 98<br>Cf | 99<br>Es | 100<br>Fm | 101<br>Md | 102<br>No | 103<br>Lr |          |          |          |         |         |          |          |



## 複雑なプロセス



JFEスチールカタログより

# NIMSが提供する世界最大級の材料データベース



MatNavi 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    | 349,455        |
| 状態図  | 15,000    | 45,819         |
| 特性   | 55,000    | 432,180        |
| 更新   | なし        | 年1回            |



## 高分子



49万物性  
(2022.3月現在)

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**25**年以上の蓄積 (**12**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：学会、出版社等



研究機関の特長を活かした戦略へ

# 材料研究所としての特長を活かしたデータ戦略

つくる

高品質の実験・計算データを  
日々、創出

世界最大級の  
材料データベース資産

IoT

データ構造化



世界に類のない高分子DB



世界最大無機化合物DB

ためる

実験データを再利用できる形  
で自動的に蓄積



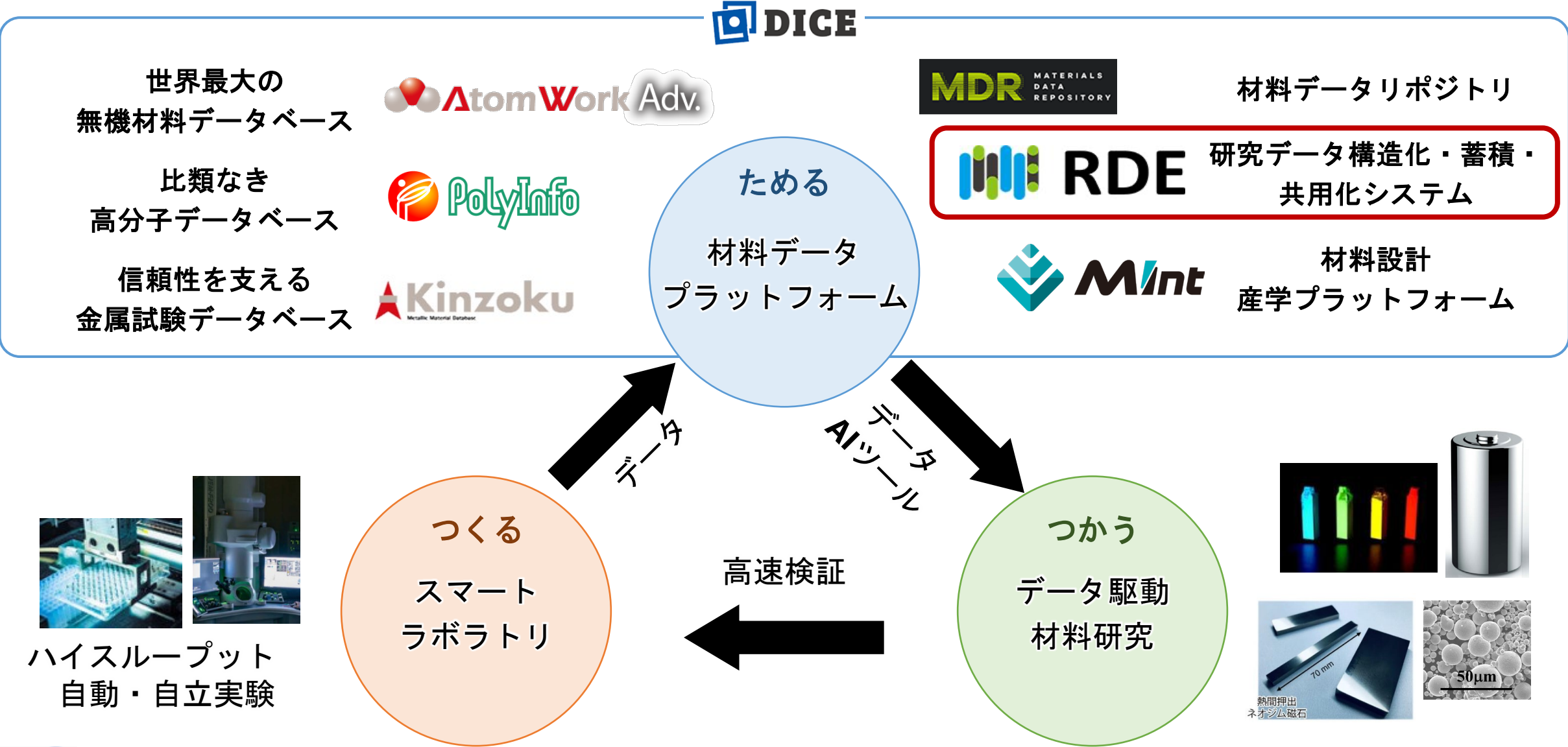
40年以上の破壊寿命測定も！

機械学習に活用

つかう

データの再利用率を高めて研究加速

# NIMSで実践してきたマテリアル研究DX化



# NIMSの「社会実験」→データ共用に関する研究者の**相反する**気持ち

## データを提供する研究者の気持ち

- 自分のデータを”中途半端な形で”提供したくない。
- 自分のデータを”手間をかけてまで”提供したくない。
- “時間が経つと実験条件を忘れる” ために上記の気持ちがより強くなる。

## データを利用する研究者の気持ち

- “次元削減された特徴量や価値が分かる” 共用データを使いたい
- “網羅性”に優れた 共用データを使いたい
- 手持ちのデータと統合する際の”手間の少ない” 共用データを使いたい



