



# MI<sup>2</sup>Iプロジェクトのこれまでと今後

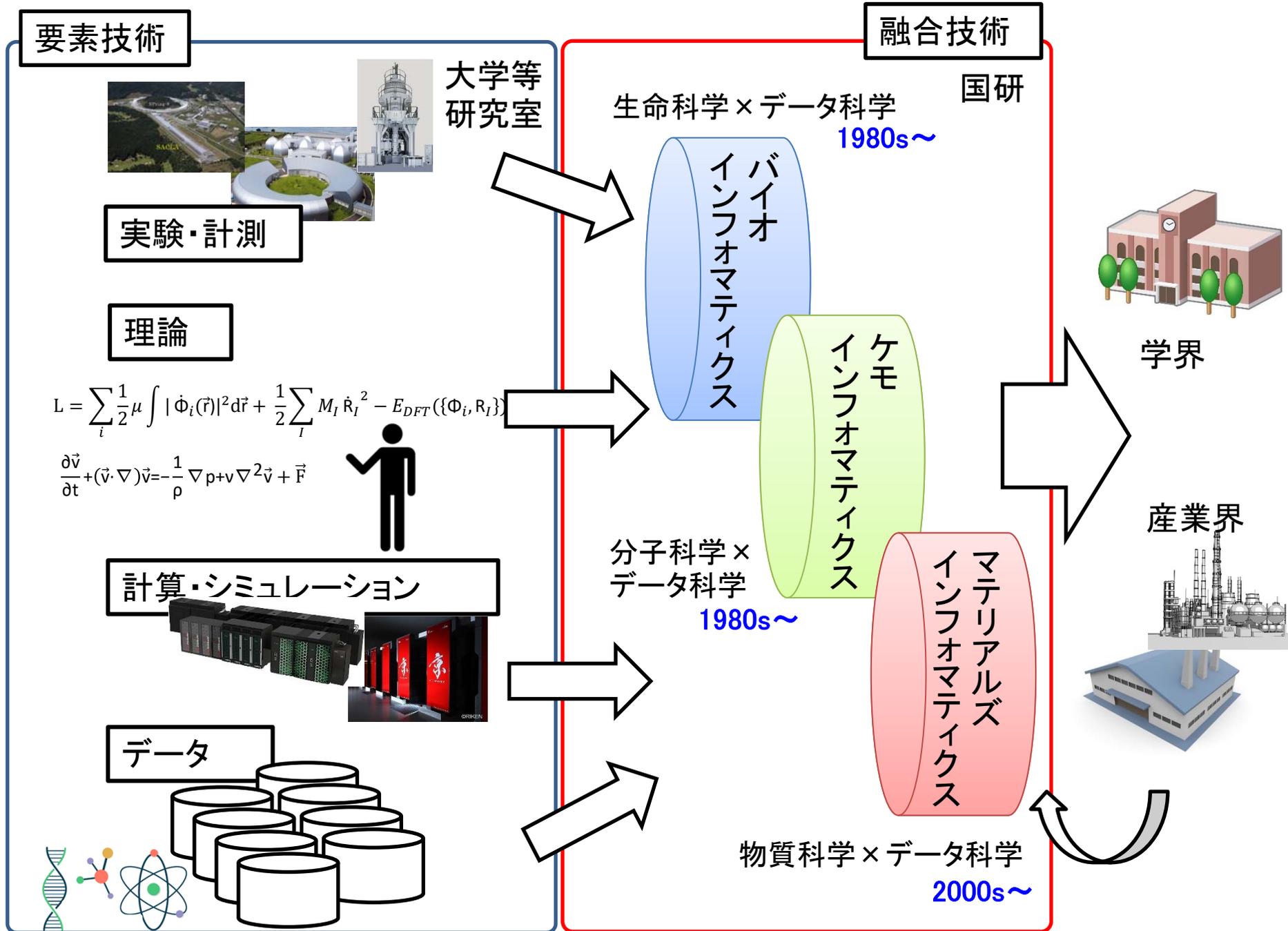
MI<sup>2</sup>I PL/NIMS

伊藤 聡 ITOH.Satoshi@nims.go.jp

2020年2月20日



# X-インフォマティクス = 既存分野 × データ科学



## プロジェクト立上げの経緯(伊藤私見)

寺倉清之 固体電子論と材料科学 日本金属学会会報 第26巻第7号(1987)583-587.

『計算によって得られる原子についてのより詳しい情報をファイルしておき,それぞれの原子が固体として存在する場合に発現する性質が原子のどのような側面と強い相関があるのかということを調べることは重要な仕事であろう.勿論計算で得られるすべての量をファイルすることは無意味であり,適切に縮約された情報にしなくてはならない.』



## プロジェクト立上げの経緯(伊藤私見)

2007年3月

(ワークショップ報告書) 科学技術未来戦略ワークショップ～新材料設計・探索～報告書  
／CRDS-FY2006-WR-01

エグゼクティブサマリー抜粋

以上を総括して研究開発投資が強く期待されている研究領域例を挙げれば、

- 6.より複雑な現象のシミュレーションを目指すマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション手法の深化とプログラム開発
- 7.材料探索の高速化・高効率化のための **マテリアル・インフォマティクスの構築**
- 8.戦略的材料データベースの **構築と継続的アップデート**

2007年10月

(戦略プロポーザル) 元素戦略／CRDS-FY2007-SP-04

エグゼクティブサマリー抜粋

「元素戦略」における研究開発には、これまでの試行錯誤的なアプローチから脱却して、新しい材料を合理的に設計・探索する方法が必要である。それを実現するために、材料設計の基礎となる元素の特性に立脚した科学的知見の上で、最先端のナノテクノロジーの知見、計算科学や **マテリアルインフォマティクス**、超高速探索法(ハイスループットテクノロジー、コンビナトリアルテクノロジー等)等の推進も有用であり、新しい物質・材料研究の方策を提供すると考えられる。

## プロジェクト立上げの経緯(伊藤私見)

2013年8月

(ワークショップ報告書) データを活用した設計型物質・材料研究(マテリアルズ・インフォマティクス)ワークショップ報告書 / CRDS-FY2013-WR-03

エグゼクティブサマリー抜粋

従来の理論・計算、物質創成、計測・解析という3本柱の取組みに加えて**インフォマティクス(データのマネジメント)の活用**に**真剣**に取り組むことが重要ではないかと考えられる。

2013年8月

(戦略プロポーザル) データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進 (マテリアルズ・インフォマティクス) / CRDS-FY2013-SP-01

エグゼクティブサマリー抜粋

物質・材料の「設計」に必要な新たな方法論として、マテリアルズ・インフォマティクス(materials informatics)を「計算機科学(データ科学、計算科学)と物質・材料の物理的・化学的性質に関する多様で膨大なデータとを駆使して、物質・材料科学の諸問題を解明するための科学技術的手法」と定義し、その**重要性を提案**する。

JST-CRDS  
島津フェロー



## JST イノベーションハブ構築支援事業 (研究開発法人を中核としたイノベーションの共創の場の形成)

### 施策のポイント

- 「イノベーションハブ」の形成による国立研究開発法人の機能強化(研究開発システムの改革)
  - イノベーションハブ方式は、研究開発法人の運営費交付金等による独自資金と、研究開発成果の最大化(飛躍)に向けて支援を行うJSTの資金をマッチングさせ、研究開発法人がイノベーションを駆動させる基盤を持つのに必要な改革を行うもの
  - JSTによる支援(5年程度を想定)を受ける研究開発法人は、その支援が終了した後も、イノベーションハブ方式の実施により会得した経験やノウハウを引き続き活用し、自立することを前提
- 中核となる国立研究開発法人が有す研究機能と研究基盤を軸(結節点)に、大学、産業界等の人材が糾合する場を創出
- 技術の統合化、システム化を目指したイノベーション創出機能を強化し、人材育成にも寄与

### 施策の概要

#### ① 明確な目標設定

研究開発法人の中長期目標・中長期計画にイノベーションハブへの取組内容を規程

#### ② JSTと研究開発法人の連携

JST

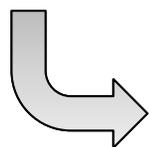
ファンディングを活用した人材糾合、研究成果の展開(起業化支援)、技術の調査・分析など

研究開発法人

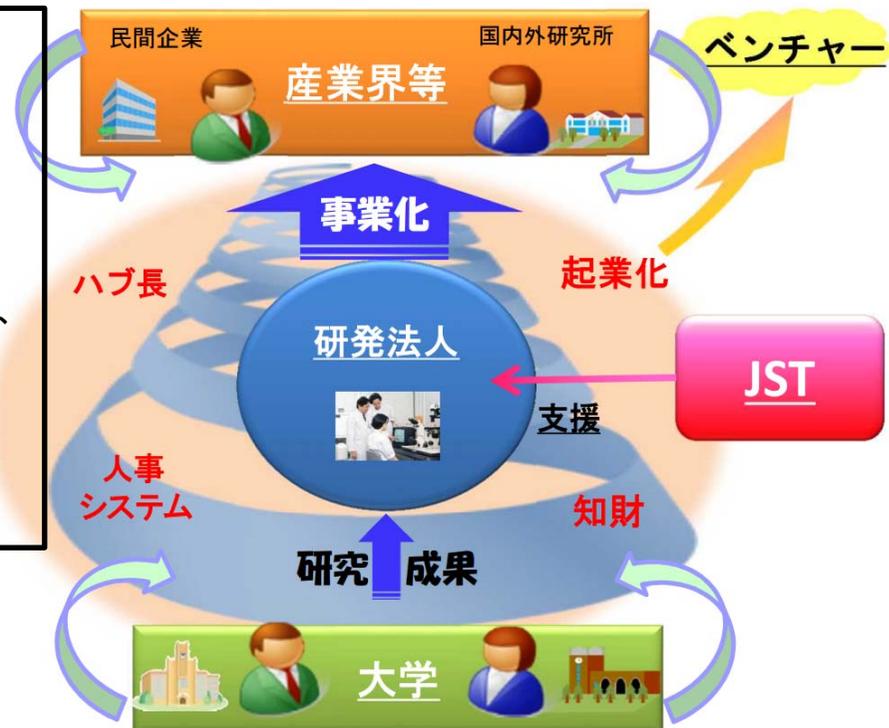
人材育成・交流の場の提供、コア技術をベースにした研究開発推進

#### ③ 法人ごとの特色ある新たな研究開発システム

クロスアポ、柔軟な給与・人事制度、連携大学院制度など



**JSTとNIMSのシナジー効果をより強く発揮させ、イノベーションハブとしての機能発現を加速**



# 研究事例

百の論より一つの証拠  
～ 手法の実験的検証

### 情報統合型の物質・材料設計:「分かる」ということ

- 物性を記述する各種最適記述子設計
- スモールデータに対する機械学習手法
- 意味論(オントロジー技術)による物性可視化
- 統計的最適化手法
- 事前学習済み機械学習モデルライブラリー
- 整合性の取れた物性連関図

### 情報統合型の物質・材料開発:「できる」から「できた」へ

- Na電池向け正極材の開発
- 半導体多層膜による波長選択性熱輻射材料の開発
- 転移学習を用いた高熱伝導性ポリマー開発
- 超低熱伝導性無機コンポジット材料開発
- ユビキタス元素のみを用いた最適組成熱電材料開発
- 結晶データベースを用いた圧力誘起超伝導物質の開発

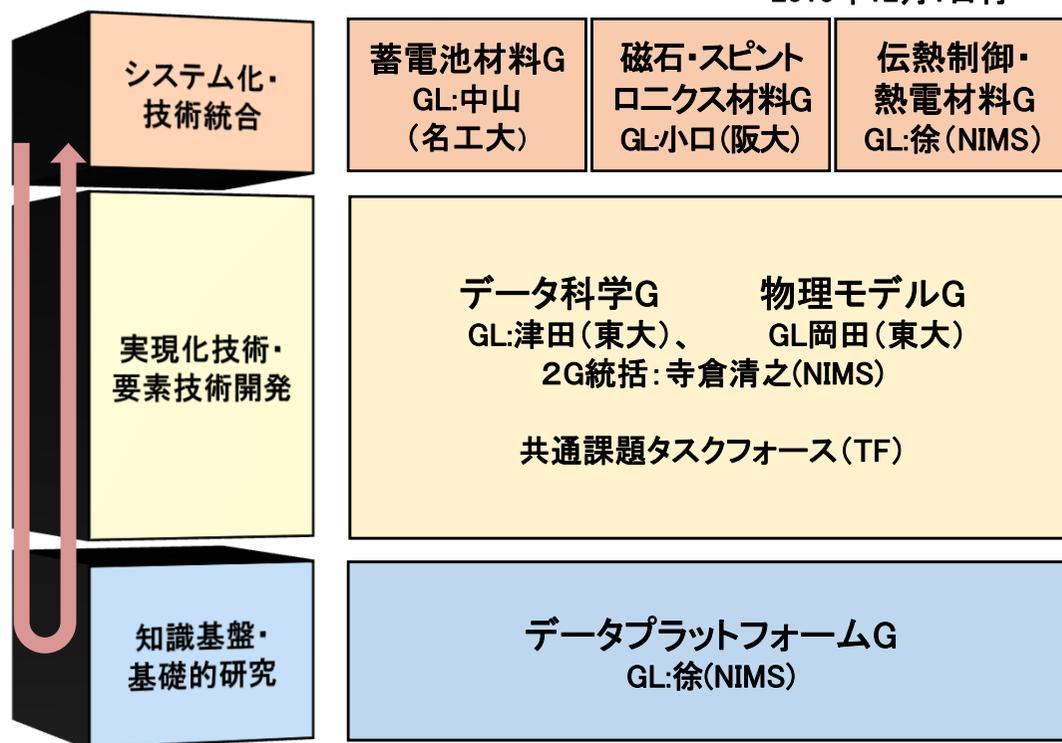
### 情報統合型の物質・材料設計開発:研究基盤構築

- 各種ソフトウェア/ツールの研究開発
- データプラットフォームのプロトタイピング

# 3層研究グループ

ベイズ、ベイズ、ベイズ...

2015年12月1日付



岡田GL→副PL



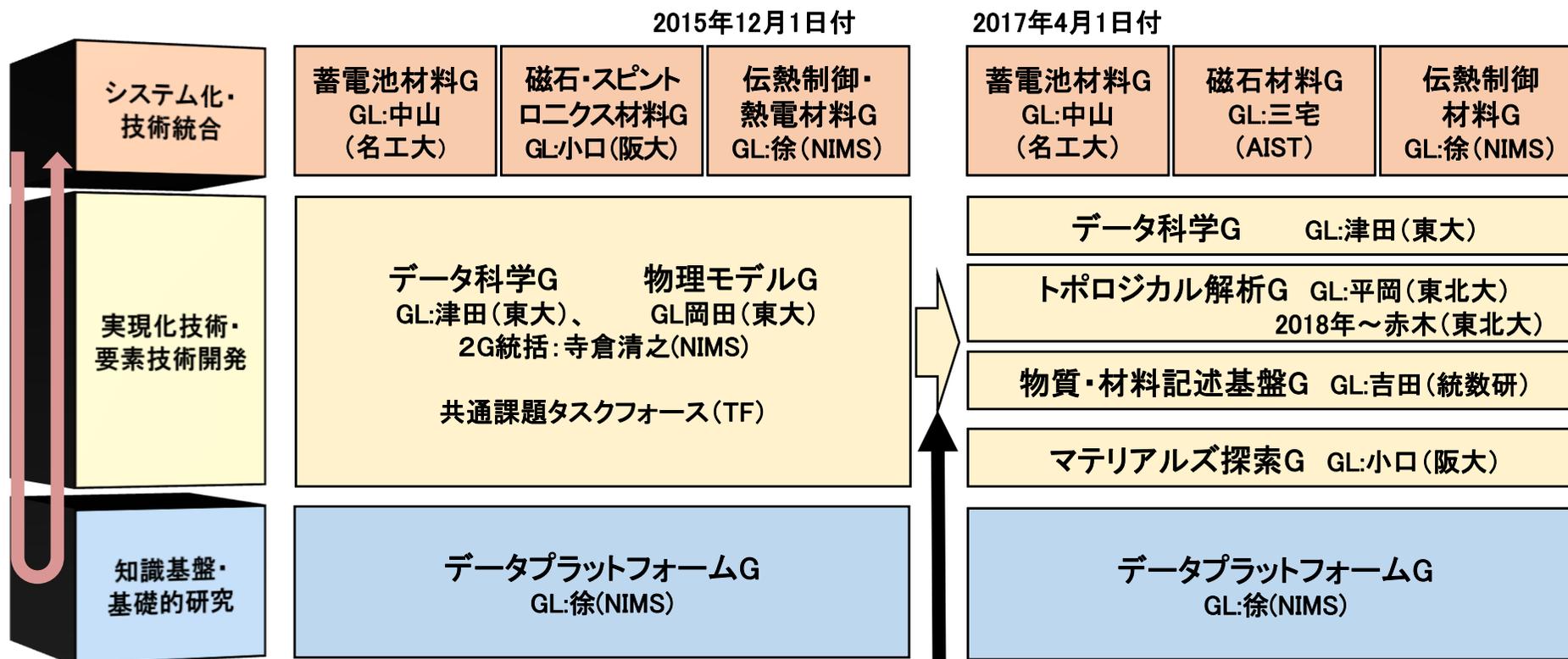
物理モデリングという視点と計測系への展開

津田GL



ベイズ最適化汎用パッケージの開発や...

# 3層研究グループ



MI<sup>2</sup>i外部諮問委員会答申を受け2017年度グループ再編  
(委員会開催:2017.1.11開催)

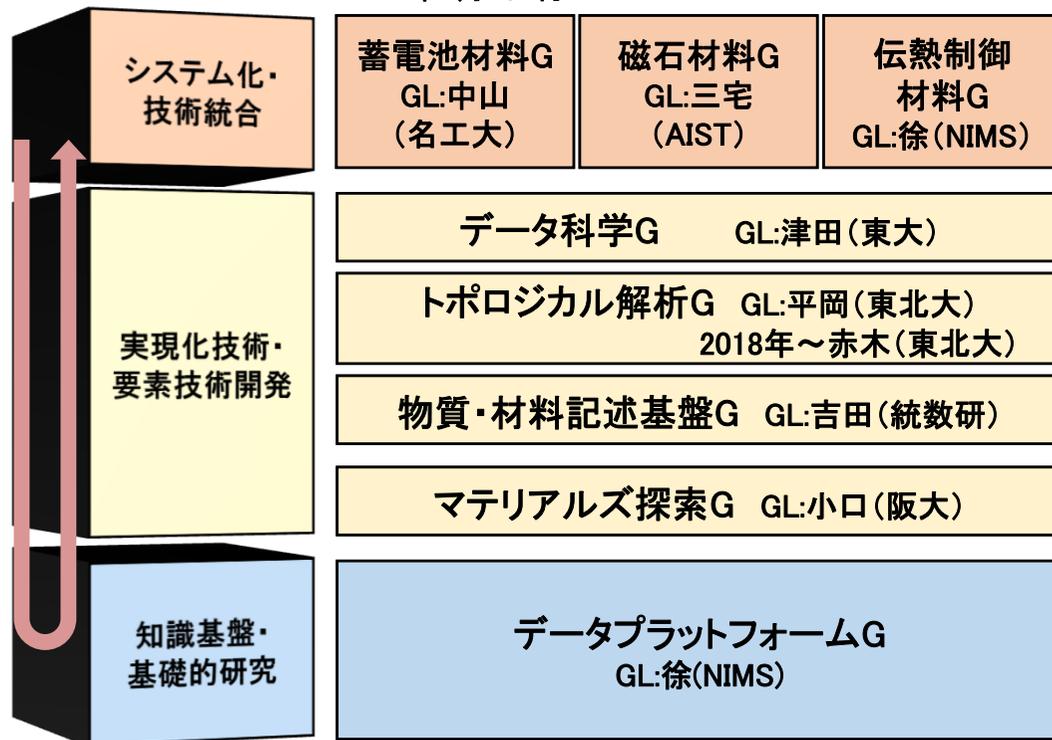
## グループ再編の目的

- 出口課題の先鋭化 ⇒ 磁石材料／伝熱制御材料G
- 横断課題の明確化 ⇒ トポロジカル解析／物質・材料記述基盤／マテリアルズ探索G

# 3層研究グループ

## 物質記述の新展開

2017年4月1日付



## パーシステントホモロジー解析



平岡GL ⇨ 赤木GL

## 物質記述基盤・記述子ライブラリー



吉田GL

## 記述子設計・安定構造推定



小口GL

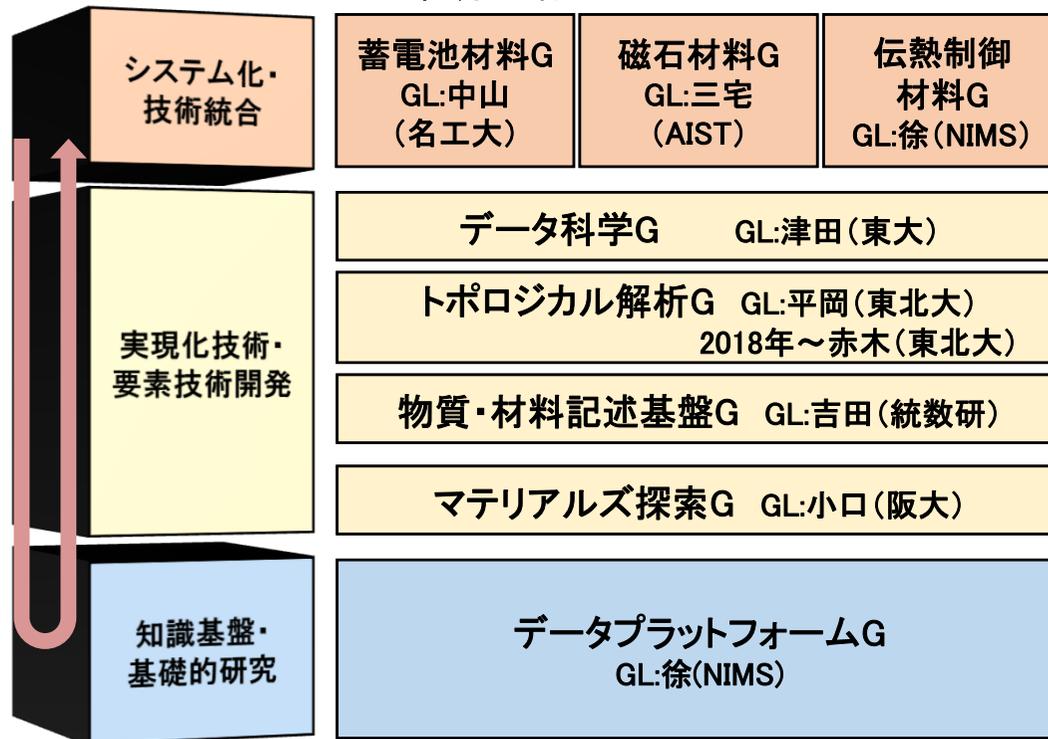
合成・試作による *Mi<sup>2</sup>i*  
方法論の実証



「できる」から「できた」へ

## 3層研究グループ

2017年4月1日付



ナトリウムイオン  
電池試作



中山GL

実験研究者との一体的な活動  
(クロスファンクショナルチーム)

熱物性制御材料の合成  
(無機、有機、熱電)



