

統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)

## 情報を制し 想像を超える

データの量と質が勝敗を分かつ



# 情報を制し 想像を超える

データの量と質が勝敗を分かつ

試行錯誤が続けられてきた材料開発。

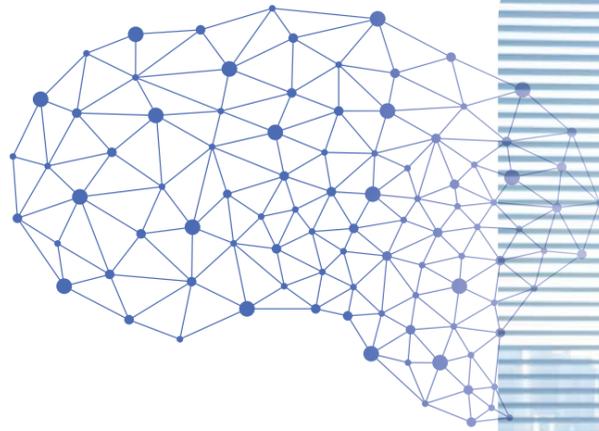
これに「データ科学」を融合した新たな潮流が、世界を席卷しつつある。人工知能 (AI) を使い、膨大なデータから望む性能を持つ材料の構造やつくり方を予測し、新材料開発のスピードを加速する「マテリアルズ・インフォマティクス (MI\*)」だ。

日本でも NIMS を中心として、すでにいくつもの新材料や知見が見いだされてきた。もはや MI の有用性は疑いようがないものとなった一方で、発展に向け成功のカギも見えてきた。それは、質の高いデータを数多くそろえることだ。AI は大量の材料データを取りこんで学習を繰り返すほど、精度が高まっていく。

では、高品質なデータを効率的に集めるにはどうするべきか。膨大な数の過去の論文や、日々の実験で装置が書きだす無数のデータを MI で使えるように整える作業には大きな手間がかかる。こうした課題に対し、NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) は組織を挙げて動きだした。

最新の AI 技術などを駆使し、効率よくデータをつくり、ため、使い、公開する循環システムの構築を目指す MaDIS。目的とする材料へ最短で到達できる未来、そして人間の想像をはるかに超える未来へ——。MaDIS の挑戦に迫る。

\*MI…「SIP 革新的構造材料」(p12 参照) においては、マテリアルズインテグレーションの略。



特別  
対談

# 既知から 未知を生む データの威力



山岸 秀之

Hideyuki Yamagishi

旭化成株式会社  
上席執行役員/研究・開発本部長



長野 裕子

Yuko Nagano

物質・材料研究機構(NIMS)  
理事/統合型材料開発・情報基盤部門  
(MaDIS)部門長

試行錯誤が続けられてきた材料の研究開発にデータ科学を活用する新たな潮流。すでに次々と成果が上がり、課題も見えてきた今、発展にむけて為すべきこととは——。専門部署を立ち上げるなど、企業としていち早くデータ科学の導入に取り組んできた旭化成の山岸秀之上席執行役員と、NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門(MaDIS)においてデータ活用を強力に推進してきた長野裕子部門長が語り合う。

## 先入観や常識を打開する データ科学のインパクト

**長野** 今、物質・材料の研究開発に、データ科学が積極的に活用されています。NIMSでは、2014年から「SIP 革新的構造材料」の中で、材料の実用化に着目したマテリアルズインテグレーションの開発に、2015年からは「MI<sup>2</sup>I」という機能性材料をターゲットにしたマテリアルズ・インフォマティクスのハブ拠点構築事業に取り組

んできました(p12参照)。マテリアルズインテグレーション、マテリアルズ・インフォマティクス、どちらも“MI”と略せますが、これら2つのMIを両輪に、データ科学を活用した統合型材料開発の推進役を担ってきたと自負しています。特に2017年ごろから目覚ましい研究成果が続々と出始め、データ科学の有用性を実証してきています。たとえば、機械学習によってこれまでまったく想定していなかったアモルファスシリコンとビスマスの微結晶から成る断熱材料を

開発できたことは、その代表例といえます(p13コラム参照)。旭化成でもいち早くデータ科学を採用し、さまざまな成果を上げていくと伺っています。

**山岸** はい。もともと旭化成は早い時期から、計算によるコンピュータ・シミュレーションといった新手法の導入に積極的に取り組んできました。データ科学の導入に着手したのは2016年ごろからで、比較的早く成果が出始めました。たとえば、樹脂コンパウンドという材料があるのですが、

製造するには複数の原料を配合します。高分子化学に関する深い知識と、製造プロセスにおける熟練した技術者の経験と勘がなければ求める特性は出せませんでした。ところがデータ科学の手法で解析した結果、樹脂の配合を的確に予測し、何度か繰り返していた実験をほぼ1回で済ませることに成功したのは驚きました。

触媒材料の開発においても顕著な成果が出ています。触媒は4、5種類の元素から成るため組成が非常に複雑で、数年にわたり試行錯誤を繰り返しながら開発を進めてきました。ところが機械学習モデルの提案する条件に従い実験した結果、従来の性能を上回る触媒を短期間で開発することに成功しました。しかも機械学習モデルで得られた触媒の組成は技術者が考

えもしなかったものでした。“人間の先入観や常識を打開する”という、データ科学の醍醐味を感じましたね。

**長野** データ科学の有用性を示す好例ですね。短期間で高性能な材料を開発できることは、経済合理性を求められる企業にとってメリットが大きいのではないのでしょうか。

**山岸** 開発費が大幅に削減できますし、これまでは事業化までの期間が長いという理由で見送られてきた材料の開発にも挑戦できるようになります。さらに、企業の生命線である物質・材料に関するデータ、技術者の知識や経験を、データベースや学習モデルとして資産化し、将来の材料開発に生かすことができるというのは非常に大きなメリットです。少子高齢化

社会を迎え人材確保が厳しくなる中、知見をいかに無駄なく次の世代へ受け継いでいくかという課題は企業にとって死活問題で、それを可能にするのがMIだと捉えています。

**長野** おっしゃるとおりです。将来、人工知能で膨大な量のデータを解析できるようになれば、過去の経験という資産を基に新たな研究の突破口を次々と開けるようになるかもしれません。そのためには、MIの持続的な発展を戦略的に進めることが不可欠です。そうした思いから、NIMSは2017年4月、これまでMIや材料データに携わってきた研究者・技術者を一堂に集め、「MaDIS」という部門を立ち上げました。MIの基盤であるデータベースの構築と、それを使う研究者が密に連携する体



“人間の先入観や常識を打開する”という、MIの醍醐味を感じた——  
山岸秀之

の企業でデータベース化するのは非効率的です。NIMSは長年、多岐にわたる分野の材料データを蓄積し、広く活用していただいておりますが、それでもまだビッグデータと呼ぶには十分ではありません。これをさらに拡張しつつ、同時に、質を向上させていかなければ、研究規模が日本とは比べものにならないほど巨大なアメリカや中国には太刀打ちできません。だからこそMaDISは、公知のデータや質の高い実験データを一挙に集約した世界最大規模の「材料データプラットフォーム」構築を目指します。一見華やかに見えるMIですが、成功に導くには多くのデータを集め、データ科学にとって使いやすい形に整えるという地道な作業が欠かせません。現在、装置が書きだす実験データを共通フォーマット化したり、用語を統一したりと戦略的に進めているところです(p8参照)。

**山岸** 通常、実験による計測データはフォーマットや項目名がバラバラでデータ科学では扱いづらいので、これらを整理していただけるのは助かります。今後、化学関連の各種計測器のデータのフォーマットが標準化されるようになれば、データが自動で蓄積され、効率化できるでしょう。加えて、計測データのように個々のデータの情報量が多い場合、現状では代表値だけが記録されることがほとんどです。しかし、それではありのままを反映しているとは言えません。情報を削ぐことなく記録したデータベースができれば、経験の価値を最大限引き出せるだろうと非常に期待しています。

制を整えたいと考えたのです。

**山岸** 旭化成でも、同じ2017年4月に「MI推進部」を立ちあげました。会社を挙げてMIに取り組むという意志を、社内外に対して強く表明する必要があると思ったからです。現在、MI推進部では、数多くのテーマについてプロジェクトを推進中で、若手社員も非常に積極的です。

### 激化する国際競争に日本はどう太刀打ちするか

**山岸** MIに取り組む中で、課題も見えてきました。予測精度を高めていくにはデータベースの充実が不可欠だ、ということです。たとえば、機械学習の過程ではさまざまなパラメータの入力が必要ですが、十

分なデータがなく、有用な結果が得られないというケースもあります。一方で、データベースの構築にはそれなりの時間と労力が求められ、これにあまりに力を割いては肝心の材料開発が進まず、本末転倒ということになりかねません。今、アメリカや中国でもMIを推進していますが、国を挙げた取り組みという意味で日本より先行しており、製品開発にスピードが求められる中で、企業には無駄な時間と労力を費やす暇などないのです。その点で、NIMSが提供している物質・材料データベース「MatNavi」は、「高分子材料」や「無機材料」など多様なデータベースがあり、大変貴重です。

**長野** ありがとうございます。研究論文や特許情報といった公知のデータを個々

**長野** 今後、高品質かつ信頼性が高いデータの収集や活用こそが日本の優位性を支える要となるでしょう。日本の物質・材料開発をデータで支える次世代型のプラットフォームを目指していきます。

### MIを根づかせるために

**長野** 各国がMIを使った材料開発で追いあげを図る中、日本の素材産業が国際競争力を維持していくことは大変なことです。そこで、2017年6月に、旭化成、住友化学、三井化学、三菱ケミカルの化学企業4社とNIMSで立ちあげた「マテリアルズ・オープン・プラットフォーム(MOP)」では、化学産業に共通する課題として、MIそのものを取りあげて、オールジャパン体制で協働していこう、となりました。実際に活動が本格化した今、MOPにご参加いただいている立場としてどのように感じていますか。

**山岸** 公的機関であるNIMSが中立の立場で連携の中核を担うというのは、画期的な取り組みです。私はかつて内閣府で科学技術政策に携わった経験から、日本の化学企業同士、協働すべきところは協働すべきだと、強い想いを抱いてきました。とはいえ、企業同士の連携では“どこまで各社のデータを公開していくか”という線引きが非常に困難です。そこで、まずは第一歩としてNIMSが中心となり、MI向けの公知データベース構築に各社が連携していくことで、MOPは非常に円滑に

進んでいると感じます。引き続きNIMSにお願いしたいのは、全体を俯瞰して正しい方向に導いてほしいということです。それぞれが主導権を握ろうとすると、結局バラバラな方向に進んでしまいますからね。

**長野** その役割をしっかりと果たしていきたいと考えています。一方で、全体を俯瞰するときにも、NIMSが独りよがりになってはいけません。企業の方々と緊密に連携し、社会のニーズに合致した研究開発を推進していかなければなりません。また、MIをめぐる技術の潮流を見極め、そのために必要な材料データをしっかり確保する、これを産官学連携で進めていけるとよいですね。

**山岸** MOPを成功例として世に示せば産官学連携はより盛んになるでしょうし、公知データの収集など、企業同士が協調して取り組める領域も必ずあると思います。日本のMIは良い方向へと循環していくに違いありません。ぜひ、化学産業全体にMIを普及していきたいと思っています。これからもよろしくお願いします。

**長野** 私たちがしっかりと結果を示していくことによって、MIを日本全体に根づかせていきたいですね。こちらこそよろしくお願いします。

(文・山田久美)



高品質かつ  
信頼性の高いデータこそが  
日本の優位性を支える要——  
長野裕子



【特集】

# 閃きを生む、物質・材料開発の“知能” 「材料データプラットフォーム」とは

統合型材料開発・情報基盤部門（MaDIS）に、「材料データプラットフォームセンター（DPFC）」が設けられた。材料データを一挙に集約し、使う場（プラットフォーム）の構築と運用を目指す。ここに集めるデータの品質と信頼性が、今後のマテリアルズ・インフォマティクス（MI\*）発展の命運を握るのだ。プラットフォームづくりの現状と将来像について、センター長の谷藤幹子と、構築の核を担う3人のグループリーダーが語る。

\*MI…「SIP 革新的構造材料」（p12参照）においては、マテリアルズインテグレーションの略。

## 情報を制する者は “材料研究”を制する

情報を制する者は戦いを制する——2500年ほど前に書かれた兵法書「孫子」にある有名な言葉だ。戦わずとも勝敗が決するほど情報は重要なものであると説いたその言葉は、まさしく今の材料研究にも当てはまる。近年、材料研究に情報科学を取り入れたMIが盛んになり、その成果報告が相次ぐ中、“材料研究における情報の重要性”を疑う者はもはやいないだろう。しかし世界的に見ても、まだ材料研究の現場で情報を十分に活用できる環境が整っているとはいえない。

2017年4月にスタートしたMaDISでは、機能性材料や構造材料、有機材料などさまざまな材料の研究開発を組織的に進めている。そこで生まれてくる大量の情報や、NIMSが長年蓄積してきたデータ群を集約し、今後、日本全体での材料研究開発に活かせるようにする

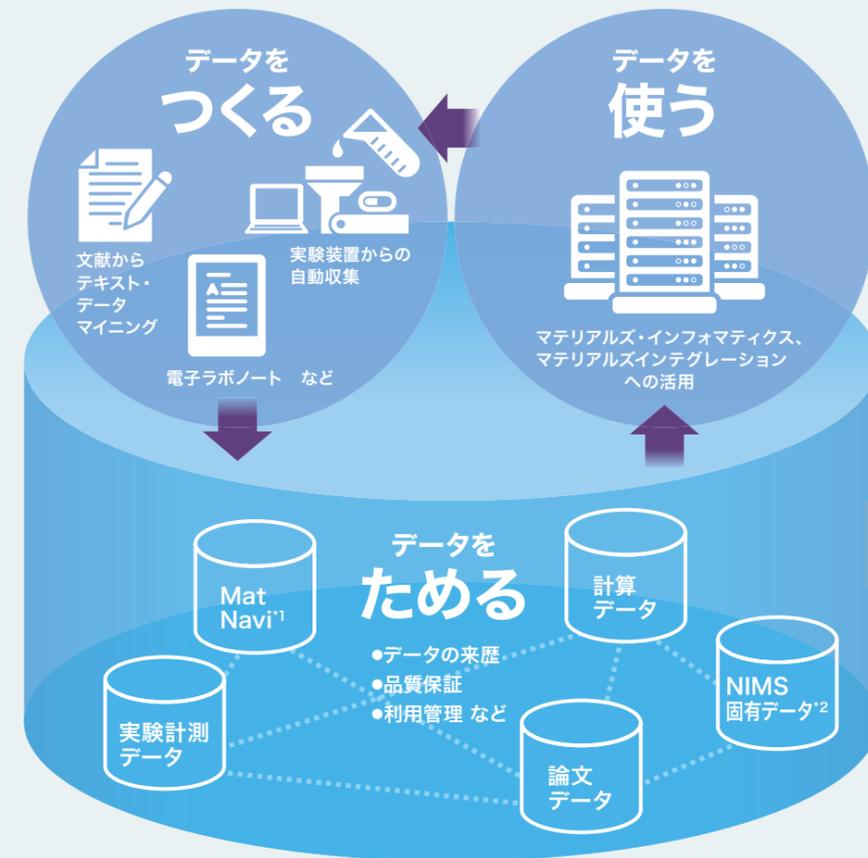
ことが「材料データプラットフォームセンター（DPFC）」のミッションである。センター長の谷藤はDPFC設立の意味について、「『NIMSが世界最高峰の材料研究に関わる中核機関として、責任をもって材料に関わる情報を集め、高品質で信頼できるデータをつくり出す』と世の中に宣言したのです」と話す。40年以上にわたり日本の材料研究を牽引してきたNIMSは、“組織的に研究データを集めて活用しよう”と動き出した。

## プラットフォーム成功の カギを握るデータの作り方

材料の研究開発を促進するためには、データ活用の全体像を見据えたプラットフォームの設計が重要だ。まず、集めたデータを誰もが活用できる形に整える“つくる”作業が欠かせない。そこでDPFCでは、専門家の目利きで担保するデータの“質”と、人工知能（AI）や

機械学習などで自動的に抽出・整形するデータの“量”の両方を兼ね備えた、“つくる”プロセスの開発に取り組んでいる。つくれたデータを、“ためる”仕組みも不可欠だ。「たとえば、NIMSが提供する材料データベース『MatNAVI』や、実験・計算によってリアルタイムでつくられるデータをひとつの場に集約し、データ同士を連携させる機能はプラットフォームの要です」と谷藤は言う。

こうしてためたデータをMIで“使う”ことによって新たなデータをつくり、それを再びためて、使うという循環が生まれる。これに、さらにデータを参照・引用するためのサービスを提供する“公開する”機能を加え、効率的に循環させるシステムがDPFCの目指すものであり、今後、MIを効率的かつ持続的に発展させていく上で極めて重要となる。この実現に、谷藤は2018年4月からセンター長として取り組んでいる。では、センターでは実際に何が進められているの



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

## 材料データプラットフォーム の構想図

最終目標は、データを“つくる”“ためる”“使う”“公開する”という4つの機能が相互に関係しながら循環するシステムの構築だ。

だろうか。

材料研究におけるデータといえば、ひとつには実験データがある。DPFCの副センター長で材料データ解析グループのリーダーを務める吉川英樹は「昨今、特に材料研究に活かそうといわれているのは、“ビッグデータ”と呼ばれる巨大なデータ群です。現状では、材料研究に関するビッグデータと呼べるものは存在していません。たとえば今後、毎日の実験で得られるデータをすべて集めることができれば、それはビッグデータになるでしょう」と話す。これまで論文等に掲載されて人目に触れてきたデータはほんの一部であり、そのほかのデータが使われることはなかった。しかし、これまで失敗として捨てられてきた大量のデータも、決められた形式できちんと集められビッグデータとなれば、MIにおいては宝の山となる。

ただし、こうしたデータを“ためる”前には、誰もが活用できる形に整える

“つくる”という工程が必要になる。とはいえ、大量かつ、研究分野も実験装置も多岐にわたるデータを、誰もが活用できる形にするのは容易ではない。吉川は、「隣の研究者のパソコンの中身を覗き見ることができたとしても、そこにあるデータの意味は分からないことがほとんどです。というのもデータを理解するには、その背景的情報（メタデータ）が必要だからです」とその理由を説明する。使えるデータにするには、研究者に自分のデータに“いつ誰がどのように取得したデータなのか”を明らかにするメタデータを付けてもらわなくてはならない。そもそも、データ提供に対する心理的なハードルもある。データ活用への理解を得て、ただでさえ忙しい研究者にメタデータを付けるという手間を負ってもらうために、吉川は、メタデータ付きでデータをプラットフォームに提供したら特別な解析ソフトが容易に使えるようになるなど、研究者がメリットを感じられるような仕組み

づくりを検討している。

さらに、データ提供者の負担をできる限り減らすため、装置メーカーに交渉して装置が書きだす実験データの構造や語彙の情報を提供してもらい、装置から自動でメタデータを抽出するソフトウェアの製作も行っている（p11上参照）。地道な交渉を重ね、現在、X線光電子分光やX線回折といった計測分野の主要メーカーから協力を得て、自動可読化ソフトウェアの一般公開を進めているところだ。

## AIを使って論文から 重要データを自動抽出

DPFCは、MaDISでの材料研究で新しく生まれたデータのほかに、論文のような公知情報から情報を抽出しデータを“つくる”役割も担っている。そのひとつが「テキスト・データマイニング」と呼ばれる手法で、材料データベースグルー

プが推進中だ。リーダーの石井真史は、「論文には、データをどう解析し解釈したのかといった重要な知識が書かれています。それを抽出したいのですが、論文の情報量は年々増大をつづけ、過去50年で100倍近くにも達するといわれています。このすべてを人間がチェックすることは到底できません。そこで注目したのが、最近急激に性能を上げているAIです。文字列(テキスト)を読ませて、パターンやルールを分析させるのです。ただしAIが最初から論文の重要なデータや内容を抽出できるわけではありません。まず、「何が重要なのか」を何度も繰り返して教える必要があります」と話す。そもそも、研究者が研究の新規性を主張するために書いた論文に用いる表現は千差万別であり、そこから重要な情報を読みとるのは容易ではない。「たとえば、磁石であれば「N極とS極があって、それは原子内のスピンに由来するものだ」といった「概念」をAIに理解させるところから始めなければなりません。子どもを育てるように、根気強く教えていくのです」。現在、石井は高分子材料を主なターゲットに100余種の特性データの自動抽出を進めている最中だ(p11中参照)。データを「つくる」体制は徐々に整いつつある。

### データを使いやすいシステムを

最後に、吉川や石井らがつくったデータを「ためる」ための器、リポジトリが必要となる。その仕様を決めているのが

データシステムグループだ。リーダーの門平卓也は、「今後は実験装置から収集した大量のデータを、AIで解析するようなことも出てくるでしょう。それを可能にするためにも、リポジトリにはデータが出し入れしやすいような仕組みづくりが求められます」と説明する。

たとえば、集めたデータに適切なメタデータや固有のIDを与えることによって、データ検索やダウンロードが円滑に行えるようにする。また、データの来歴の記録や利用者の管理、第三者の研究者による査読を補助する機能など、データの信頼性を高めるための仕組みづくりを検討中だ。こうした「ためる」際のひと手間が、データを「つかう」「公開する」際の利便性を大きく左右するのだ。

これらはすべて、将来にわたって使い続けられる基盤づくりを意識して進められている。谷藤が言う、「つくる」「ためる」「使う」「公開する」機能がうまく循環するプラットフォームの実現には、データシステムグループの仕事の果たす役割は大きい(p11下参照)。

### 基盤づくりという山を仲間と共に登る

「どれも世界的に初めての挑戦ばかりで、皆で前人未踏の山に登っているようなものです。こんなことができるのも、純粋に科学技術の発展に貢献しようという国研のいいところだと思っています。業務に当たるメンバーの誰が欠けても山には登れませんが、誰かが足を踏み外して

滑落しそうな場合にはすぐさまロープを投げて、共に解決策を話しあえるような関係を築いています。ここまで進んでこられたのは、センターのメンバー全員が「こうつくろう」という将来像を思い描いて、信念をもって進んできたからだと思っています」と谷藤。

吉川は、「このところ、産業界でも使わずに捨てられてきた社内のデータを活かすことに意欲的になってきたと感じます」と話し、材料研究でのデータの活用とプラットフォームづくりに世の中が理解を示し始めてくれていると、明るい兆しを感じているという。一方、石井は「将来、AIが論文を読みとけるようになれば、研究のアドバイスをしてくれるようになるかもしれません」とAIと共にある新しい材料研究に思いを馳せる。門平も「多くの研究者が使ってくれる、使いやすい基盤をつくりたい」と力をこめる。

最後に谷藤はこう話を締めくくった。「『こんな材料データプラットフォームがあるなら私のデータも任せたい』とデータが自然に集まってくるようになったら、山頂間近です。ためたデータをきちんと意味のあるものとして次世代に引き継いでいくことが私たちの使命ですし、実際にデータベースを使った研究者から『データベースがあったからこそ成果が得られた』という声が届くようになれば、成功したと言えるのではないでしょうか。そんな日が訪れるのもそれほど遠くはなさそうだ。(文・池田亜希子/サイテック・コミュニケーションズ)



統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) 材料データプラットフォームセンター (DPFC)

左から  
石井真史 Masashi Ishii  
材料データベースグループ グループリーダー

谷藤幹子 Mikiko Tanifuji  
センター長

吉川英樹 Hideki Yoshikawa  
副センター長/材料データ解析グループ グループリーダー

門平卓也 Takuya Kadohira  
データシステムグループ グループリーダー

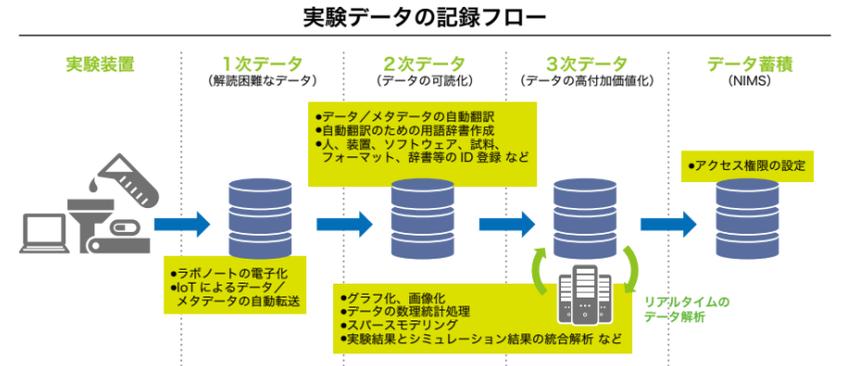
## 材料データプラットフォームを構築する3つのグループ

### 材料データ解析グループ/グループリーダー 吉川英樹

グループのミッションは、「研究者の持っている膨大なデータを集めて、その付加価値を高めること」。これを遂行するため、実験装置などから得られたデータを、実験装置専用のコンピュータ以外、たとえば機械学習を含む先端的なデータ解析機能を持ったコンピュータが理解できるデータに可読化するまでの一連の流れを確立させようとしている(図)。特に、膨大なデータを集めるには高速かつリアルタイムにデータを集める方法が必要になってくる。そのため、実験装置がNIMS構内か構外か、新型か旧型かを問わず、IoTを使って直接データを情報セキュリティ上安全に収集できる

ようなシステムを構築するなど、データ収集に革新を起こしてきた。さらに研究者の実験ノートに書き留められた内容をデータ化する試みとして、研究者の負担

にならないように配慮された「電子ラボノート」を開発。より広く使ってもらえるよう、周知に努めている。

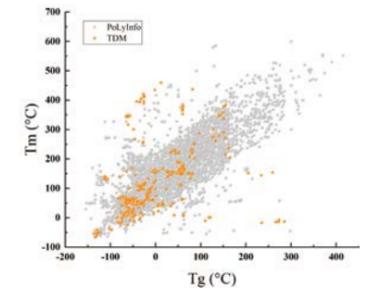


### 材料データベースグループ/グループリーダー 石井真史

これまでに蓄積された膨大な論文から重要な内容だけを「知識」として抽出して、データベース化するという試みを行っている。大量の論文から人手で抽出することは容易ではないため、人工知能(AI)を導入した。具体的には、テキストを網羅的に分析する「テキスト・データマイニング」という手法を用いる。特定の用語が登場する文脈や、関連語句との結びつきといった、論文に存在するルールやパターンをAIが学習して

いく。初期の段階では、AIが引き出したデータを人が確認し、誤っていれば再学習させるプロセスを繰り返すが、最終段階ではAIが独自に正しいデータを抽出できるようになる。実際に2018年には、理化学研究所と奈良先端科学技術大学院大学と共同で、高分子に関する約60,000本の論文を分析。約7,500点のガラス転移温度、約5,500点の融点を自動抽出することに成功した。「要した時間は学習を含め数日。人手によ

るデータベース化よりも飛躍的に高速化しました」と石井は語る。



高分子材料の論文からデータを自動抽出する過程のグラフ。

### データシステムグループ/グループリーダー 門平卓也

DPFC構想の実現に向け、基盤となるハードウェア上で、データリポジトリを中核として、多様な機能を持つ複数のソフトウェアを連携させるべく、システム設計と構築を進めている。データ保護機能、品質保証機能、管理機能など、システムの安全運用につながる環境整備も行っている。集めたデータ

を「公開する」にあたっては、数値データをグラフとして視覚化(ビジュアライズ)して提供したり、他機関が持つリポジトリと連携させたりするなど、付加価値を高めたデータの提供にも力を注いでいる。また、将来的にデータを幅広く活用してもらえるよう、たとえばデータ専門論文誌の創刊といった、シ

ステム運用と連携する新たな施策についても模索している。プラットフォームの利用者からのフィードバックを受けてシステムを改良していくことにより、ますます利用量が増えるような好循環を生み出すべく、DPFC構想の礎として、今後もさまざまな状況や要求に柔軟に対応していく。

(文・池田亜希子/サイテック・コミュニケーションズ)

# “材料科学×データ科学”の先駆的プロジェクト

## 「MI<sup>2</sup>I」と「SIP-MI」 が見た景色、その先へ

NIMS では現在、材料開発にデータ科学を取り入れた2つの国家プロジェクトを推進中だ。機能性材料を対象に物質探索に挑む「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I)」と、構造材料を対象に材料実用化の加速に挑戦する「SIP 革新的構造材料」の一課題、「マテリアルズインテグレーション」である (SIP-MI)。今回、MI<sup>2</sup>I を担当する伊藤聡と SIP-MI を担当する出村雅彦に、これまでの取り組みと今後への期待を聞いた。

### 材料開発に革命を起こしてきた 2つのプロジェクト

激化する材料開発競争にあって、開発期間を短縮するための一手として世界的に注目されているのが、材料開発にデータ科学を導入する手法である。世界各国がこの手法の確立を目指してしのぎを削

る中、日本では NIMS がいち早く「SIP-MI」と「MI<sup>2</sup>I」という2つの取り組みを進めてきた。

2014年に開始した SIP-MI では、社会基盤を支え環境・エネルギー問題解決のカギを握る構造材料を対象に「マテリアルズインテグレーション」に取り組んできた。一方、2015年に発足した MI<sup>2</sup>I では、今や人々の生活に欠かせない蓄電池材料や磁性材料、伝熱制御・熱電材料といった、いわゆる機能性材料を対象に「マテリアルズ・インフォマティクス」に取り組んできた。いずれも“MI”と略されるこれらの取り組みは、データ科学を導入した新しい研究開発手法を開拓していく点では同じだが、“材料の実用化”と“物質の探索”と、資するステージが異なる。5年にわたるプロジェクトが終盤に近づく今、数々の成果が生まれている。

### “逆問題”を解き 物質を探索する MI<sup>2</sup>I

まずは物質の探索手法の開拓に挑戦してきた MI<sup>2</sup>I の取り組みを見ていこう。これまで

物質の探索は、専門家の経験と勘のもと、複数の元素を試行錯誤で組み合わせ、新機能を得る方法が主流だった。これを“逆問題を解く”と呼ぶ。しかし、使う元素や組み合わせを網羅的に試すのはコストも時間もかかり困難だ。それに対し、欲しい機能を先に設定し、それに合致するような元素や組み合わせを探索することを“逆問題を解く”と呼ぶ。この“逆問題”をデータ科学の力を借りて解くことで物質探索のスピードを劇的に速めるとともに、これまで知られていなかった物質・材料に関する学理を発見しようというのが MI<sup>2</sup>I の取り組みだ。

伊藤はこう語る。「プロジェクト開始時、データ科学を物質探索に生かす方法は確立されておらず、MI<sup>2</sup>I では、まずその方法論を構築するところから始める必要がありました。しかし、NIMS にはデータ科学の専門家はいませんでした。そこで、一足先に盛り上がりを見せっていたバイオ・インフォマティクス (生命情報科学) 分野からデータ科学の専門家にも参画してもらい、物質・材料にどのように適用していくべきかを丹念に探っていました」

ここで強く意識したことは、「理屈はよく分からないけれども、試行錯誤を繰り返したら求める機能が得られたという“風が吹けば桶屋が儲かる”的な探

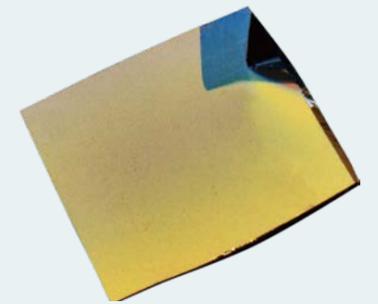
## COLUMN MI<sup>2</sup>I から生まれた世界最高性能の断熱薄膜材料

熱を外に伝えにくい性質を持つ断熱材料。たとえば、車のエンジンで燃料を高温燃焼させた際の放熱を防ぐなど、効率的なエネルギー運用に貢献している。断熱性能が上がれば一層の効率化が期待できるが、候補物質は数千種類にもものばり網羅的な探索は難しい。そのような中、MI<sup>2</sup>I の徐一斌らのグループは、データ科学と人工知能 (AI) を活用することで、世界で最も熱を通じづらい薄膜の作製に成功した。

徐らはまず、断熱材料に関する 80 本

の論文から複数のパラメータを抜きだし、AI に入力。どのパラメータが断熱性と関係あるのか機械学習によって探索させ、有力な元素の組み合わせを数百通りまで絞りこませた。そしてその中から、合成が比較的容易なシリコン (Si) とビスマス (Bi) から成る薄膜を実際に作製。合成条件を少しずつ変えた 28 種類のサンプルの断熱性能を測定したところ、熱伝導率 0.16 W/mK という世界最高性能の断熱薄膜材料が得られた。現在は機械学習を用いて、

この薄膜の作製条件の最適化に取り組んでいる。



アモルファス Si と Bi から成る断熱薄膜材料

索ではなく、なぜその機能が生じるかを説明できるようにすること」だと伊藤は語る。そこで、計算科学の手法であるコンピュータ・シミュレーションをベースに、「機械学習」や「スパースモデリング」と呼ばれるデータ科学の手法を活用し、材料と機能との関係性について科学的な解明に取り組みつつ方法論を確立してきた。

加えて、たとえ候補物質を見いだしたとしても、実際に合成することができなければ絵に描いた餅になってしまう。そこで MI<sup>2</sup>I がさらに意識したことは、予測結果に基づき実際に材料を作製することだった。

「2017年には機械学習によって、世界最高の断熱性能を有する断熱材料を作製することに成功しました。数千種類にもおよぶ候補物質から有用と思われる元素を絞りこむことで、早期発見が実現したのです (コラム上参照)。われわれが構築してきた方法論の有用性を実証するものとして、十分な手ごたえを感じています」と伊藤は語る。

### 構造材料の製造プロセスから 寿命までをつなぐ SIP-MI

一方、SIP-MI は材料の実用化を加速することを狙う。実際に使用されている材料を原子レベルで見ると結晶は均一

ではなく、さまざまな欠陥や不均一を抱えている。これを材料工学では「組織」と呼ぶが、铸造や加工、溶接といった「製造プロセス」により、この「組織」が大きく変わる。これが、強度などの「特性」や、寿命など時間の経過がもたらす「性能」を支配する。

これら4要素は材料工学の基礎を為すもので、相関係数や因果関係を理解し制御することが、材料の実用化のために必要となる。しかし、これまでは製造プロセスから性能までを一貫通貫で予測する方法論が確立されておらず、たとえばある材料の製造プロセスを最適化したいと考えた場合、その実験には多大なコストや労力、時間がかかっていた。

そうした状況を打開すべく、SIP では新たな考え方を提案。“実験、理論、経験式、数値シミュレーションを、データ科学を活用して融合させ、計算機上で製造プロセスから性能までを一貫通貫で予測するシステムを開発しよう”という考え方が、マテリアルズインテグレーションだ。ここに NIMS と東京大学が中核機

関を務める SIP-MI のプロジェクトが立ち上がった。

システム開発を進めるにあたり、まずは鉄鋼の溶接部を例題に据えた。これは、組織制御が最も高度に行われている鉄鋼において、溶融から凝固に至る過程を含み、脆弱になることが多い溶接プロセスを取り扱うことができれば、