“きちんとしたデータを**後日作成する**”を志向すると、**間違いも多く**、論文や報告書のサプリメンタルデータ以上のデータ蓄積は進まない。

# 後日ではなく、“実験中にデータ登録”を優先したデータ構造化へ

“きちんとしたデータを後日作成する”では、DX化は進まない。

どうする？

- 後日ではなく**実験中に**データ登録
- **研究加速を動機づけに**データ登録

どうする？

 **RDE**

**ツール&テンプレート**によるハイスループットなデータ構造化 ➡ これをシステム化したものが**RDE**！

## ツール

- 装置出力ファイル翻訳、計測条件抽出、フォーマット変換、可視化の処理
- 数理統計データ処理、スパースモデリング
- データ駆動型のデータ解析や最適化

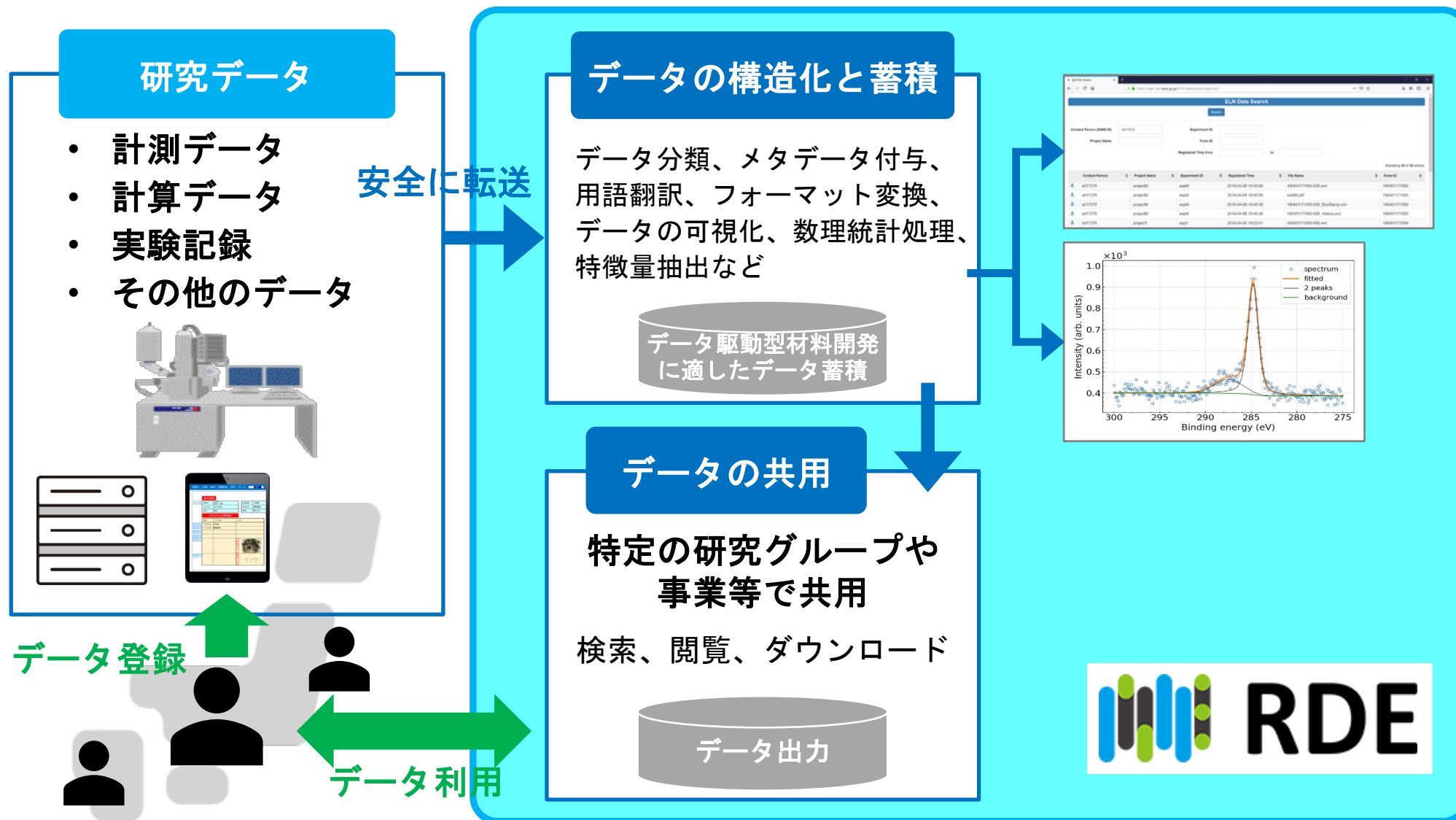
## テンプレート

- 計測対象サンプルに関する情報を入力するためのフォーマット



