

同時発表：  
筑波研究学園都市記者会（資料配布）  
文部科学記者会（資料配布）  
科学記者会（資料配布）



## データ科学的観点から推進する新たな物質・材料研究ハブの開設： 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

配布日時：平成27年6月30日14時  
国立研究開発法人 物質・材料研究機構

### 概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構（理事長：潮田資勝）は、データ科学的手法<sup>1</sup>を物質・材料研究に取り込むことで、新規材料の開発を加速し産業イノベーションの創出につなげる戦略を打ち出しました。本試みはJSTイノベーションハブ構築支援事業<sup>2</sup>として採択され、新しい物質・材料研究を進めるオープンイノベーションのハブ拠点「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」を7月1日に物質・材料研究機構に構築します。

2. 物質・材料研究を第4の科学<sup>3</sup>である情報統合型へと変革させる潮流が起きています。この変革を早期に新材料設計に実装できた企業が特許獲得や国際競争で圧倒的優位に立つことが出来ます。そのためには、物質・材料分野における膨大なデータ群の蓄積、最先端のデータ科学・情報科学の取込み等、大胆な新手法構築やデータベース等の基盤整備が必要であり、産学官の力を結集し集中的に取り組むことが求められています。

3. そこで、これらの取り組みを推進するため、物質・材料研究の中核的機関である物質・材料研究機構に、新しい物質・材料研究を進めるオープンイノベーションのハブ（情報統合型物質・材料開発イニシアティブ）を構築します。本ハブでは、結晶・フォノン構造、電子構造、マイクロ組織、界面、材料特性等の使いやすいデータベースの構築を進めるとともに、データ検索・可視化、機械学習、統計解析、シミュレーション等のデータ科学的なツールの開発を行います。これらのツールを新物質探索・設計パッケージとして機能させ、最先端の情報科学・データ科学を駆使した材料開発への実装を図ります。こうして、産業界における物質・材料に関する課題・ニーズに対する有効なソリューションを短期間で開発・提供することを目指します。具体的課題として、社会的に波及効果の高い蓄電池材料・磁性材料・伝熱制御材料等を取り上げます。ハブにおける連携機関は、企業17社、14大学、7研究機関、そして5つの海外研究機関と多岐に渡り、クロスアポイントメント制度<sup>4</sup>等を活用して人材を糾合します。

4. 将来的には、広範囲の物質・材料系へ展開し、人工知能の基礎技術等を取り込みながら、情報統合型の物質・材料開発システムを物質・材料研究機構内に構築することを見据えています。また、新しい物質・材料研究手法の開発・蓄積・普及とそれに関わる人材育成を組織的に展開し、ハブの持続的発展に向けて取り組みます。

## 研究の背景

望みの性質や機能を持つ物質・材料の探索は、青色 LED の成功例のように、社会への強いインパクトを持つ基盤研究の根幹的課題です。この「探索」は、従来は優れた研究者の経験に基づく「勘とひらめき」に頼るところが大きかったのですが、物質・材料が多様化し複雑化するにつれて、系統的に「設計」する方法の開発が重要な課題となってきています。約30年前に、「計算科学」が実験、理論と並ぶ第3の科学として産声を挙げ、その後急速に成長してきました。現在、それらの3本の柱に加わるべき新たに第4の科学として「データ科学」の重要性が認識されつつあります。それを明確に示すのは、2011年に米国で計画が公表され、2012年から実施された“Materials Genome Initiative”で、物質・材料のデータから材料開発の短期化・低コスト化を実現する手段の構築を目指した斬新な試みです

### 「情報統合型物質・材料開発」の内容

実験、理論、計算で得られた物質・材料に関する知識とデータを駆使することで、物質・材料の研究を進める新たな試みです。注目する物性や機能のアウトプットを  $y$  として、それを決定する様々な物質・材料データを  $x_1, x_2, x_3$  等とした時、これらの関係は  $y=f(x_1, x_2, x_3, \dots)$  と書けます。この両者の関係を記述する関数  $f$  をデータの統計学習で見つけることで、目的の機能・物性を持つ物質・材料の探索を推進し、新規材料開発の加速と産業イノベーションの創出につなげることが、「情報統合型物質・材料開発」の狙いです。統計学習では、ビッグデータ解析やマシンラーニングをはじめとした人工知能研究の基礎的技術を駆使します。このような「情報統合型物質・材料開発」は、物質・材料科学分野におけるデータ科学との融合による新物質・材料探索や最適化を目指す新たな研究領域と位置付けられます。しばしばマテリアルズ・インフォマティクスとも呼ばれていますが、マテリアルズ・インフォマティクスは、物質・材料のデータから計算機を用いて研究・開発に必要なデータを取り出す手法、というより狭い意味で使われることも多くあります。

## 用語解説

### (1) データ科学的手法

ゲノムデータ、地球観測データ、人の活動データ等、大量で多種多様なデータを、マシンラーニングやビッグデータ解析をはじめとした人工知能研究の基礎的技術を駆使することで、新たな知の創造や新たな普遍的な方法論の開発、さらに科学技術イノベーションの創出や社会的・科学的課題の解決を目指す新たな学問分野がデータ科学であり、そこで用いられている情報学や統計学の手法を指します。

