

ナノテクノロジー・材料科学技術分野に 関する研究開発課題の中間評価結果

令和6年8月

科学技術・学術審議会

研究計画・評価分科会

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 委員等名簿

- 相澤 彰子 国立情報学研究所 副所長・教授
- 五十嵐 仁一 ENEOS 総研株式会社前代表取締役社長
- 菅野 了次※ 東京工業大学科学技術創成研究院特命教授、全固体電池研究センター長
- 栗原 美津枝※ 株式会社価値総合研究所代表取締役会長
- 田中 明子 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 地質調査総合センター
活断層・火山研究部門 マグマ活動研究グループ キャリアリサーチャー
- 原田 尚美 東京大学大気海洋研究所教授、国立研究開発法人海洋研究開発機構地球環境部門招聘上席研究員
- ◎観山 正見 岐阜聖徳学園大学・同短期大学部・学長
- 明和 政子 京都大学大学院教育学研究科教授
- 村岡 裕由 東海国立大学機構岐阜大学 高等研究院環境社会共生体研究センター
教授・センター長
- 村山 裕三 同志社大学名誉教授
- 出光 一哉 東北大学特任教授
- 上田 良夫 追手門学院大学教授
- 大森 賢治 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所教授・研究主幹
- 上村 靖司 長岡技術科学大学技学研究院教授
- 佐々木 久美子 株式会社グローブノーツ代表取締役会長
- 高梨 弘毅 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター長、
東北大学名誉教授
- 土屋 武司 東京大学大学院工学系研究科教授
- 長谷山 美紀 北海道大学副学長、大学院情報科学研究院長
- 原澤 英夫※ 元国立研究開発法人国立環境研究所理事
- 宮園 浩平 国立研究開発法人理化学研究所理事／東京大学大学院医学系研究科卓越
教授

◎：分科会長、○分科会長代理

※本評価には参加していない

第12期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 委員

	氏名	所属・職名
主査	高梨 弘毅	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター長
	伊藤 みほ	株式会社デンソー先端技術研究所長
	上杉 志成	京都大学化学研究所教授
主査代理	折茂 慎一	東北大学材料科学高等研究所長、 金属材料研究所教授
	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
	堅達 京子	株式会社NHKエンタープライズ第1制作 センター社会情報部エグゼクティブ・プロ デューサー
	関谷 毅	大阪大学産業科学研究所教授
	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
	高村 由起子	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技 術研究科教授
	武田 志津	株式会社日立製作所専門理事、 研究開発グループ技師長、 日立神戸ラボ長
	永次 史	東北大学多元物質科学研究所教授
	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教授、 NTT物性科学基礎研究所フェロー	
長谷川 美貴	青山学院大学理工学部教授	
馬場 嘉信※	国立研究開発法人量子科学研究開発機構 量子科学研究所所長	
平田 裕人※	トヨタ自動車株式会社先端材料技術部長	
宝野 和博※	国立研究開発法人物質・材料研究機構理 事長	

湯浅 新治	国立研究開発法人産業技術総合研究所新 原理コンピューティング研究センター長
吉江 尚子	東京大学副学長、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量子コン ピュータ研究センター副センター長

※本評価には参加していない。

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（DxMT）
中間評価検討会 委員

	氏名	所属・職名
主査	関谷 毅	大阪大学産業科学研究所教授
	青柳 岳司	旭化成株式会社 デジタル共創本部イン フォマティクス推進センター センター 長
	阿部 英司	東京大学大学院工学研究科マテリアル 工学専攻教授
	金子 弘昌	明治大学応用化学科准教授
	武田 志津	株式会社日立製作所専門理事、 研究開発グループ技師長、 日立神戸ラボ長
	高村 由起子	北陸先端科学技術大学院大学先端科学技 術研究科教授
	藤井 幹也	奈良先端科学技術大学院大学データ駆動 型サイエンス創造センター教授

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) の概要

1. 課題実施期間及び評価時期

実施期間	令和3年度～令和12年度 (令和3年度は、フィージビリティスタディとして実施。令和4年度以降、本格実施。)
中間評価	令和6年度及び令和9年度
事後評価	令和13年度を予定

2. 研究開発目的・概要

・目的

マテリアル分野において、従来の試行・経験型研究にデータ駆動型研究を取り入れた次世代の研究手法の確立及び全国展開を目指すとともに、確立した次世代の研究手法を用いて、カーボンニュートラル、Society 5.0、レジリエンス国家、Well-Being 社会の実現に重要な役割を果たす革新的な機能を有するマテリアルの効率的な創出を目指す。

・概要

「マテリアル革新力強化戦略」に基づき、マテリアルDXプラットフォーム構想の下、我が国が持つ良質な実データの有効活用、高度な研究施設・設備・人材等の強みを活かした、データ駆動型研究の推進により、革新的な機能を有するマテリアルの創出とともに、迅速に社会実装につなげることができる研究方法の確立が必要である。

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（以下「本事業」という。）では、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4つの社会像（カーボンニュートラルの実現、Society5.0の達成、レジリエンス国家の実現、Well-Being社会）に貢献する5つの材料分野（電池材料、磁性材料、半導体材料、構造材料、バイオアダプティブ材料）において、従来の試行・経験型研究にデータ駆動型研究を取り入れた次世代の研究方法を構築・実践し、革新的機能を有するマテリアルの創出を目指す。また、全機関が参画する「データ連携部会」を設置し、各拠点の横串活動や事業外連係を実施する。

加えて、先端設備の全国的な共用体制を構築するマテリアル先端リサーチインフラ（以下「ARIM」という。）の活用を通じたデータ創出・構造化や、国立研究開発法人物質・材料研究機構が構築するデータ中核拠点へのデータの登録など、マテリアルDXプラットフォーム構想の実現に繋げる。

※研究開発課題名については、事前評価時は「データ創出・活用型プロジェクト」であったが、事業開始時に現在の研究開発課題名に変更している。

※事前評価時に設定された課題の達成目標を再設定している。

3. 研究開発の必要性等

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、以下の必要性・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。

(1) 必要性

「統合イノベーション戦略 2020」（令和 2 年 7 月 17 日閣議決定）や「マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けて（戦略準備会合取りまとめ）」（令和 2 年 6 月 2 日マテリアル革新力強化のための戦略策定に向けた準備会合決定）において、我が国マテリアル企業の国際市場における高い競争力と信頼性の獲得や、高品質なマテリアルデータを用いたデータ駆動型研究の速やかな実施などが記載されるとともに、本事業は、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を推進することとしており、必要性は高いと考えられる。

(2) 有効性

従来の試行・経験型研究だけでは得られない新たな知の創出とデータサイエンス的手法を取り入れることによる研究開発の質向上、産業界や他事業との連携体制、不足するマテリアル分野におけるデータ人材の育成を行うこととしており、有効性は高いと考えられる。

(3) 効率性

マテリアル DX プラットフォーム構想下で、ARIM、データ中核拠点と連携することで、高度で高品質なデータを効率的に収集・蓄積・構造化することとしており、効率性は高いと考えられる。

4. 予算（執行額）の変遷

年度	令和 3 年度 (初年度)	令和 4 年度	令和 5 年度	令和 6 年度	翌年度以降	総額
予算額	43 百万	1,361 百万	1,361 百万	1,361 百万	未定	未定
執行額	41 百万	1,357 百万	—	—	—	—

※令和 3（初年度）は、フィージビリティスタディ（以下「FS」という。）期間。

5. 課題実施機関・体制

・ 極限環境対応構造材料研究拠点

研究代表者 東北大学 教授 吉見 享祐

主管研究機関 東北大学

受託機関 九州大学、大阪大学、物質・材料研究機構、東京大学、横浜国立大学、

日本原子力研究開発機構、東海国立大学機構、島根大学

・データ創出・活用型磁性材料研究拠点

研究代表者 物質材料研究機構 副センター長 大久保 忠勝

代表機関 物質・材料研究機構

受託機関 産業技術総合研究所、東北大学、東海国立大学機構名古屋大学、大阪大学、東北学院大学、北陸先端科学技術大学院大学、東京工業大学

・再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点

研究代表者 東京大学 教授 杉山 正和

代表機関 東京大学

受託機関 物質・材料研究機構、東京理科大学、早稲田大学、横浜国立大学、理化学研究所、北海道大学、山梨大学、大阪国立大学、東京農工大学、東北大学名古屋工業大学、東京工業大学

・智慧とデータが拓くエレクトロニクス新材料開発拠点

研究代表者 東京工業大学 教授 神谷 利夫

代表機関 東京工業大学

受託機関 物質・材料研究機構、高エネルギー加速器研究機構、ファインセラミックスセンター

・バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全循環型バイオアダプティブ材料の創出拠点

研究代表者 京都大学 教授 沼田 圭司

代表機関 京都大学

受託機関 東京大学、慶應義塾大学、東海国立大学機構名古屋大学、物質・材料研究機構、理化学研究所、量子科学技術研究開発機構、九州大学、北海道大学、東京工業大学、高輝度光科学研究センター、情報・システム研究機構統計数理研究所

・データ連携部会

研究代表者 物質・材料研究機構 部門長 出村 雅彦

代表機関 物質・材料研究機構

受託機関 東京大学

6. その他

・プログラム運営委員会

プログラム・ディレクター (PD)

栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター 教授

サブプログラム・ディレクター (sPD)

伊藤 聡 公益財団法人計算科学振興財団 チーフコーディネータ

プログラム・オフィサー (PO)

中山 智弘 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST） 研究開発戦略センター企画運営室長、フェロー

専門委員

岡島 博司 トヨタ自動車株式会社 先進技術統括部主査

片岡 一則 公益財団法人川崎市産業振興財団副理事長 ナノ医療イノベーションセンターセンター長

菅野 了次 東京工業大学科学技術創成研究院教授

木場 祥介 ユニバーサルマテリアルズインキュベーター株式会社 代表取締役パートナー

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

常行 真司 東京大学大学院理学系研究科教授

濱川 聡 産業技術総合研究所材料・化学領域 領域長

吉田 亮 統計数理研究所 先端データサイエンス系マテリアルズインフォマティクス研究推進センター センター長

渡邊 孝信 早稲田大学理工学術院教授

文部科学省研究振興局 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）

○研究データの管理・利活用に関する取組状況

事業全体として、研究データマネジメントに関する基本方針を定め、当該方針を踏まえて、各課題においては、データマネジメントマネジメントプラン（DMP）を策定している。当該プランでは、各課題のデータの取扱全般に関する事項（データの収集・管理・利活用等）を定め、それに基づき研究データの管理・利活用を行っている。



事業全体の活動・成果実績（R4-R6年度）



<活動実績>

活動拠点数

5 拠点 + データ連携部会中核機関

【参考】拠点への参画者数

593人 ※（令和6年4月時点）
新規参画者数：R5年度 211人、R6年度 124人
※学生、事務補佐員、企業アドバイザーなど含む

公開イベント（研修・セミナーなど）の開催数

53回（令和6年5月17日時点）

【参考】大学院プログラムの開催数

75回（令和6年5月17日時点）

<成果実績>

本事業発の査読付論文数※ ※謝辞への記載あり

236本（令和6年5月17日時点）

【参考】本事業関連の学会発表数

1,314件（国内：953件、国外：361件）（令和6年5月17日時点）

本事業発の研究手法およびそれを用いた研究成果の論文の被引用数

404本（令和6年5月17日時点）

公開イベント（研修・セミナーなど）の参画機関数

329機関（令和6年5月17日時点）

公開イベント（研修・セミナーなど）の参画者数

のべ6,061人（令和6年5月17日時点）

【参考】大学院プログラムの参加者数

のべ274人（令和6年5月17日時点）

中間評価票

(令和6年7月現在)

1. 課題名 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト

2. 関係する分野別研究開発プラン名と上位施策との関係

プラン名	ナノテクノロジー・材料科学技術分野研究開発プラン
プランを推進するにあたっての大目標	「未来社会を見据えた先端基盤技術の強化」(施策目標9-1) 概要: 我が国の未来社会における経済成長とイノベーションの創出、ひいては Society 5.0 の実現に向けて、幅広い分野での活用の可能性を秘める先端計測、光・量子技術、ナノテクノロジー・材料科学技術等の共通基盤技術の研究開発等を推進する。
プログラム名	ナノテクノロジー・材料科学技術分野研究開発プログラム 概要: ナノテクノロジー・材料科学技術は、他分野の研究開発を支える基盤となる重要な分野であり、幅広い応用が期待される。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戦略的な推進や実用化を展望した技術シーズの展開、最先端の研究基盤の整備強化等に取り組むことにより、ナノテクノロジー・材料科学技術分野の強化を図り、革新的な材料の創製や研究人材の育成、社会実装等につなげる。
上位施策	第6期科学技術・イノベーション基本計画(令和3年3月26日閣議決定) マテリアル革新力強化戦略(令和3年4月27日統合イノベーション戦略推進会議決定)

プログラム全体に関連する アウトプット指標	過去3年程度の状況		
	令和4年	令和5年	令和6年
公開イベントの開催数(回)	20	30	3

※1: 公開イベントとは、研修、セミナー、シンポジウム等のうち、本事業外の人が参加可能なものであり、主催もしくは共催により開催したイベント。

※2: 令和6年は、令和6年5月17日時点。

プログラム全体に関連する アウトカム指標	過去3年程度の状況		
	令和4年	令和5年	令和6年
査読付論文数(報)	21	192	23
論文の被引用数(報)	29	404	—
公開イベントの参加者数(人)	延べ2,546	延べ3,182	延べ333