伊藤 聡  
Satoshi Itoh

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)  
情報統合型物質・材料研究拠点 (CMI<sup>2</sup>) 拠点長



出村雅彦  
Masahiko Demura

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) 副部門長  
材料データプラットフォームセンター (DPFC)  
材料インテグレーション グループリーダー

汎用性の高いシステムが構築できると見込んだからだ。また、予測する性能としては、金属疲労やクリープ損傷、脆性破壊、水素脆化を設定。これらの予測にはマイクロからマクロまで幅広いスケールで起こる現象の連なりを理解する必要があり、これが取り扱えれば、SIP-MIで当面のターゲットとしている構造材料に限らず、多様な材料に適用できるはずだ。

出村はシステム開発のポイントをこう説明する。「まず、材料の世界で起こる物理現象を数学の式で記述した“数値モデル”の整備が必要です。SIP-MIではこの数値モデルを『モジュール』と呼び、疲労寿命やクリープ寿命などを予測できるモジュール群を開発してきました。そして、モジュールを複数つなぐことで、製造プロセスから性能を予測できるようになります。これを『ワークフロー』と呼び、つなぐための数々の仕組みを整えてきました」。ここで重要な役割を果たすのが、データ科学である。

「時に、シミュレーション結果と実験結

果との間に大きなギャップが生じます。そうした場合、数値モデルのパラメータを実験データに適合するように修正していく『データ同化』という手法は有用です。また、どのようなモデルが適しているか諸説ある場面では、『スパースモデリング』というモデル選択の手法が大いに役立ちます」と出村。

続けて出村は現在の状況をこう語る。「2019年3月には、開発してきたシステム(SIP-MIシステム)が完成予定で、現在は仕上げの段階です。今後、SIP-MIに参画している企業による試験活用が予定されています」

### MaDISのもとで相乗効果を

2017年4月から、MI<sup>2</sup>IとSIP-MIは「MaDIS」のもとに結集し、物質の探索と材料実用化まで、相乗効果をあげながら物質・材料の研究開発を刷新していく。伊藤はこう語る。「MI<sup>2</sup>Iでは、優れた性能を発揮するであろう候補物質を数多く

予測してきました。しかし中には、作り方が分からないものも出てきています。そうしたとき、SIP-MIで培ってきた『製造プロセス』に関するモジュールを利用することで、突破口が開ける可能性がある」と期待しています。出村も「今後、SIP-MIにおいても“逆問題”に取り組むことになります(下囲み参照)。そのときに、MI<sup>2</sup>Iが確立してきた方法論は大いに役立つことでしょう」と期待を込める。

これらプロジェクトを通じて、課題も見えてきた。今後、MIを強力に推進していくには、いかに質の高いデータを蓄積し、利活用できるように整備していくかが重要となる。そのため、現在MaDISで構築を進めている「材料データプラットフォーム(p8参照)」と緊密に連携し、効率的なMIのワークフローを築いていく計画だ。MaDISのもと、一丸となって走りつづける2つのプロジェクト。今後への期待が高まる。(文・山田久美)

## TOPIC 新たなプロジェクト、第2期SIPがスタート!

### 「先端的構造材料・プロセスに対応した逆問題MI\*基盤の構築」

研究代表者 出村雅彦 (MaDIS 副部門長)

\*MI…マテリアルズインテグレーションの略。

第2期SIPが開始した。その研究開発課題のひとつ「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(PD岸輝雄 東京大学名誉教授)において、出村が研究代表者を務める「先端的構造材料・プロセスに対応した逆問題MI基盤の構築」が採択された。2018年11月より約5年間にわたり、第1期で開発したSIP-MIシステムのさらなる高度化と汎用化を推し進めるとともに、新しい産学官連携の基盤を築きあげていく計画だ。

SIP-MIシステムの高度化では、“逆問題”への対応に取り組む。これは、第1期において確立した解析手法とは逆の流れ、つまり材料に要求される「性能」を出発点に、性能を発揮さ

せる「組織」「特性」を提案し、さらに、これらを実現する「製造プロセス」を最適化するという新しい解析手法の確立を目指すものであり、非常に挑戦的な課題だ。

汎用化においては、第1期で例題とした鉄鋼の溶接部のみならず、今後エネルギー・環境問題解決の要となる炭素繊維樹脂複合材料、耐熱金属粉末プロセス、セラミックス基複合材料などの、先端的な構造材料とその製造プロセスへと、システムの適用先を拡大していく。

これらの開発と並行して、材料データの記述方式を同時に設計していく点が極めて特徴的だ。材料データプラットフォーム事業と密接に連携して、

高度にデータを活用するための基盤を整え、情報工学と材料工学が融合したSIP-MIシステム2.0の完成を目指す計画だ。

開発にあたっては、産学官の連携をさらに強化していく。産学官で逆問題の目標課題を設定し、各者がそれぞれの役割に応じてシステムを構成する各要素(「モジュール」や「ワークフロー」など)を開発。得られた成果は各企業がそれぞれ独自に活用するとともに、次の産学官連携をさらに高度化・効率化するためにSIP-MIシステムに蓄積していく。産学官連携のオープンイノベーションと企業内研究開発(インソース型)を組み合わせた、日本独自の研究開発スタイルの確立を目指す。

## きみが思っているより 科学はもっとおもしろい



### メタンガスの脅威

文・えとりあきお  
イラスト・岡田 丈(vision track)

地球温暖化といえば、まさきに二酸化炭素(CO<sub>2</sub>)を思い浮かべます。産業革命が起きたころには、大気中のCO<sub>2</sub>の量は280ppmでした。それが、石炭や石油をはじめといった化石燃料を大量に消費するようになって、排出量が大幅に増え、現在は400ppmを越えています。40パーセント以上も増えた計算になりますから、地球が温まるのも当然といえるでしょう。

