

JSTイノベーションハブ構築支援事業

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

**MI²I: “Materials research by Information Integration”
Initiative**

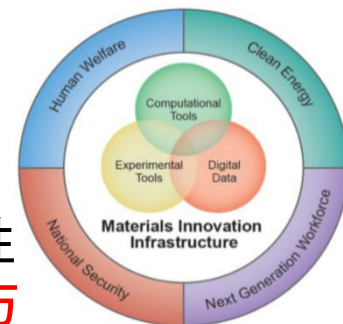
解析型研究から開拓型研究へ

国立研究開発法人 物質・材料研究機構(NIMS)

Materials Genome Initiative



Materials Genome Initiativeを2011年に立上げ。
 材料開発の短期化・低コスト化に向けデータ駆動型研究の重要性
 に着目。2014年6月に“Strategic Plan”を公表。これまでに**250百万
 ドル以上**、2014年度5省庁で**150百万ドル**以上の投資が計画。



NIST “Center for Hierarchical
 Materials Design”
 (Northwestern, U. Chicago, Argonne)

NSF “Designing
 Materials to
 Revolutionize and
 Engineer our Future
 (DMREF)”

DARPA
 “Materials
 Development
 for Platforms
 (MDP)”



EU, 中国もフォロー

JSTイノベーションハブ構築支援事業



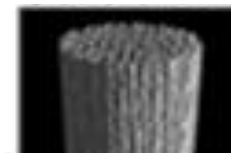
社会インフラ



エネルギー・環境



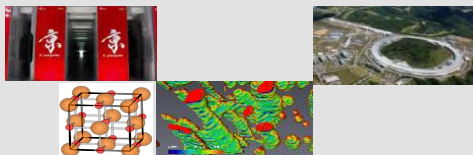
情報・通信



ライフサイエンス

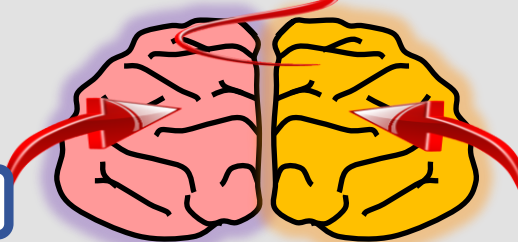
MI²I

産業



物質・材料研究

- 実験 (合成、分析、解析)
- 理論 (原理追求)
- 計算科学 (シミュレーション)



物質・材料データベース

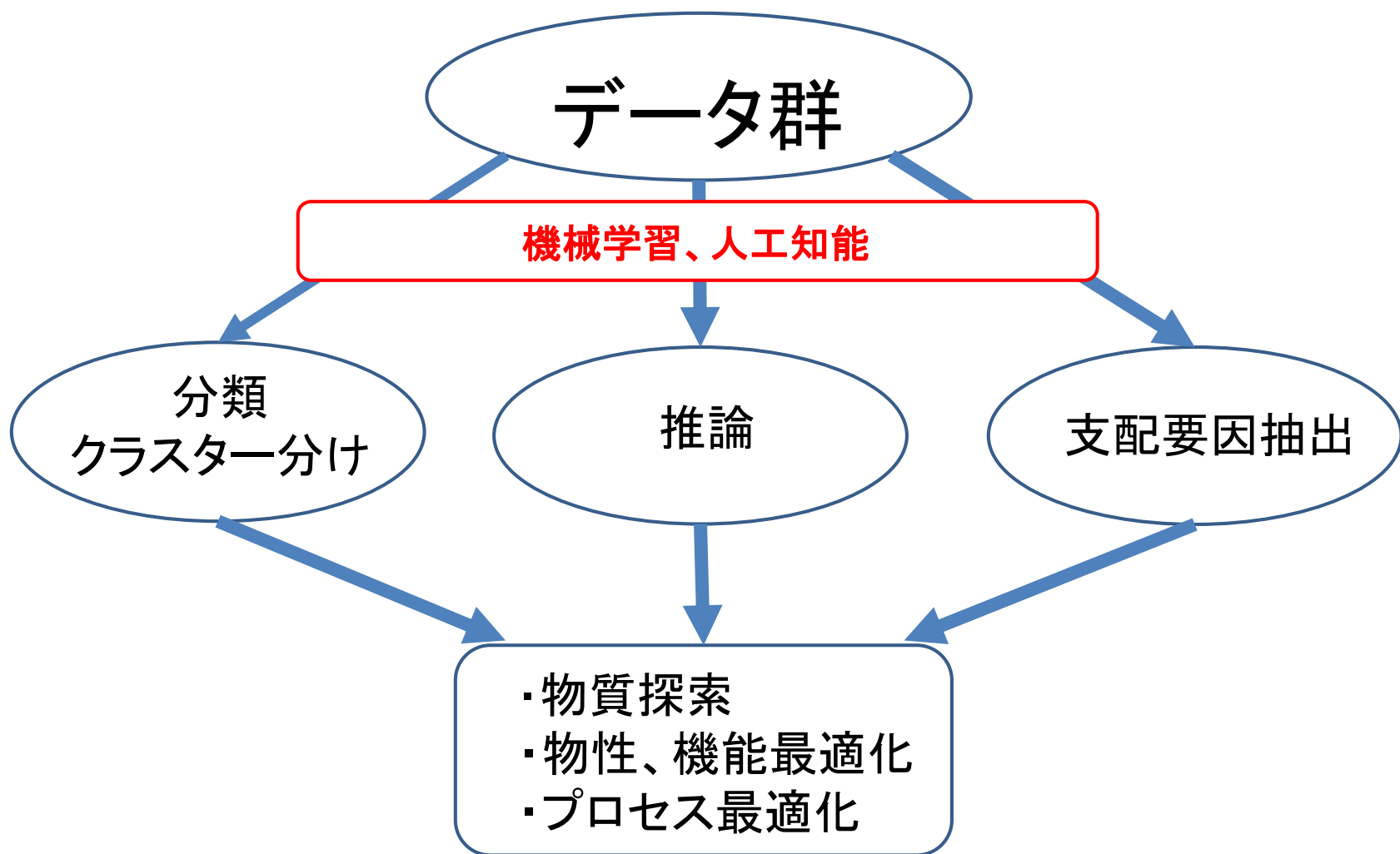
$$d_{\beta}(x_0, x_1) = g_{\beta}(d(x_0, x_1)) \quad (\beta > 0),$$

データ科学

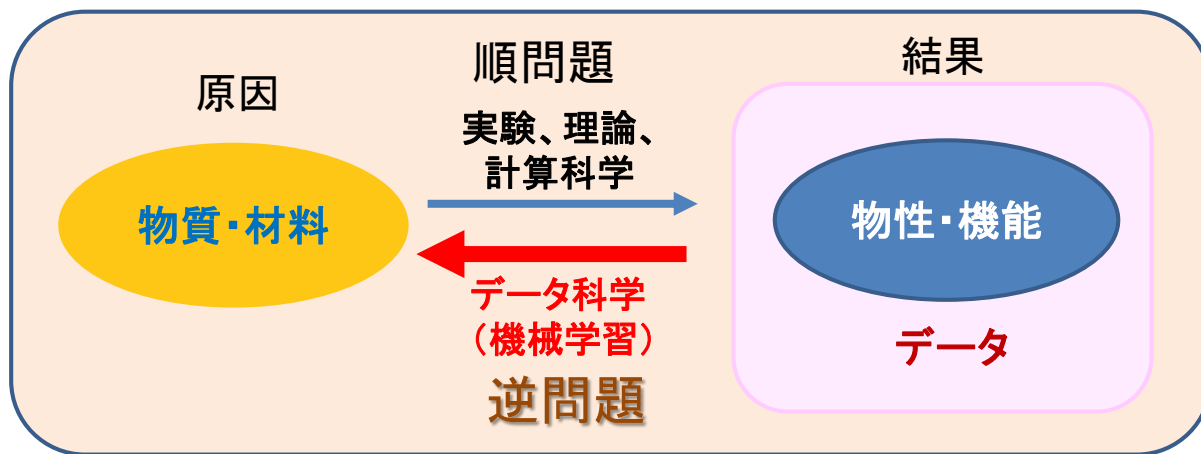
- ビッグデータ解析
- 機械学習
- 人工知能 (AI)