徐GL

元素戦略磁石材  
料拠点との連携

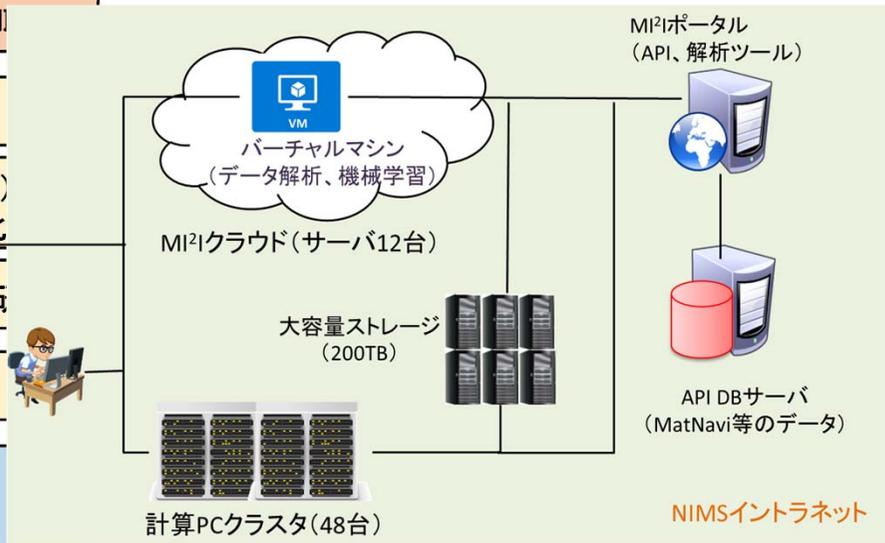
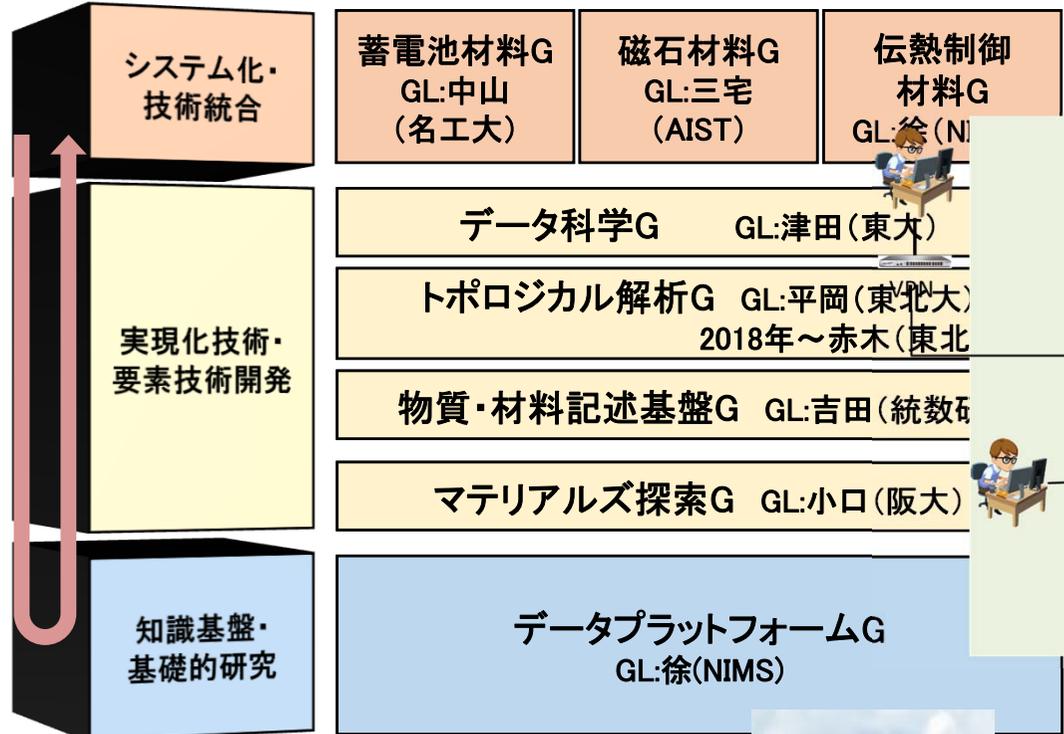