# Research Data Express (RDE) によるDX化

2023/1/17リリース！

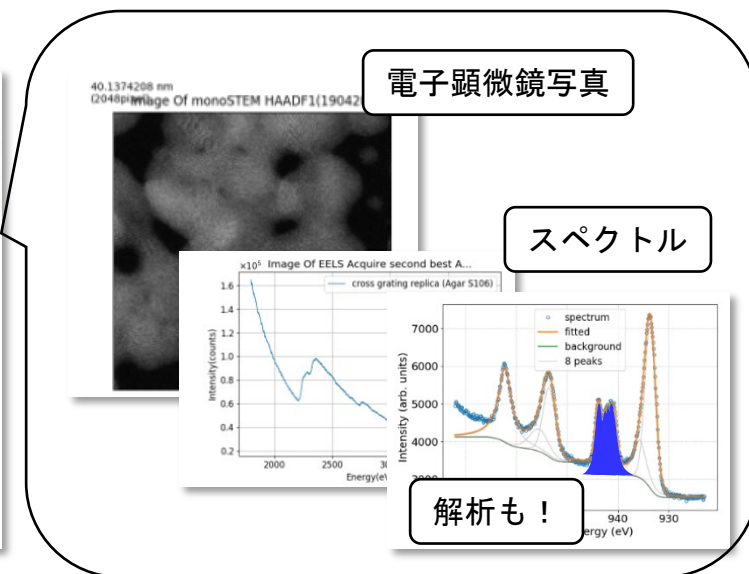




# RDEで実験データを自動収集：測ったそばから**使える形で**ためる！



## 様々な実験装置からのデータを一覧



# データ駆動による材料研究事例

過去の論文データを再利用  
世界成功性能の熱遮蔽膜

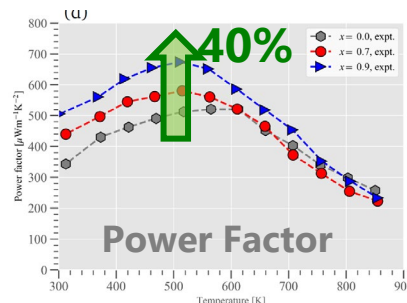


Bi/Si  $\lambda = 0.16 \text{ W/mK}$

Wu et al. npj comp. mater. **5**, 56 (2019).  
Zhan et al. Sci. Rep. **7**, 7109 (2017).  
徐ら、特開2019-119652.