物質・材料科学におけるデータ科学

「膨大なデータの解析により効率的に材料設計指針を得る」



情報統合型物質・材料開発



材料設計指針

「物質・材料開発」のこれまでとこれから

これまで

経験者の「閃きと勘」



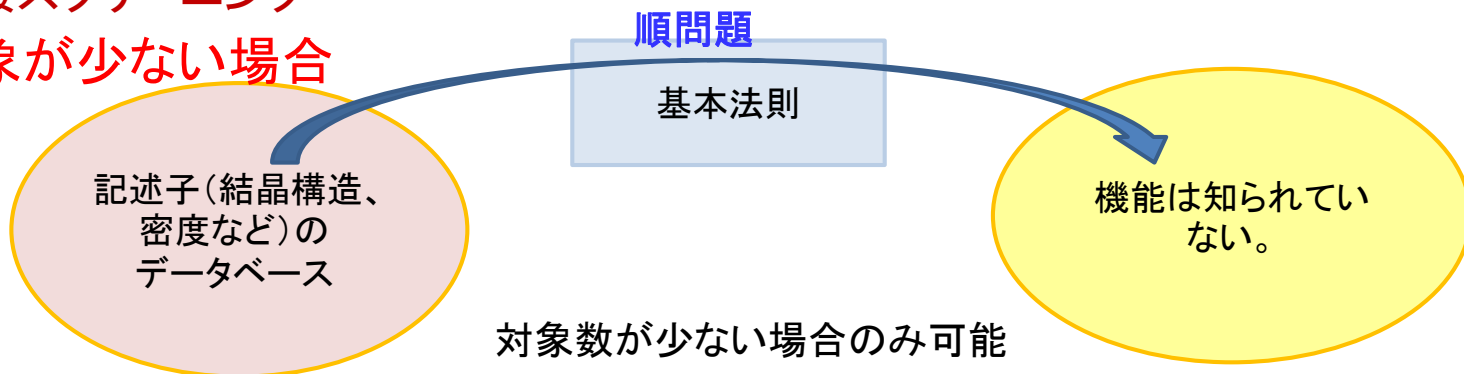
これから

データ科学：計算機による高速で網羅的な探索

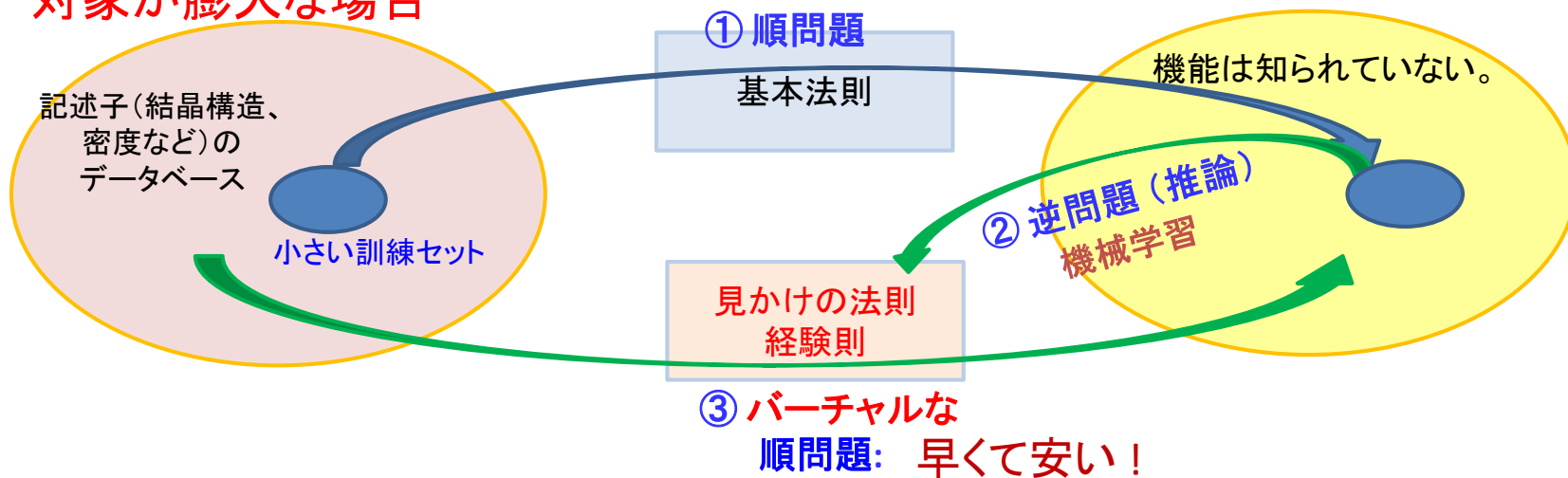
開拓型研究を促進し、物質・材料研究開発を加速する！

機械学習による逆問題へのアプローチ