三宅GL

磁石材料の  
オントロジー

# 3層研究グループ

2017年4月1日付



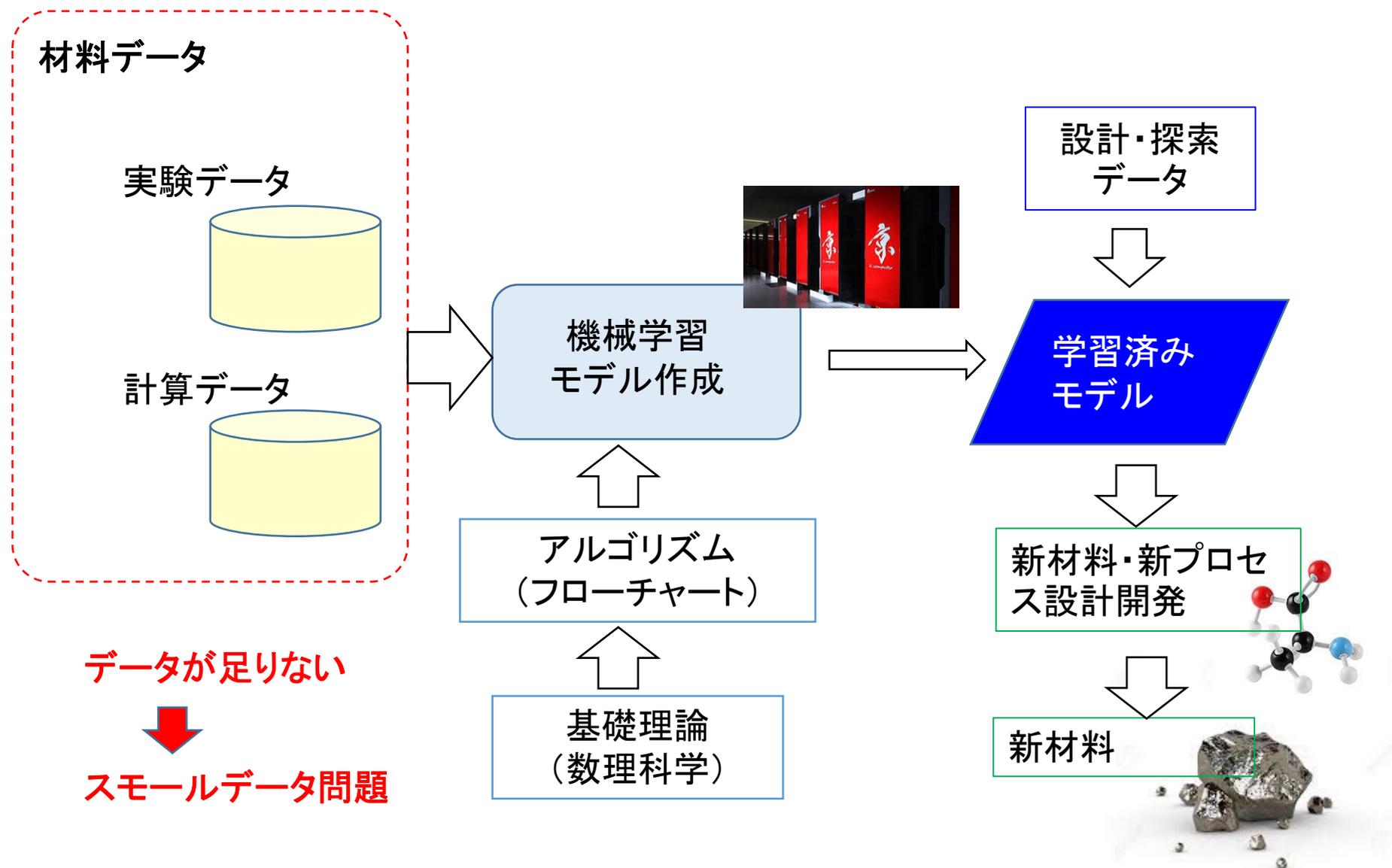
徐GL

データ、ツール、計算環境を備えた  
マテリアルズインフォマティクス向け  
データプラットフォームを試作



参画者、コンソーキング  
グループメンバーなどが試用

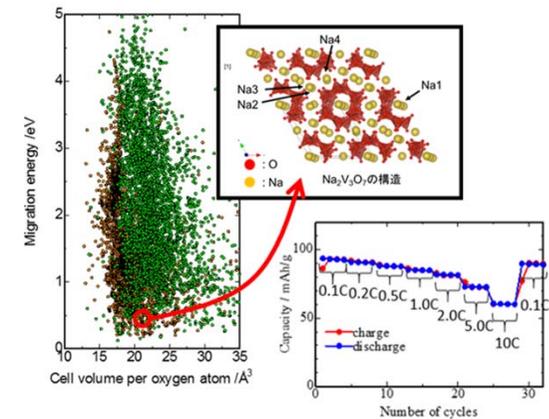
## マテリアルズインフォマティクスの手順



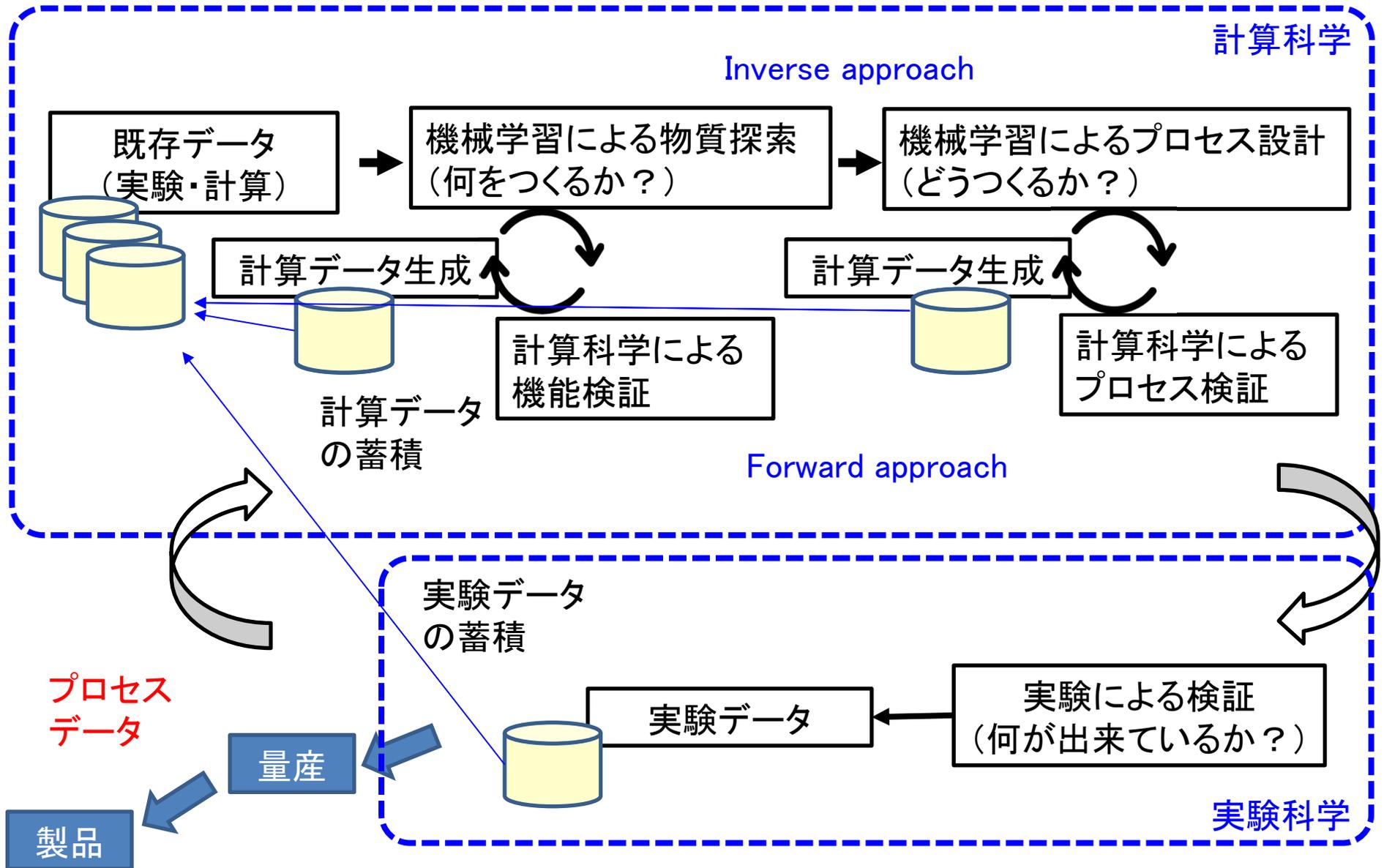
# スモールデータ問題に対する物質科学側からのアプローチ



- ・ 圧力誘起新規超伝導材料 ( $\text{SnBi}_2\text{Se}_4$ 、 $\text{PbBi}_2\text{Te}_4$ ) の開発
- ・ Na電池正極材 ( $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$ ) の開発
- ・ ...



# スモールデータ問題に対する物質科学側からのアプローチ

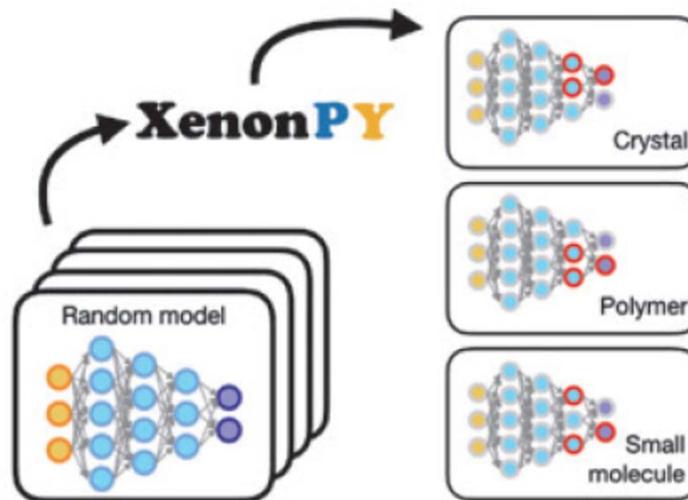


# スモールデータ問題に対するデータ科学側からのアプローチ

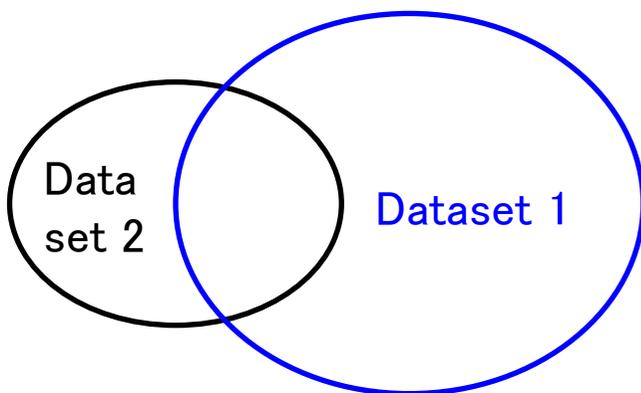
## Transfer Learning

記述子ライブラリと学習済み機械学習モデルを用意

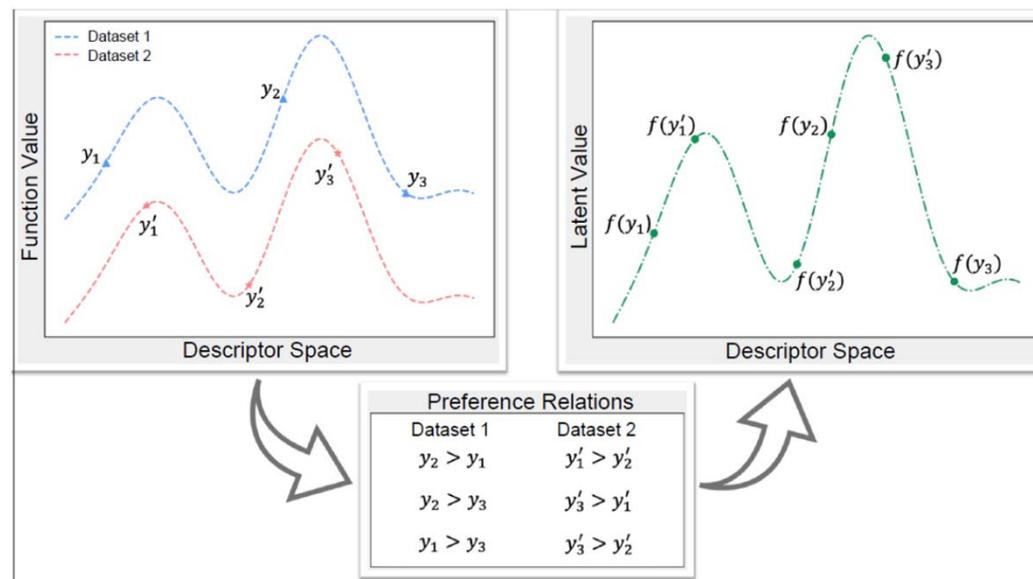
なぜ、うまくいくのか？  
なぜ、うまくいかないのか？  
物質科学的解析が今後の課題



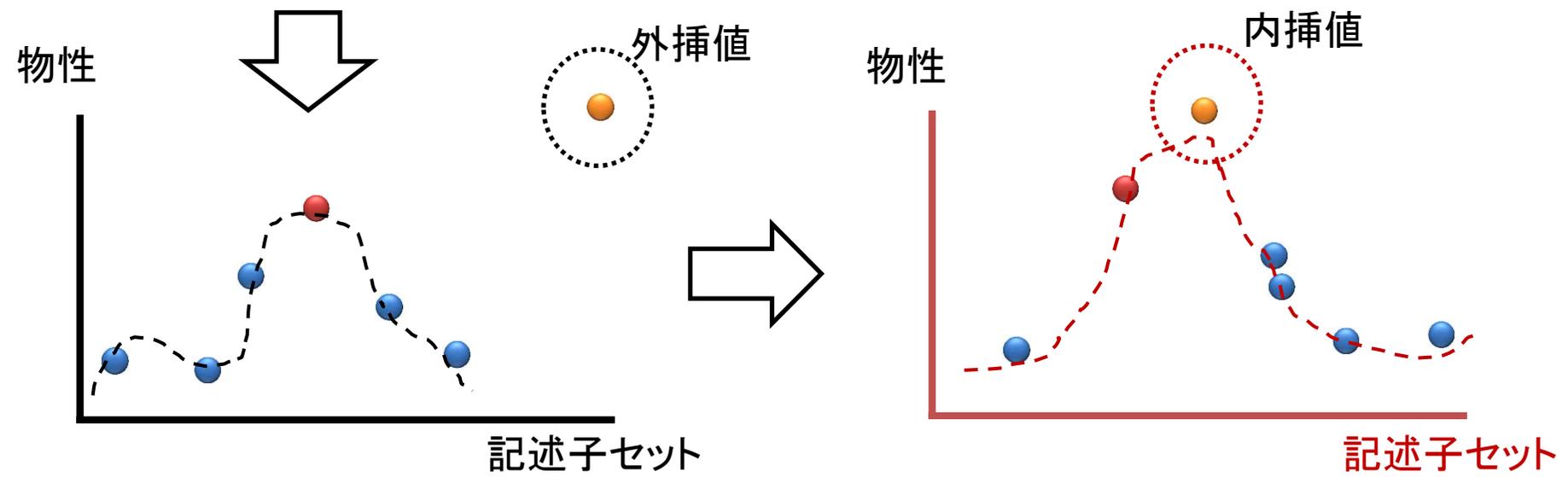
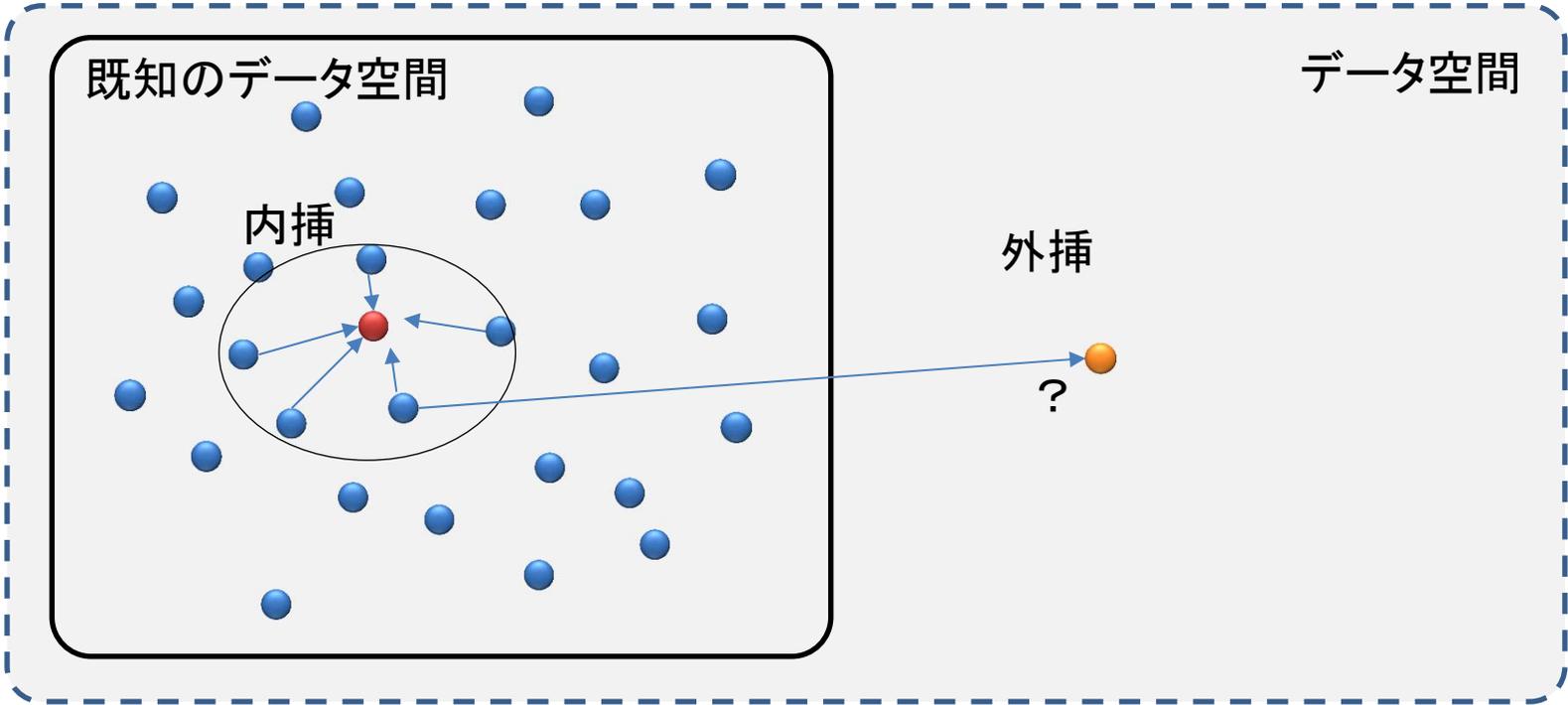
## Preference Learning



複数のデータセットの活用



# 内挿・外挿問題





# 持続可能なハブ拠点

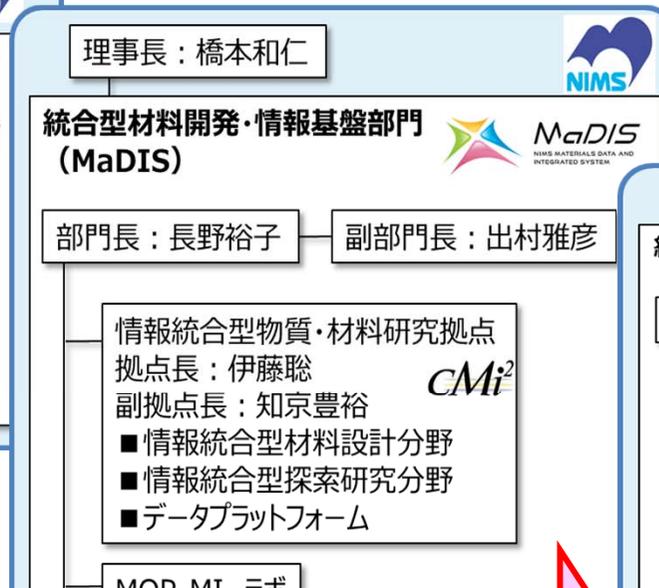
## 2015年度CMI<sup>2</sup>設置

・MI<sup>2</sup>推進組織としてNIMSにCMI<sup>2</sup>を設置



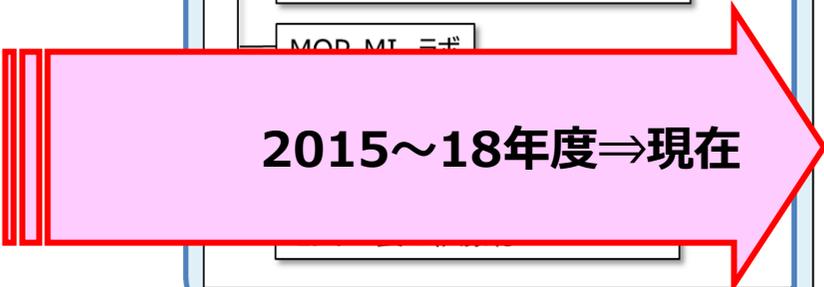
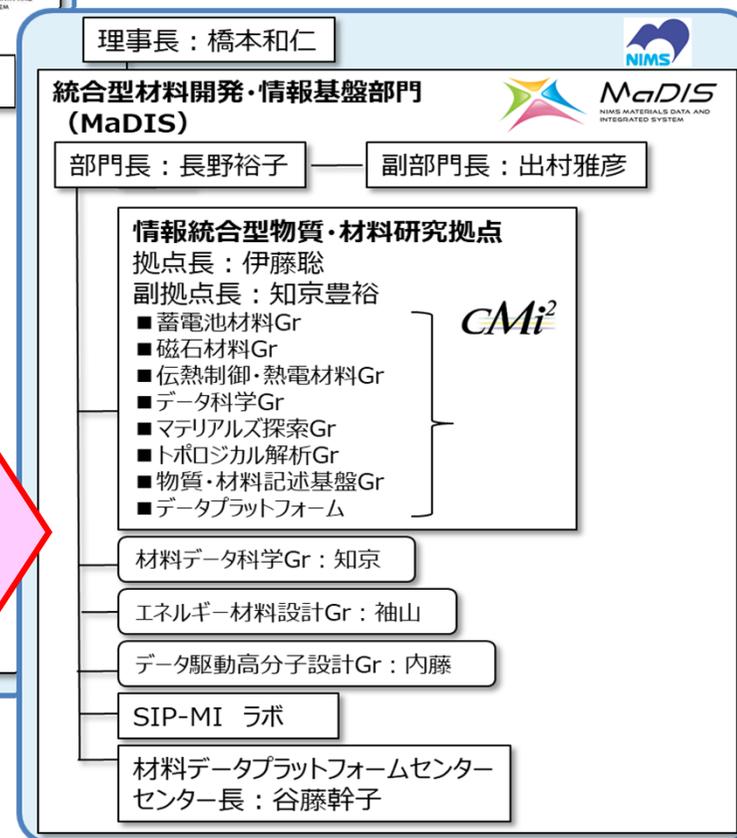
## 2017年度MaDIS設置

・NIMSのMI分野のナショナルセンターとしての貢献を明確化



## 2018年度MaDIS組織改正

・MI<sup>2</sup>事業推進のための体制としての位置付けを明確化  
・MI<sup>2</sup>事業終了後の研究展開を見据え新Gr設置



組織整備により持続的に研究活動を実施

# 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI<sup>2</sup>i: "Materials research by Information Integration" Initiative

## データプラットフォーム(DPF)機能

体験型施設としてのMI<sup>2</sup>i-DPF

- MI<sup>2</sup>iコンソーシアム会員向け

ナショナルセンターとしてのNIMS  
材料データプラットフォームへ

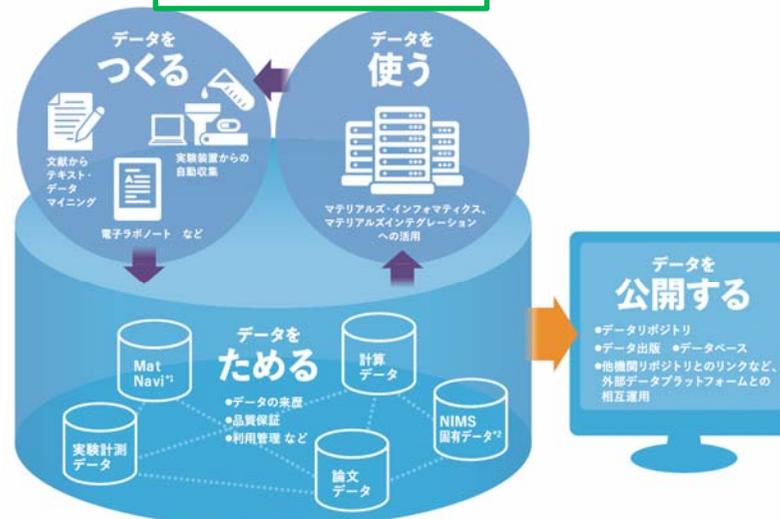
MI<sup>2</sup>i-DPF



データ/ツール  
/運用ノウハウ

NIMS新DPF

NIMS-  
MRB事業



<sup>1)</sup> NIMSが保有する 物質・材料データベース 研究者プロフィールデータなど  
<sup>2)</sup> 事故調査記録データ、

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI<sup>2</sup>i: "Materials research by Information Integration" Initiative

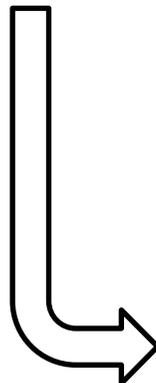
コミュニティ機能

MI<sup>2</sup>iコンソーシアム

- 企業人を中心に研究者・技術者間のネットワークを作る(孤から集へ)
- 共に学び、共に教える(相互扶助)
- MI<sup>2</sup>i-DPFを体験する(創造的に“遊ぶ”)

MI<sup>2</sup>iスクール

- チュートリアル(座学)
- ハンズオンセミナー(実習)



NIMSとの連携による研究開発の加速化・高度化

- データ駆動材料開発パートナーシップ

持続的なコミュニティ構築・分野振興

- 各種学協会マテリアルズインフォマティクス分科会(応用物理学会新領域グループ「インフォマティクス応用」、人工知能学会「計測インフォマティクス研究会」、…)



産学共同体  
への展開

普及促進活動



# 今後

いまのところ夢ですが・・・  
～国分寺構想と新市場創出

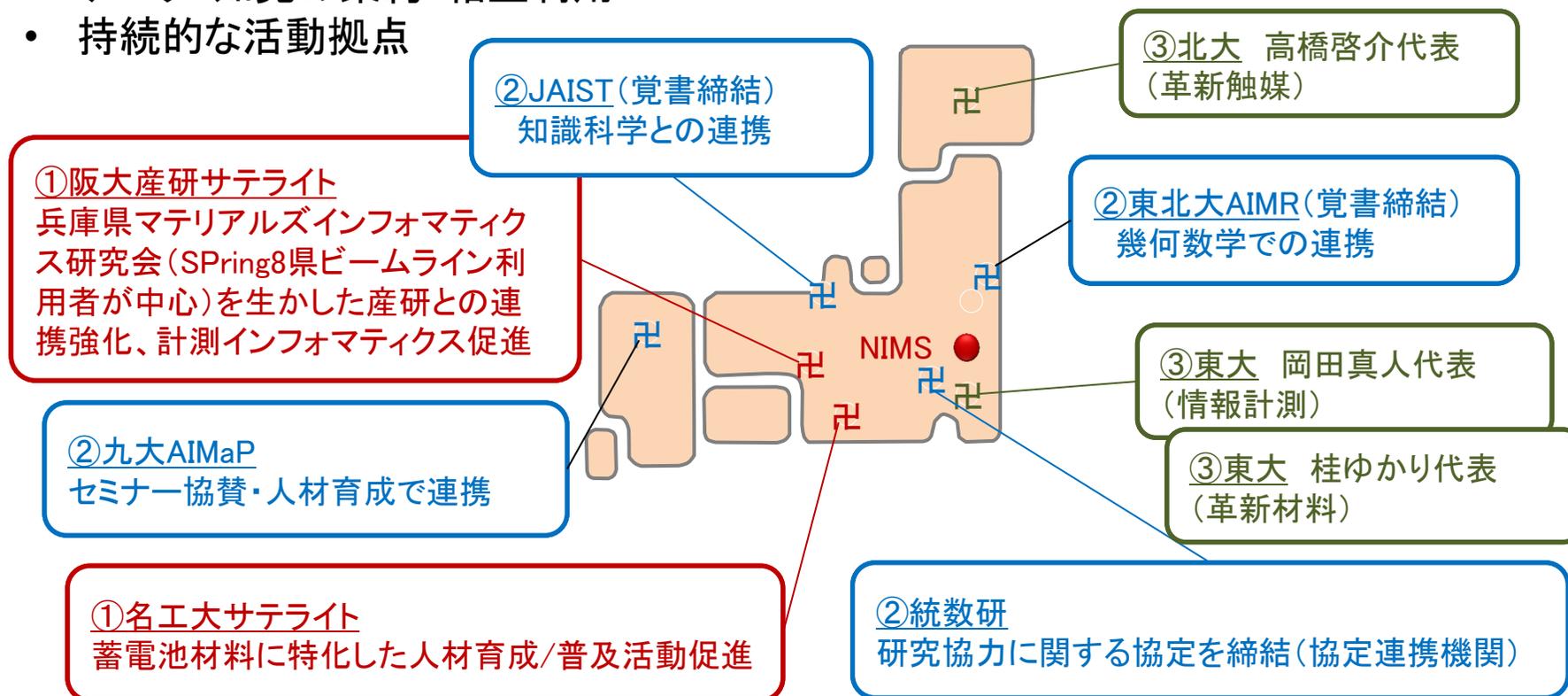
# ハブ拠点機能の全国展開：国分寺方式

- ① サテライト拠点の重点化 拠点の独自性を生かした活動の強化
- ② 数理学研究拠点との連携
- ③ プロジェクト参画者による競争的資金獲得活動推進 (CRESTなど)