熱制御

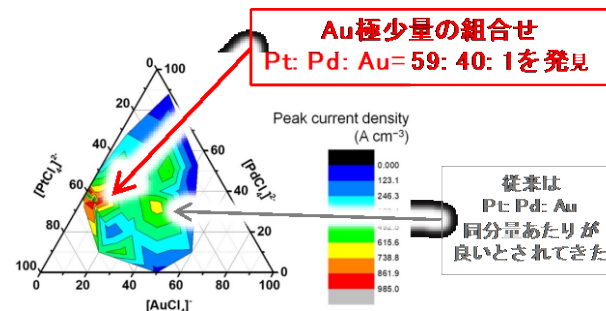
高品質実験データ＋機械学習  
熱電特性をアップ



Hou et al. Acs Appl Mater Inter **11**, 11545 (2019).

小型電源

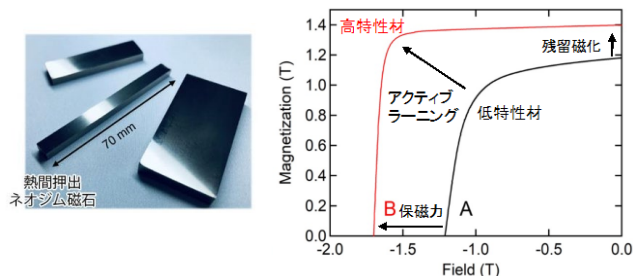
わずか1%の回数の実験で  
意外な触媒成分を発見



Nugraha et al. J. Mater. Chem. A **8**, 13532 (2020).

燃料電池

アクティブラーニングで  
ネオジウム磁石性能を1.4倍向上



6,600万通りから40回の追加実験で最適化

G. Lambard, et. al., Scripta Materialia, **209**, 114341 (2022).

モータ

わずか6回の実験で  
72%製造コスト削減

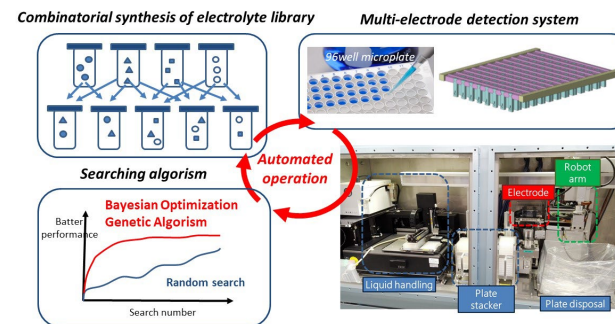
金属3Dプリンタ用  
金属粉末



Tamura et al. Materials & Design **109**290 (2020).

耐熱

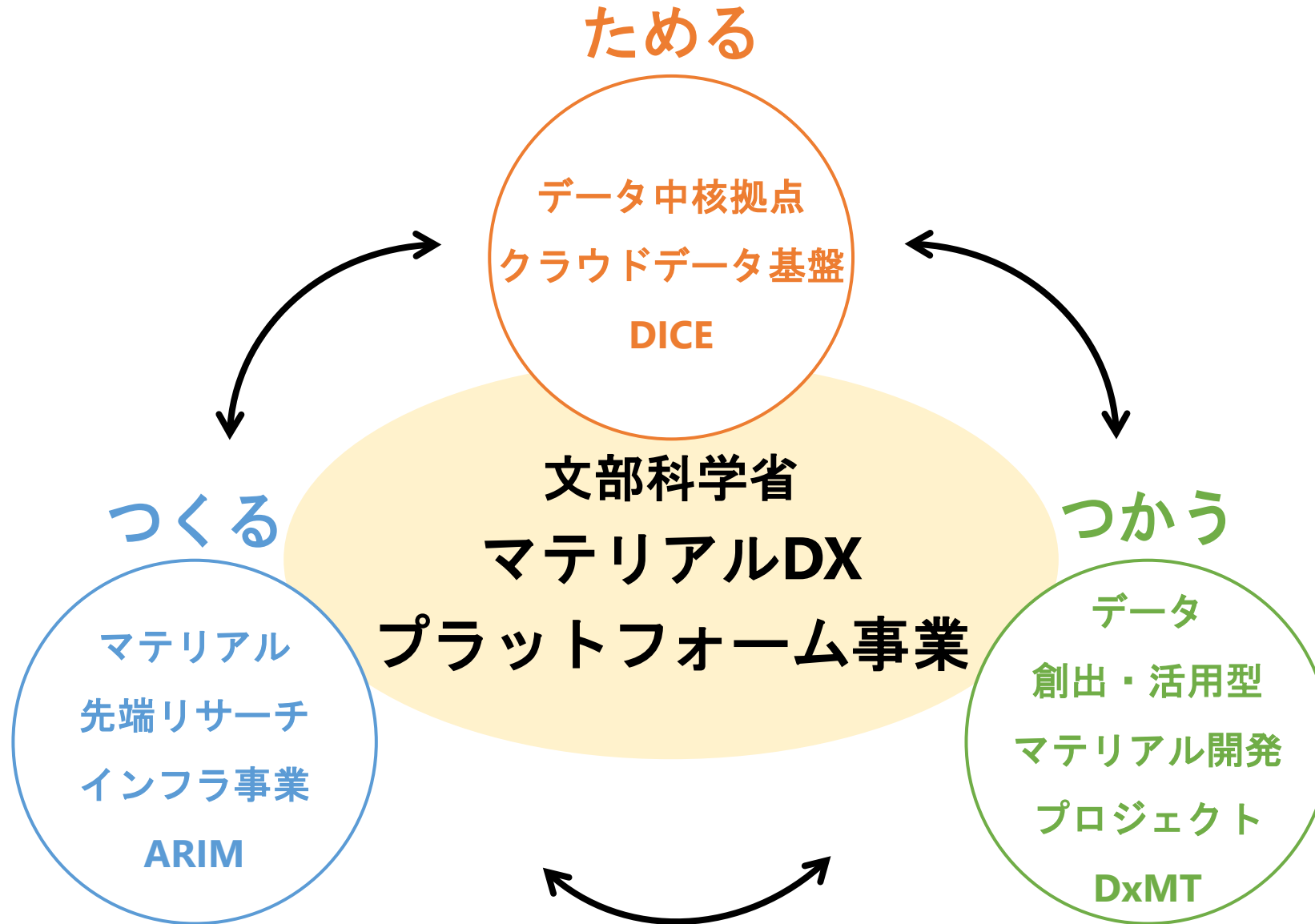
自動実験とAIを連結  
リチウムイオン電池の電解質の探索



Matsuda et al. Scientific Reports **9**, 6211 (2019).

電池

# NIMSの取り組みをプロトタイプとして日本全国のマテリアルデータ戦略へ



# マテリアルDXプラットフォーム：データ中核拠点

人 × 資金 × データ再利用率



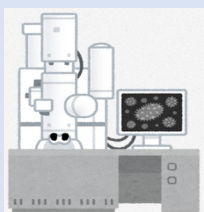
データがどんどん集まり、どんどん活用される材料データエコシステム

データ中核拠点

マテリアル  
先端リサーチインフラ事業  
(ARIM)

機械学習に向けた形式で  
データを登録

データを登録したら  
様々なデータも活用  
しながら  
AIで材料開発が  
高速化できる！



日本全国の大学・研究機関

AI解析結果

データ創出・活用型

マテリアル研究開発プロジェクト

データ基盤  
機能提供

デジタル資産  
広域シェア化



認証

データ  
収集

ユーザー自身の  
データ

論文として成果を公表したら共用へ

共用化されたデータ  
の蓄積

世界最大級データベース



高品質データベース

RDE

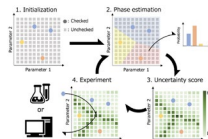
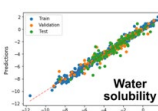
横断的なデータ検索・抽出支援技術