しかし、地球温暖化に関係するガスはCO<sub>2</sub>だけではありません。いまのところ、その半分以上はCO<sub>2</sub>によるものですが、それ以外にもメタンガス、亜酸化窒素、フロンガスなどが地球温暖化ガスの仲間に入ります。

フロンガスはもともと自然界にあったものではなく、人間が作り上げたガスです。エアコンや冷蔵庫などの冷却剤として幅広く使われてきましたが、オゾン層を破壊するためその製造や使用が禁止されたので、今後急激に増えることは考えられません。問題はメタンガスです。

メタンガスは炭素と水素でできている(CH<sub>4</sub>)ので、燃料として大変すぐれています。天然ガスの成分はほとんどがメタンガスなのは、皆さんご存知のとおりです。

しかし、これが大気中に放出されるとなると、話が違ってきます。実は、メタンガスは同じ量のCO<sub>2</sub>に比べると、なんと21倍から72倍も温室効果が高いのです。

これまでのところ、大気中に放出されるメタンガスの量は、CO<sub>2</sub>に比べて圧倒的に少なかったため、それほど問題にはされま

せんでした。ただ、ヒツジやウシのゲップから出るメタンガスが問題視され、それらの飼育を控えようではないかと言われている国もあらわれています。これらの家畜の胃には、酸素(O<sub>2</sub>)を嫌う性質の微生物が生息していて、メタンガスを生成しているからです。

このメタンガスが今後、地中から膨大な量吹き出してくるかもしれないというのですから、驚きです。

これまで、わずかな温度上昇によってアラスカやシベリアの凍土が溶け、地中から少しずつガスが吹きだしているのを観測した例はみられました。しかし最近の研究によると、北極からメタンガスが大量放出してきているという例が報告されています。

『サイエンティフィック・リポーツ』という学術雑誌によると、ソウルヘイマヨークトル氷河という、アイスランド最大の火山をおおう巨大氷河が溶けだして、毎日最大40トン程度のメタンガスが放出されているというのです。問題は、この氷河と火山という組み合わせにあります。

氷河の底で溶けだした水には、O<sub>2</sub>を嫌う微生物がたくさん存在します。なぜなら、氷河の底はO<sub>2</sub>が少ない上、火山から噴きだしたガスが微生物の栄養になるからです。これらの微生物はメタンガスを大量に生成していきます。メタンガスは水に溶けて運ばれ、やがて大気中に放出されるというわけです。

この研究を率いたイギリス・ランカスター大学のピーター・ウィン教授は、今回調べたアイスランド以外の地域でも「氷河と火山が互いに作用を及ぼしている場所では、メタンガスが放出されている可能性は十分ある」といいます。もし、たくさんの火山が存在する南極でも同じようなことが起こっていれば大変です。

地球温暖化によって氷河が溶け、そこから放出されたメタンガスが地球を暖め、さらに氷河を溶かしていく……。そうした悪循環に、私たちは陥りつつあります。これを食い止めるには、地球温暖化に向けたひとりひとりの努力が不可欠です。

私たちに残された時間はもうわずか。そう考え、すべての人々が力を合わせるべきときを迎えているのです。



えとりあきお: 1934年生まれ。科学ジャーナリスト。東京大学教養学部卒業後、日本教育テレビ(現テレビ朝日)、テレビ東京でプロデューサー・ディレクターとして主に科学番組の制作に携わったのち、『日経サイエンス』編集長に。日経サイエンス取締役、三田出版株式会社専務取締役、東京大学先端科学技術研究センター客員教授、日本科学技術振興財団理事等を歴任。

# MaDISシンポジウム2019

## AIで加速する材料開発とデータプラットフォーム戦略

2019 **1.30** WED

【時間】 10:30-16:35 (10:00受付開始)

【場所】 東京ビッグサイト会議棟 レセプションホールB

参加登録は  
こちら ▶



AIを活用した新しい材料開発に注目が集まっている。NIMSでは、データ科学で新しい物質の発見を目指すマテリアルズ・インフォマティクス、計算機上でプロセスから性能をつなぐマテリアルズインテグレーション、さらにこれらを支える基盤として材料データプラットフォームの構築に取り組んでいる。今回のシンポジウムでは、企業、大学、国研における研究開発の先端的な事例を通して、私たちが目指す材料データプラットフォームの姿を考える。

特別講演: **田中 栄** (株式会社アクアビット)

未来予測2018-2030 —変貌する世界やビジネス、材料R&D新しい潮流—

**富谷 茂雄** (ソニー株式会社)

材料・デバイスものづくりプラットフォームにおける  
マテリアルズ・インフォマティクスの役割

トピックス講演: **池端 久貴** (旭化成株式会社)

機械学習を用いたPoLyInfoの製品開発への活用に向けて

**畑中 美穂** (国立大学法人 奈良先端科学技術大学院大学)

適切な触媒を探し出す: 反応経路自動探索と機械学習の効果的利用

**桂 ゆかり** (国立大学法人 東京大学、NIMS)

論文からの実験データ収集WebシステムStarrydataの開発と熱電材料研究への応用

**LAMBARD Guillaume** (NIMS)

SMILENet: state-of-the-art organic compounds characterization  
without descriptors

**小山 幸典** (NIMS)

データ駆動型新規化合物探索

取組み紹介: **谷藤 幹子** (NIMS)

新たな材料データプラットフォーム全貌

**吉川 英樹** (NIMS)

材料計測データのハイスループットな収集と機械可読化



**MaDIS**  
NIMS MATERIALS DATA and  
INTEGRATED SYSTEM

主催: 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 (NIMS)

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) e-mail: madis@ml.nims.go.jp

後援: 文部科学省

[http://www.nims.go.jp/research/MaDIS/events/MaDIS\\_Symposium2019.html](http://www.nims.go.jp/research/MaDIS/events/MaDIS_Symposium2019.html)



NIMS NOW vol.19 No.1 通巻174号 平成31年1月発行

国立研究開発法人 **物質・材料研究機構**



古紙配合率70%再生紙を  
使用しています



植物油インキを  
使用し印刷しています