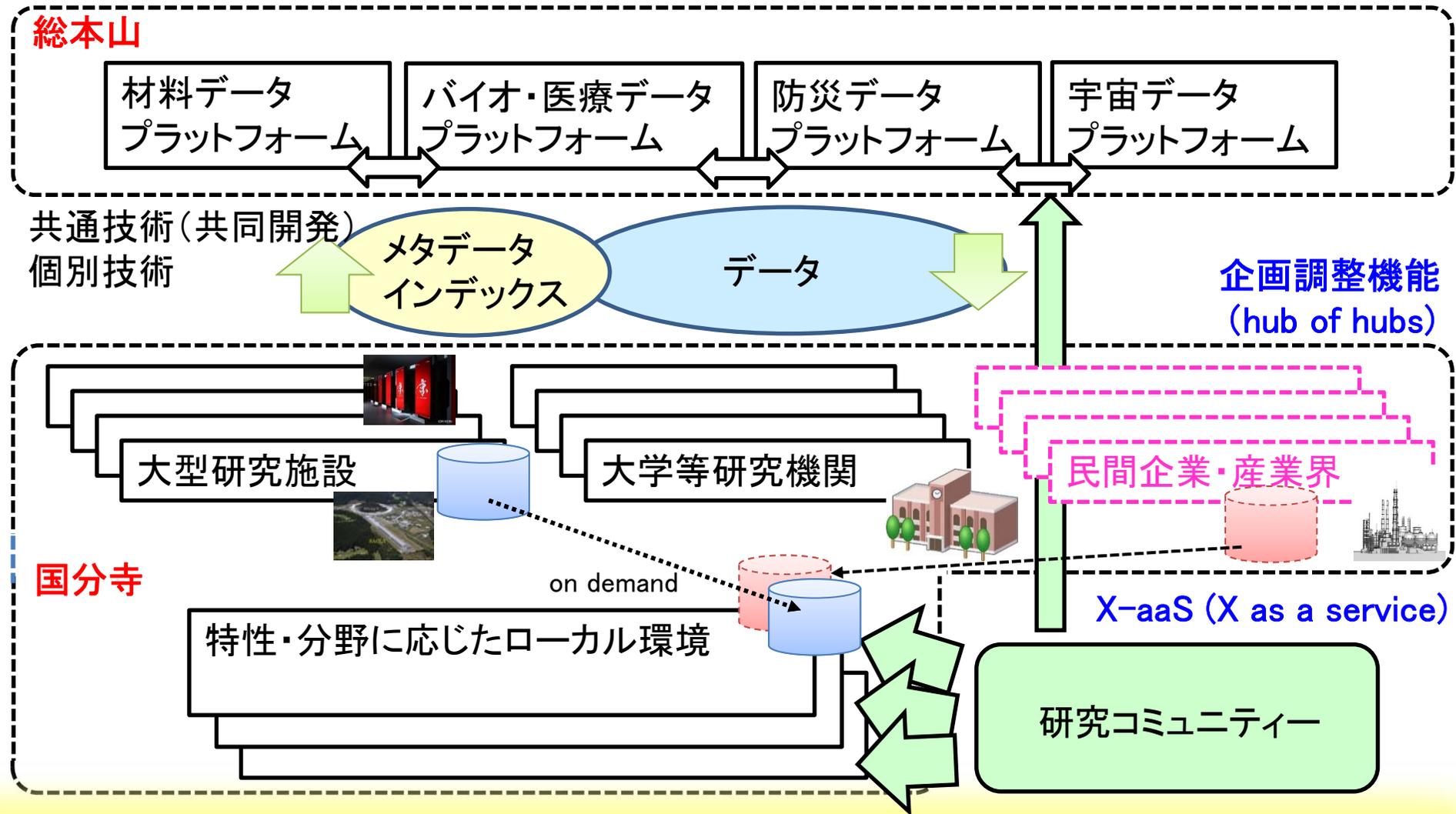
国分寺では、**それぞれの特性を生かして**

- 産官学共同研究の推進と分野振興
- データ・知見の集約・相互利用
- 持続的な活動拠点



# 持続可能な科学技術データ連携・流通エコシステム

国家的リポジトリセンター  
(データ連携基盤)



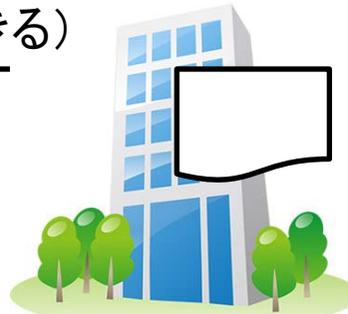
産官学連携共同活動の推進

マテリアルズインフォマティクス学理の構築

# データ連携・流通と新市場

## FAIRによるデータ管理

- Findable(見つけられる)
- Accessible(アクセスできる)
- Interoperable(相互運用できる)
- Reusable(再利用できる)



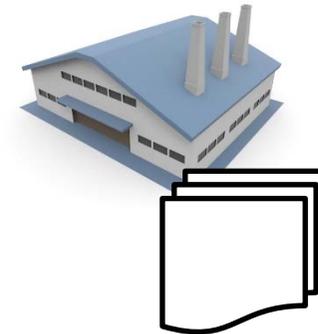
## データ流通のセキュリティ確保

- 情報銀行による担保
- 分散台帳方式(ブロックチェーンなど)による担保
- 秘匿計算技術

## データ流通のプラットフォーム(XaaS)

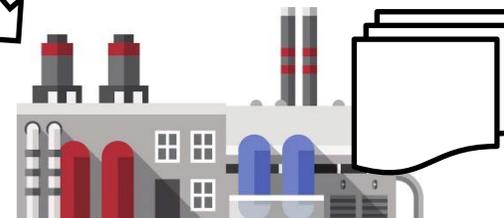
- メタデータ管理・標準化
- データ交換ミドルウェア
- インセンティブ設計

データ収集の自動化  
(ロボティクス技術)



なにを流通させるか?  
⇒ メタデータの超流通

データ収集の  
プラットフォーム  
(XaaS)



マルチモーダルセンサ  
によるプロセス制御

終わりに

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI<sup>2</sup>I: "Materials research by Information Integration" Initiative

運営室

PL: 伊藤 聡 (NIMS)      PM: 木原 尚子 (JST)  
 副PL: 岡田 真人 (東大)、知京 豊裕 (NIMS)、真鍋 明 (NIMS)

円滑なプロジェクト  
 運営に事務部門の  
 方々が大きく貢献

磁性材料G  
 GL: 三宅 隆  
 (AIST)

蓄電池材料G  
 GL: 中山 将伸  
 (名工大)

伝熱制御材料G  
 GL: 徐 一斌  
 (NIMS)

データ科学G  
 GL: 津田 宏治  
 (東大)

トポロジカル解析G  
 GL: 赤木 和人  
 (東北大)

物質・材料記述基盤G  
 GL: 吉田 亮  
 (統数研)

マテリアルズ探索G  
 GL: 小口 多美夫  
 (阪大)

横断的グループ

データプラットフォームG  
 GL: 徐 一斌  
 (NIMS)

基盤グループ

プロジェクトにご支援いただき  
ありがとうございました