### (2) JST イノベーションハブ構築支援事業

国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)による支援事業で、国立研究開発法人がグローバルな競争環境の中で優位性を発揮できるよう、また、我が国の研究力・人材力強化の中核的な拠点として必要な役割を果たせるよう、国立研究開発法人の機能強化を支援することを目的としています。そのために、各国立研究開発法人の使命・役割に応じた国際的な拠点化や国内外の関係機関との連携、すなわち「イノベーションハブ」の構築を推進する事業です。国立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）に向けて支援する JST の資金をマッチングさせ、国立研究開発法人がオープンイノベーションを促進する人材糾合の場として持続的に発展することが期待されています。

### (3) 第4の科学

「実験科学」が第1の科学、「理論科学」が第2の科学、そして「計算科学」が第3の科学と位置付けられています。近年の情報量の急激な増大に伴い、これらに続く新しい科学が「データ科学」であり、第4の科学と言われています。データ科学では、情報の効率的処理とそれを有効に活用することにより有用な知識を引き出すことを目標としています。また、狭義にはコンピュータやネットワークを利用した帰納的手法をデータ科学と呼ぶこともあります。

#### (4) クロスアポイントメント制度

研究者等が大学、公的研究機関、企業の中で、二つ以上の機関に雇用されつつ一定のエフォート管理の下で、それぞれの機関における役割に応じて研究・開発及び教育に従事することを可能にする制度です。本制度によって、研究者等の人材が組織の壁を越えて活躍することが可能になり、大学や公的研究機関等の技術シーズが円滑に民間企業に「橋渡し」されイノベーションの創出につながることを期待されています。

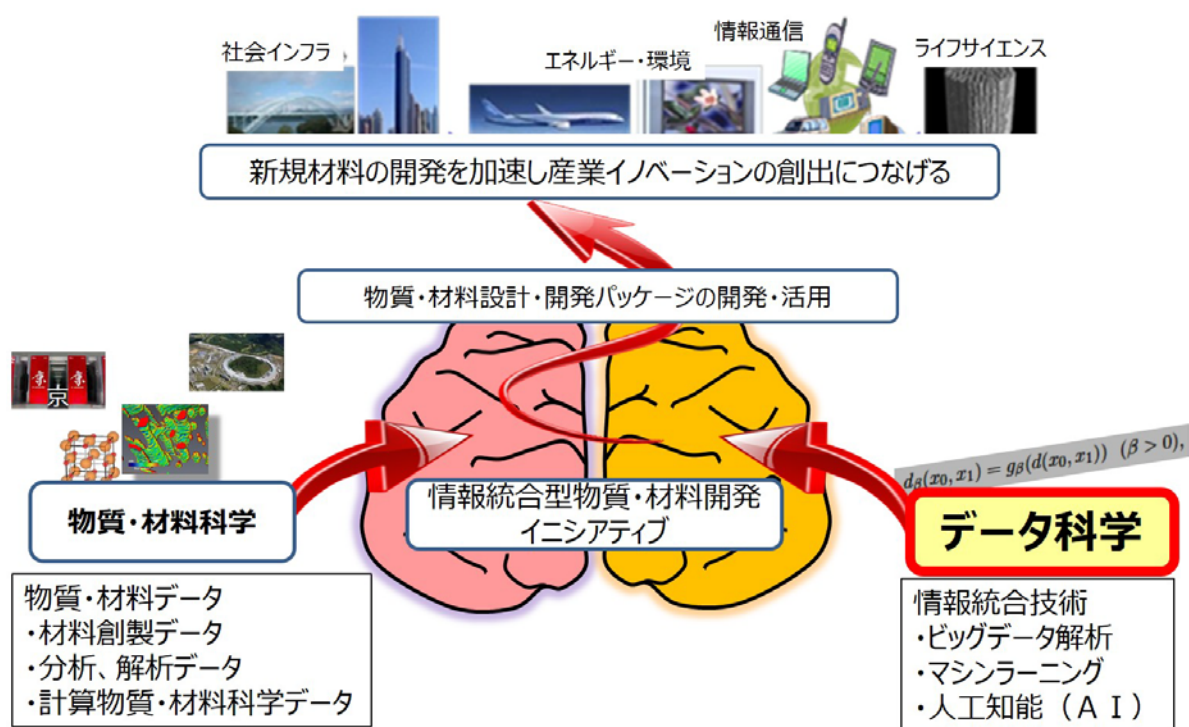


図1 「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」の概念図。従来は、実験的手法や計算科学的手法、更に物質科学理論を駆使して対象とする物質・材料の研究を行ってきました。一方、物質・材料研究とは独立に、ビッグデータ解析やマシンラーニングをはじめとした人工知能研究の基礎的技術も発展し、データ科学という新しい潮流が生まれています。このデータ科学的手法を物質・材料研究に取り込むことで、新規材料の開発を加速し産業イノベーションの創出につなげる戦略が、「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」です。中央の脳は人工知能的な側面を物質・材料研究に取り込むことを象徴しています。この新しい試みを成功させるために、膨大なデータから物質・材料の設計・開発に必要な情報を効果的に引き出すパッケージを開発し、その活用を通じてよりユーザーフレンドリーなパッケージに進化させます。これらを社会実装することで新規材料の開発を加速させ産業イノベーションの創出につなげます。「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」の本戦略が将来的に、社会インフラ、エネルギー・環境、情報通信、ライフサイエンス等の様々な分野での社会的課題の解決モデルになることが期待されています。

#### 本件に関するお問い合わせ先

(ハブ構築事業の内容に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 企画部門 企画調整室  
室長 河西純一 (かさい じゅんいち)

TEL: 029-859-2748

E-mail: KASAI.Junichi@nims.go.jp

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 企画部門 広報室  
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp