

データ駆動材料開発パートナーシップ

Data-driven Materials Research Partnership



統合型材料開発・情報基盤部門

内堀 千尋 UCHIBORI.Chihiro@nims.go.jp

事業の狙い

- NIMSのデータ駆動型材料開発やデータプラットフォームに関する研究成果や取組み等を公開することにより
 - (1) 産業界における研究開発に基礎的な観点から貢献し
 - (2) NIMSとの共同研究等へ発展させるための足場とする

事業の要点

- パートナー会員に対して下記活動を準備
 - (1) NIMS研究者による研究発表会、ホットなトピックスの研究講演会、共同研究相談会、研究者との交流機会
 - (2) NIMSが保有するデータ駆動材料開発に活用できる素材等の提供

事業の概要

データ駆動材料開発に向けたNIMSの取り組み

デジタル化による材料開発効率化への期待

欲しい性能から 最適な材料をデザインする

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

元素の組み合わせ
複雑なプロセス

AIとビッグデータで高速開発

JFEスチールカタログより

AI+ビッグデータ活用に向けたNIMSの取り組み

機能から物質を探索
Materials・インフォマティクス

材料の実用化を加速
Materialsインテグレーション

内閣府SIP第2期
「統合材料開発システムによるマテリアル革命」
逆問題マテリアルズインテグレーション基盤の構築

SIP第1期「革新的構造材料」
MIシステムの開発 (2014-2018)

2015.7~
統合型材料開発システムの実現

2017.4~
データを作り、貯め、活用する
マテリアルズ・リサーチ・バンク (MRB)
材料データプラットフォームの構築

AI

MI²i

MI²i MATERIALS INTEGRATION

Data

データプラットフォームセンター (DPFC) における取り組み

機械可読性を高める計測データのメタ情報抽出ツール

実験装置いろいろ 装置パラメータ (出力状態) データをためる

主要パラメータ抽出とメタ情報付与のXML形式

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 高分子

AtomWork Adv. 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

国産高分子データベース
33万物性 (2019.4現在)
・ 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
Kinzoku 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
CCTD CCT曲線図: 214; 硬度: 2213; 金属組織図: 627

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

データをつくる データをためる・つかう

先進データベースの構築
-人と機械学習でスケールアップ

実験データの自動収集
-IoT無線で即座に転送

集めるデータを統合・機械可読化

解析アプリ
変換ツール

大容量・高速解析サーバ
10 PB / 0.5 PFLOPS

材料開発
MI²i機械学習ツール
Mi²i
SIP: MIntシステム
MI²i MATERIALS INTEGRATION

共同研究
アカデミア 民間

データ駆動材料開発パートナーシップ (2020. 4. 1 発足予定)

- NIMSのデータ駆動材料開発やデータプラットフォームに関する最新の研究成果や取組み等を紹介
 - 共同研究を視野に入れた連携機会の提供
 - MI²i事業で得られた成果物や各種資料の提供
 - 年会費 10万円
 - MaDIS研究講演会: 2回/年
 - MaDIS研究成果報告会・連携相談会: 6回程度/年
- ※いずれもNIMSにて開催
- 入会方法や会則等は今後HP等にて告知予定

お問い合わせ先

統合型材料開発・情報基盤部門 運営統括室
データ駆動材料開発パートナーシップ事務局
TEL: 029-860-4891
MaDIS-partnership@ml.nims.go.jp



まとめ

- データ駆動材料開発パートナーシップが発足
- NIMSのデータ駆動材料開発の最新成果や取組みを公開
- 共同研究等連携機会を提供
- MI²i事業で得られた成果物や各種資料を提供