NIMS構造材料デー  
タシート



pinax  
高度なAI解析システム



機械学習用データセット



# ホップ・ステップ・ジャンプでマテリアル研究をDX化する！

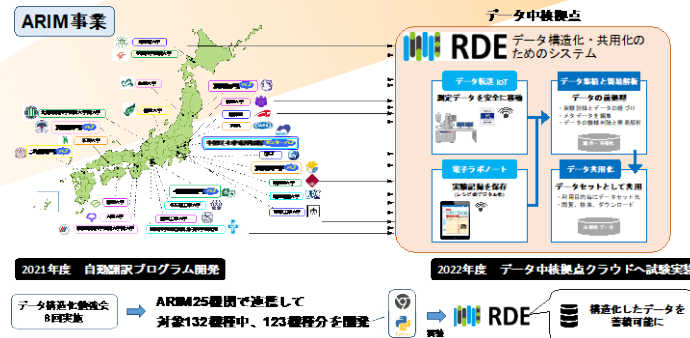
## NIMSでの「社会実験」

- ✓ いろいろ試行錯誤をして
- ✓ RDEという道具にたどり着く



## ARIMで全国展開第1弾

- ✓ 設備の専門家が取り組む
- ✓ 装置を中心としたDX化の先導役



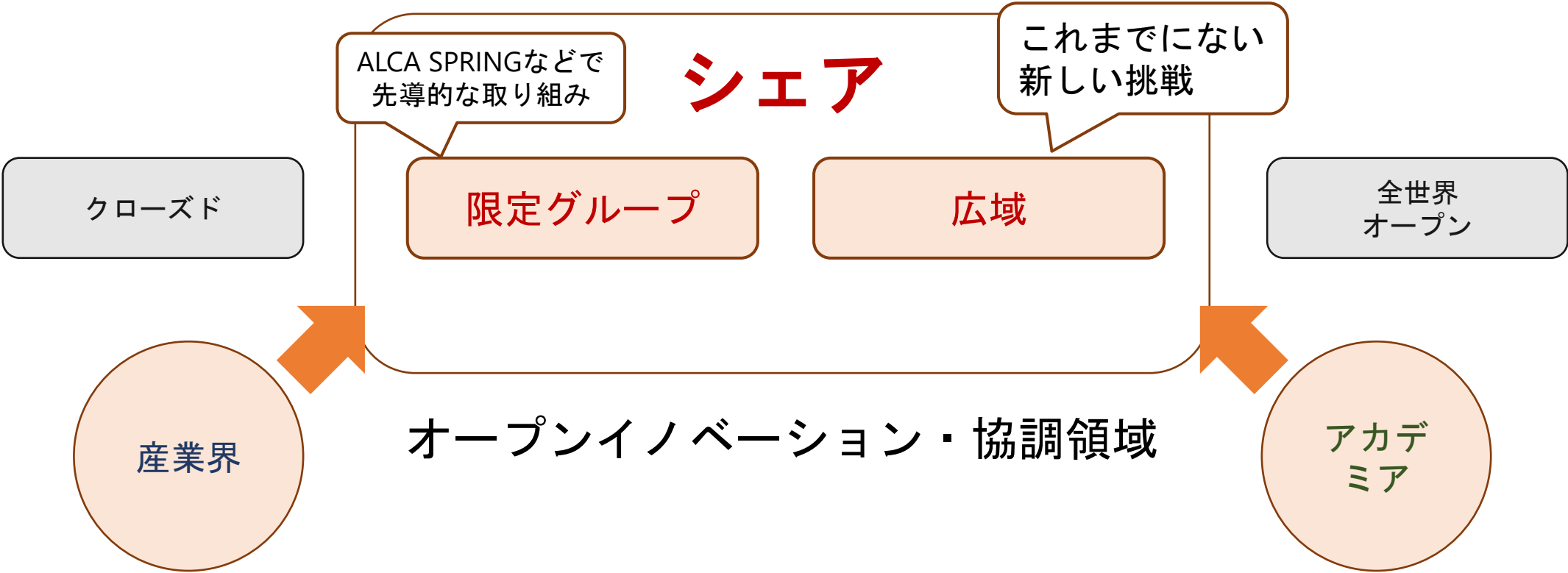
## DxMTで全国展開第2弾

- ✓ プロジェクト推進を駆動力に
- ✓ 研究室のDX化を先導



# 最後に：世界に勝つための産学連携の「シェア」プラットフォームへ

## 日本のマテリアル革新力強化



# データ中核拠点：DICEのプロダクツラインナップ