※3: 査読付論文数は、謝辞が記載されたものが対象。

※4: 令和6年は、令和6年5月17日時点。

3. 評価結果

(1) 課題の進捗状況

データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) (以下「本事業」という。) は、マテリアル分野において、従来の試行・経験型研究にデータ駆動型研究を取り入れた次世代の研究手法の確立及び全国展開を目指すとともに、確立した次世代の研究手法を用いて、カーボンニュートラル、Society 5.0、レジリエンス国家、Well-Being 社会の実現に重要な役割を果たす革新的な機能を有するマテリアルの効率的な創出を目指している。

本事業では、事業目的の達成に向けて、令和4年度の本格実施からの約9年間の事業期間を3つのフェーズに分けて推進している。本中間評価が対象とする最初のフェーズ (フェーズ1:令和4年度本格実施～令和7年3月31日) においては、材料研究のデジタルトランスフォーメーション (以下「DX」という。) に向けた研究基盤構築及び体制構築を目指し、「データ駆動型研究手法及び研究ツールの開発・検証」、「データ駆動型研究手法を実践できる人材の育成」を中心に実施することとしている。

4つの社会像に貢献するマテリアル分野の英知が結集した「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点」、「データ創出・活用型磁性材料研究拠点」「智慧とデータが拓くエレクトロニクス新材料開発拠点」、「極限環境対応構造材料研究拠点」、「バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全循環型バイオアダプティブ材料の創出拠点」の5つの拠点を形成するとともに、各拠点での効率的な成果創出に向けて、研究手法及び研究ツールの共同開発、共用化及び普及活動や、事業全体の広報活動など、横串活動を行う全拠点の関係者が参画する「データ連携部会」を設置している。

各拠点では、拠点を代表する拠点長の下に、拠点運営を補佐する企画マネージャーの配置や、拠点が目指すビジョンに対して研究課題毎にプロジェクトリーダー (PL) を配置するとともに、課題を横断する4つのグループ (材料創製、理論計算、計測評価、データ活動促進) が設置されている。これらの体制により、データ駆動型研究を効率的に推進する体制が構築され、データ駆動型研究手法・ツールの開発・検証、革新的材料の創出に向けた活動、データ駆動型研究手法に関するセミナー・研修などの実施、拠点内での研究活動を通じたデータ駆動型研究の実践により、人材育成が着実に行われている。

データ連携部会では、事業全体の効果的かつ効率的な事業運営、成果の発信に向けて、全拠点が参加する全体部会と目的に沿ったワーキンググループを開催し、各拠点の課題が有機的に連携する体制が構築されている。また、本事業のポータルサイトやデータ駆動型研究の手法や研究事例を紹介する web サイトの開設・運用を行い、データ駆動型研究の裾野を広げる活動が行われている。加えて、ハンズオンセミナーやデータ活用に関する基礎知識を得るための研修などを開催するとともに、参加者からの評価も高く、データ駆動型研究手法を実践できる人材の育成に寄与している。

本事業は、令和4年度から令和5年度までに、査読付論文数 213 報、被引用数 404 報となっており、順調に成果が創出されている。また、令和4年度から令和6年度 (令和6年5月17日時点) までに、セミナー・研修・講演会などの公開イベントの開催数 53 回、参画者数延べ 6,061 人となっており、我が国のデータ駆動型研究の底上げと拡大に大きく貢献している。

(2) 各観点の再評価

<必要性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
	定量的	定性的	
マテリアル研究を従来の試行・経験型研究に加え、データ駆動型研究との両輪とする施策の意義	定量的	-	-
	定性的	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	前・中
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	定量的	-	-
	定性的	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	前・中

○マテリアル研究を従来の試行・経験型研究に加え、データ駆動型研究との両輪とする施策の意義

マテリアル革新力強化戦略(令和3年4月27日 統合イノベーション戦略推進会議決定)では、「マテリアル研究開発のDXを一気に加速し、データ活用型研究開発の新たなモデルを世界に先駆けて確立することにより、我が国のマテリアル革新力を高める。」とされており、このような戦略の下、推進している事業の一つである。当該戦略の下で、文部科学省が推進するマテリアルDXプラットフォームの中心となる一事業として、データ駆動型研究手法・ツールの開発とその全国展開、従来の試行・経験型研究手法に加え、データ駆動型研究手法を取り入れた新たな材料創出を行うフラグシッププロジェクトとして位置づけられている。また、統合イノベーション戦略2024(令和6年6月4日 閣議決定)においても、マテリアルDXプラットフォームの着実な整備や生成AI等の最新の研究手法の開発・導入による、データ駆動型研究による成果創出の加速、研究開発や製造プロセスの自動化・高速化、AIを活用したデータ解析等による研究開発等の効率化・高度化の推進が求められている。

多数の成果が論文として報告されるとともに、既存磁石化合物で最も優れた物質定数を示す磁石化合物よりも優れた新規化合物の発見やコンビナトリアル材料創製とハイスループット特性評価法による一連の時間短縮など、データ駆動型研究手法による新たな材料探索や材料探索の迅速化などの成果が出ており、我が国のマテリアル革新力の強化に資する成果が出ている。

また、データ駆動型研究が世界の潮流となる中で、諸外国が大規模な投資によるデータ駆動型研究の推進を加速させている。我が国の産業界においても、マテリアルズ・インフォマティクスを活用による効率的な素材・材料の開発が進むなど、データ駆動型研究の関心が高い。そのような中で、データ駆動型研究に主眼を置きつつも、従来の試行・経験型研究と融合を図る本事業の取組は、我が国の優秀なマテリアル研究人材の強みを最大限活かしたものであるとともに、従来から蓄積されてきた高品質なデータを有効に活用するものであり、マテリアル革新力の強化に資する取組内容となっている。

○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

各拠点では、本事業への提案段階より産業界の拠点運営等へのコミットメントを明示するとともに、各拠点での研究活動においては産業界アドバイザーの参加など、産業界への成果の還元や創出された成果の社会実装を見据えた拠点運営が行われている。開発されたデータ駆動型研究手法・ツールについては、講演会や成果報告会等の公開イベントによる拠点外・事業外への積極的な発信を行うなど、広く成果が活用されることを意識した拠点運営を実施し、公開イベントには事業全体として産業界を含めて参画機関数 318 機関（令和5年度実績）となっており、産業界からの関心も高い。また、セミナー・研修・ワークショップ等の開催、大学院プログラムの開講など、データ駆動型研究を実践できる人材の育成を促進し、産業界の人材及び次世代の人材育成に貢献することで、ひいてはマテリアル産業競争力を支える基盤技術強化にも貢献している。加えて、データ駆動型研究自体に産業界の関心度が高い中で、研究手法・ツールの公開、一般に活用できる形式での高品質なデータの創出・蓄積が進められていることから、マテリアル産業の競争力強化に資する。

上述の通り、本事業は、データ駆動型研究手法を取り入れた新たな材料創出を行うフラグシッププロジェクトとして重要な役割を果たすとともに、既に我が国のマテリアル革新力を高めるための成果やマテリアル産業競争力を支える基盤技術強化に向けた成果が出始め、その発信が進んでいるものと考えられる。

以上より、本事業の必要性は高く、今後の更なる取組が期待される。

<有効性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
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	定性的	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	前
FS 期間設置・コミュニティ形成・ガバナリングボード設置による研究推進の有効性	定性的	・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 ・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	前
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	定性的	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	前
成果の創出状況、開発されたデータ駆動型研究手法の材料研究	定量的		-
	定性的	データ駆動型研究により革新的な知の創出または研究開発の成果が出ている	中

DX への有効性		か、また質的な向上があるか	
4つの社会像に対する各拠点の成果の有効性	定量的	-	-
	定性的	・ 拠点から得られた成果・材料が当該の社会像を解決するまでの道筋が示されているか ・ 産業界との連携方策の検討が進んでいるか	中
開発された研究手法の拠点内共有・対外発信、人材育成の活動の有効性	定量的	-	-
	定性的	・ 開発された研究手法の拠点内共有や対外発信に進捗がみられるか ・ また、人材育成の活動が進んでいるか、マテリアル×データ人材のシナジー効果はあるか	中

○成果の創出状況、開発されたデータ駆動型研究手法の材料研究 DX への有効性

本事業は、我が国の各材料領域でのトップ研究者を中心とした5つの拠点が形成されデータ駆動型研究が順調に推進されている。従来の試行・経験型研究では見いだせなかった新材料の探索や、従来手法での材料探索時間に比べて数十倍の効率化が図られるなどの成果が出ている。具体的には、約2年の事業期間で、査読付論文236報、被引用数404報など、活動期間に比して活発に成果が創出されているとともに、特筆すべき論文成果も出ている。

計算シミュレーションモデルの開発や、機械学習による新たな気づきを得るなど、今後、新材料の創出に向けての着実な成果が得られている。例えば、合金の引っ張り強度や疲労き裂伝搬挙動などを予測する特性探索モジュールの開発、機械学習によるリチウム金属の反応活性に対する影響因子の解析を通じた複数の新規有望電解液の提示、機械学習を用いた高分子設計により PEG 代替高分子を複数候補発見などが進んでいる。また、ハイスループット材料探索により60日程度の探索が必要であったものが1日程度の探索が可能(※)になり、既存磁石化合物で最も優れた物質定数を示す磁石化合物よりも優れた新規磁石化合物が発見されるなど、データ駆動型研究に資する成果も出ている。加えて、ロボット実験装置と材料探索用人工知能を人が介入することなく連携させることで自律自動材料探索を可能とするための汎用ソフトウェア(NIMO)や、コンビナトリアル材料創製とハイスループット特性評価法を組み合わせることで材料の創製から評価までの時間短縮など効果的な実験手法の開発も進捗している。

(※) 従来、新規磁石化合物探索において、約20件の実験データを60日かけて取得していたが、本事例では約20件の実験データを1日で実験データ取得することにより成果が得られた。

○4つの社会課題に対する各拠点の成果の有効性

各拠点では、本事業で目指す4つの社会像への貢献や、達成目標までの道筋を示したロードマップを策定し、拠点全体としての目標設定を明確にしつつ研究が推進されている。各拠点のロードマップについては、プログラム運営委員会やプログラム・ディレクター(以下、「PD」という。)、サブプログラム・ディレクター(以下、「sPD」という。)、プログラム・オフィサー(以下、「PO」という。)と拠点との意見交換などで、その妥当性や道筋について

の議論も継続して実施されており、適宜更新が行われるとともに、その進捗についても評価がなされている。

拠点における研究成果であるデータ駆動型研究手法・ツールなどの高度化や当該手法・ツールを活用した新材料の社会実装に向けて、企業等が参画するコンソーシアムやフォーラムなどを設立し、知見の共有や開発された研究手法の発信などが実施されている。コンソーシアムには延べ 60 社以上の企業が参画（予定含む。）しており、社会実装に向けた企業との連携が進められている。

○開発された研究手法の拠点内共有・対外発信、人材育成の活動の有効性

開発された研究手法・ツールについては、各拠点の4つのグループが横串となり、課題内での活用も進んでいる。各拠点において、セミナー・研修・ワークショップ、講演会の開催や、大学院プログラムの開講、データ連携部会において、ハンズオンセミナーやデータ活用に関する基礎知識を得るための研修などを実施し、事業全体として、データ×マテリアル人材の育成を積極的に推進している。公開イベントと大学院プログラムを合わせ、開催数延べ 128 回、参加者数延べ 6,351 人となり、活発な活動の展開により多数の参加があったとともに、いくつかのハンズオンセミナーでは、90%以上の参加者から役に立つとのアンケート結果が得られ、有効な活動がなされている。加えて、一般向けのシンポジウム・講演会から大学院プログラムまで幅広い対象に向けた活動により、人材育成のみならず、研究手法・ツールの対外発信にもつながっている。

上述の通り、本事業は、データ駆動型研究における手法・ツールなどの成果が量・質ともに順調に出ているとともに、開発された成果の対外発信などが積極的になされている。また、人材育成についても、積極的に活動がなされており、セミナー等への参加者も多く、かつ、参加者の満足度も高いことから、我が国のマテリアル分野における研究開発のDXによるイノベーション創出に貢献する有効な取組であると考えられる。

以上より、本事業の有効性は高く、今後の更なる取組が期待される。

<効率性>

評価項目	評価基準		評価項目・評価基準の適用時期
データ駆動型研究の推進体制における施策妥当性	定性的	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	前
データ創出を加速するための施策妥当性	定性的	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	前
事業運営の妥当性と効率性	定量的	-	-
	定性的	・プログラム運営委員は各研究拠点の状況を把握できていたか。	中

		<ul style="list-style-type: none"> ・各拠点へ適切な指示が適切なタイミングで出され、効率的な事業運営がなされていたか。 ・世界の趨勢を捉えた事業運営がなされていたか。 	
研究推進における拠点体制の効率性	定量的	-	-
	定性的	<ul style="list-style-type: none"> ・従来型研究開発事業の課題に対処し、効率的に研究を推進できているか ・課題×拠点内4グループ（創製、測定、計算、データ利用）は妥当か。 ・事業終了後も見据えた体制の継続性の検討はなされているか。 ・開かれた拠点づくり（他拠点や大型先端施設、ARIMとの連携など）が進んでいるか。 	中

○事業運営の妥当性と効率性

本事業実施期間中10回（FS期間含む。）のプログラム運営委員会を開催し、各拠点の進捗状況や評価などを実施するとともに、各回終了後に拠点側に対して、指示事項をまとめて連絡するなど、事業全体の方向性を都度示している。また、プログラム運営委員会によるサイトビジットを2年に1回実施し、拠点側の研究者とのコミュニケーションや拠点の活動状況の把握などを行っている。加えて、PD、sPD、POは、データ連携部会への出席や、企画運営会議への参加など、事業の関係者が集う会議体に積極的に参加し、事業全体の活動状況・進捗の把握が行われている。プログラム運営委員会と各拠点の実務的な連携を行うための企画運営会議を設置し、各拠点での運営における課題や状況の共有を実施することで、事業全体として拠点運営の効果的かつ効率的な活動も実施されている。

データ連携部会を設置し、マテリアルDXプラットフォームの下で推進されている他事業（ARIM、データ中核拠点）との連携や、本事業の成果に関する広報、普及活動などの実施、マテリアル×データ人材の育成に関するセミナー等の実施など、事業全体として効果的かつ効率的な活動が実施されている。具体的には、全拠点が参加する全体部会と目的に沿ったワーキンググループ（研究DX推進、計算基盤）を延べ28回開催し、各拠点の課題を共有し有機的に連携する体制が構築されている。また、本事業のポータルサイト及びデータ駆動型研究の手法や研究事例を紹介するwebサイトとして「Material Data Commons (MatDaCs)」が開設され、解析ツールとデータベースを公開することで、データ駆動型研究の裾野を広げる活動が行われている。

また、各拠点において国際会議の開催や出席、事業全体として米国「Material Genome Initiative (MGI)」関連プログラムとの連携に向けた米国側との協議開始など、我が国のデータ駆動型研究の国際的なプレゼンス向上や国際動向も視野に入れた事業運営がなされている。

○研究推進における拠点体制の効率性

各拠点においては、拠点全体をまとめる拠点長、拠点長を補佐する企画マネージャーが

配置され、拠点全体のマネジメントがなされている。研究課題の実施においては、拠点長のリーダーシップの下、各課題ごとにプロジェクトリーダー（PL）が配置され、PLを中心に、各課題の研究開発が推進されている。各課題の推進体制のみならず各課題を完結させるために必要となる4つのグループ（材料創製・理論計算・計測評価・データ活用促進）が各課題の横串となるよう設置され、各グループをマネジメントするグループリーダー（GL）が配置されている。拠点全体での定期的な全体会議の開催など、各課題・グループ間での有機的な連携を図り、各拠点として効果的かつ効率的な成果創出につながる体制が構築されている。その結果として、データ創出・蓄積からデータ活用手法・ツールの開発に関する成果が上がっていると同時に各課題が順調に進捗していることから、拠点長のリーダーシップの下、これらの拠点体制が適切に機能しているといえる。

拠点内で若手研究者を中心とした研究プロジェクト提案の実施、大学院プログラムや若手研究者を対象としたワークショップによる人材育成など、事業終了後も見据えた継続性のある体制構築に向けた活動も進んでいる。

また、開かれた拠点づくりに向けて、各拠点による積極的な対外的発信だけでなく、データ連携部会による実施拠点間での連携活動も積極的に展開されている。例えば、拠点間連携を進める技術課題として、走査電子顕微鏡（SEM）や透過電子顕微鏡（TEM）等の組織画像データからの特徴量抽出、異なる複数の第一原理計算アプリからの計算結果の統合などが検討されている。加えて、ARIMとは、例えば、拠点内にARIM実施機関を含めた体制を構築するなど、共用装置を利用したデータ創出・蓄積などの連携が進んでいる。データ中核拠点とは、本事業で創出されたデータを、データ中核拠点が運用するシステム RDE への登録を行うなど、マテリアル DX プラットフォーム全体での連携が積極的になされている。全拠点で連携した「富岳」活用に関するプロジェクト（「富岳」成果創出加速プログラム DDCoMS）の実施、SPRING-8 を用いた材料データの取得、Nano Terasu の活用についても具体的な検討を行うなど、多様なデータ創出・活用を図るために、大型施設の積極的な活用・連携も進んでいる。

上述の通り、本事業は、プログラム運営委員会における事業のマネジメントが適切になされるとともに、各拠点においては効率的な運営体制の構築とその運用がなされている。また、事業終了後を見据えた若手研究者の育成や、他事業との連携が進んでいることで、効率的に事業全体が運営されていると考えられる。

以上より、本事業の効率性は高く、今後の更なる取組が期待される。

（3）科学技術・イノベーション基本計画等の上位施策への貢献状況

第6期科学技術・イノベーション基本計画においては、「マテリアル革新力強化戦略」に基づき、データ駆動型研究開発基盤の整備と物事の本質の追及による新たな価値の創出、人材育成等の持続発展性の確保等、当該戦略に掲げられた取組を強力に推進することが示されている。

当該戦略において、重要なマテリアル技術・実装領域での戦略的研究開発の推進が目標として掲げられている。具体的な方策として、重要な技術領域を特定したバックキャストによる戦略型の研究と、研究者の自由な発意に基づく多様かつ挑戦的な創発型の研究の双

方の充実が示されている。

本事業は、4つの社会像に貢献するマテリアルの具体的な重点技術領域として、当該戦略に基づく8つの領域におけるデータ利活用によるデータ駆動型研究の開発に取り組んでおり、本事業で創出された研究開発手法や成果に鑑み、我が国の強みであるマテリアル分野の研究開発を飛躍的に加速させる。

さらに、本事業は、各拠点で生み出された高品質なデータの蓄積や、得られた成果の積極的な共有・対外発信が行われており、我が国のデータ駆動型研究の旗艦的な役割を果たしている。

以上から、本施策は上位施策に貢献していると考えられる。

(4) 事前評価結果時又は直近の中間評価結果時の指摘事項とその対応状況

<指摘事項>

中間評価はマテリアル研究開発が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、データ駆動型研究の必要性・有効性・効率性を評価するため、3年目と6年目、事後評価は10年目に実施する。

<対応状況>

上記指摘を受け、中間評価を3年目の令和6年度に実施した結果が、本中間評価結果(案)にあたる。6年目の評価は令和9年度、事後評価は最終年度の翌年令和13年度を予定。

(5) 今後の研究開発の方向性

本課題は「継続」で「中止」、「方向転換」する(いずれかに丸をつける)。

理由:

本事業は、従来の試行・経験型研究では見いだせなかった新材料の探索や効率的な材料の探索など効率的な体制でデータ駆動型研究手法・ツールを含めた成果が着実に創出され我が国のマテリアル分野の研究開発の加速や、多数のセミナー・シンポジウムを開催するなどデータ駆動型研究の普及・人材育成に向けた活動が積極的になされ不足するデータ×マテリアルを実践できる人材の育成に大きく貢献していることから、今後とも本事業を継続することが望ましい。引き続き、本事業の加速により、我が国のマテリアル分野における国際競争力の強化や、革新的マテリアルの創出を期待する。

<本課題の改善に向けた指摘事項>

- ・ 諸外国においてもデータ駆動型研究が活発化する中で、我が国のマテリアル分野の国際競争力の維持・発展に向けて、諸外国の取組との比較(国際的なベンチマーキングなど)をしつつ、強みを明確にし、各拠点で研究開発が実施される必要がある。
- ・ データ駆動型研究の確立に向けて、諸外国では最新技術(生成AI、大規模言語モデル等)の活用や、ロボットとAIの融合による自動・自律実験が加速する中で、我が国においても、本事業のフェーズ2(令和7年度～9年度)に向けた取組の加速を図るための予算

を確保することが重要である。

- ・ 今後、更なる革新的な成果の創出がなされることが期待され、材料としての成果のみならず、手法・ツールについても、積極的な対外発信を継続することで、国際的なプレゼンスの維持・向上や、国内のマテリアル分野における研究者へのデータ駆動型研究の浸透を図っていくことが重要である。さらには、マテリアル分野、情報分野等の将来を担う人材の育成・輩出が進むことを期待する。
- ・ 開発する研究手法・ツールについては、各拠点に閉じず横展開を図るためにも、汎用化が進むことを期待する。
- ・ 社会実装に向けては、産学がより一層連携するための取組（コンソーシアムの強化など）が必要であるとともに、新たに創出された材料や開発されたツール、データ等のオープン・クローズ戦略、開発された装置（データフォーマット含む。）の標準化なども検討することが重要である。
- ・ 拠点間での連携による取組も検討されているが、他拠点でのデータ活用に向けたデータ蓄積の課題（再現性のあるデータ収集、分析・評価・合成データなどの紐づけなど）を整理しつつ、蓄積されたデータの活用による成果事例が創出されることで、マテリアル DX プラットフォームの価値が示されることを期待する。

（6）その他

特になし