直接スクリーニング 対象が少ない場合

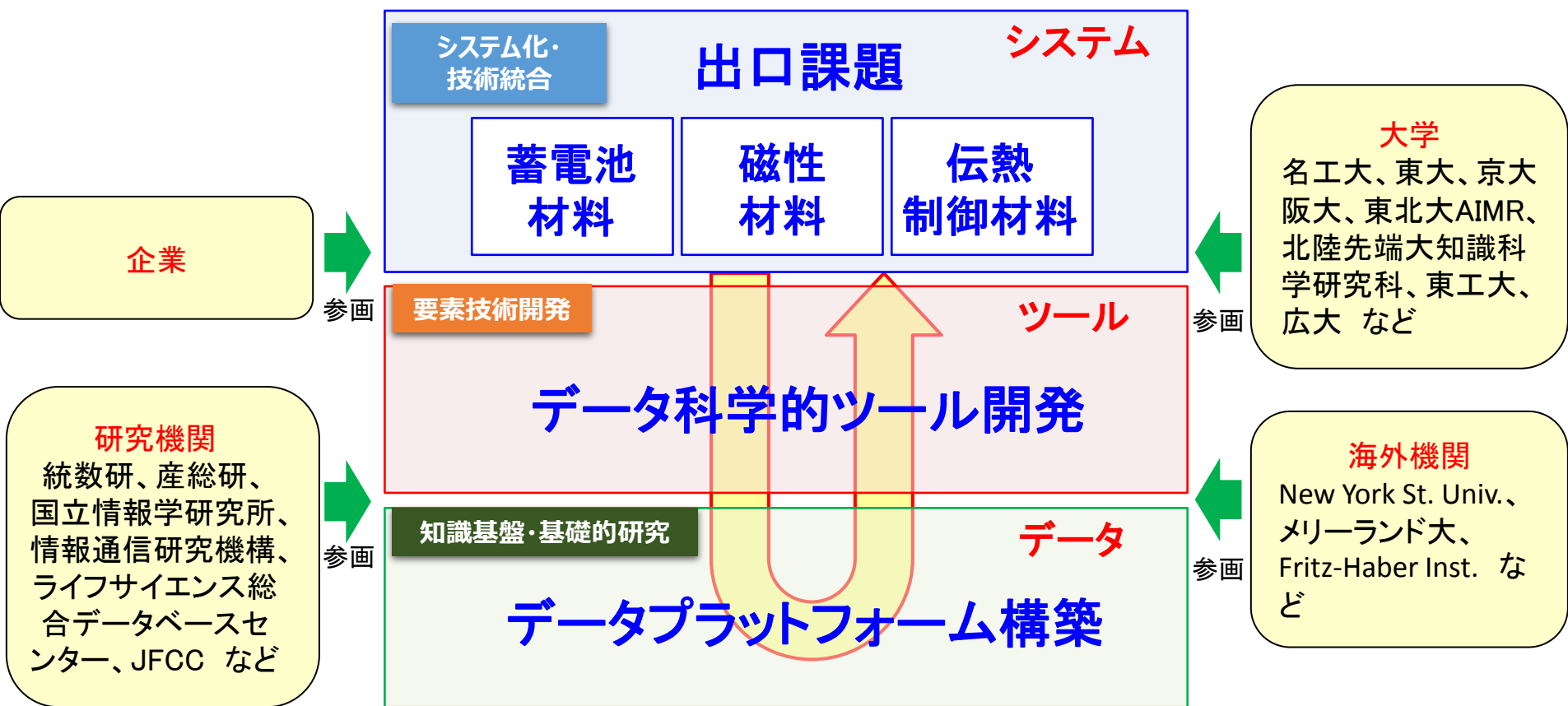


バーチャルスクリーニング 対象が膨大な場合



情報統合型物質・材料開発イニシアティブ を推進する新領域融合拠点

出口課題を起点とした三層構造による強力なプロジェクト推進体制



プロジェクトの目標

システム

産業界の物質・材料研究開発課題に対して、有効なソリューションを短期間で開発・提供。

目標を実現するために、

ツール

○劇的な変革をもたらす新物質探索・設計パッケージに必要なツール群をデータ科学の技術等を活用しながら開発。

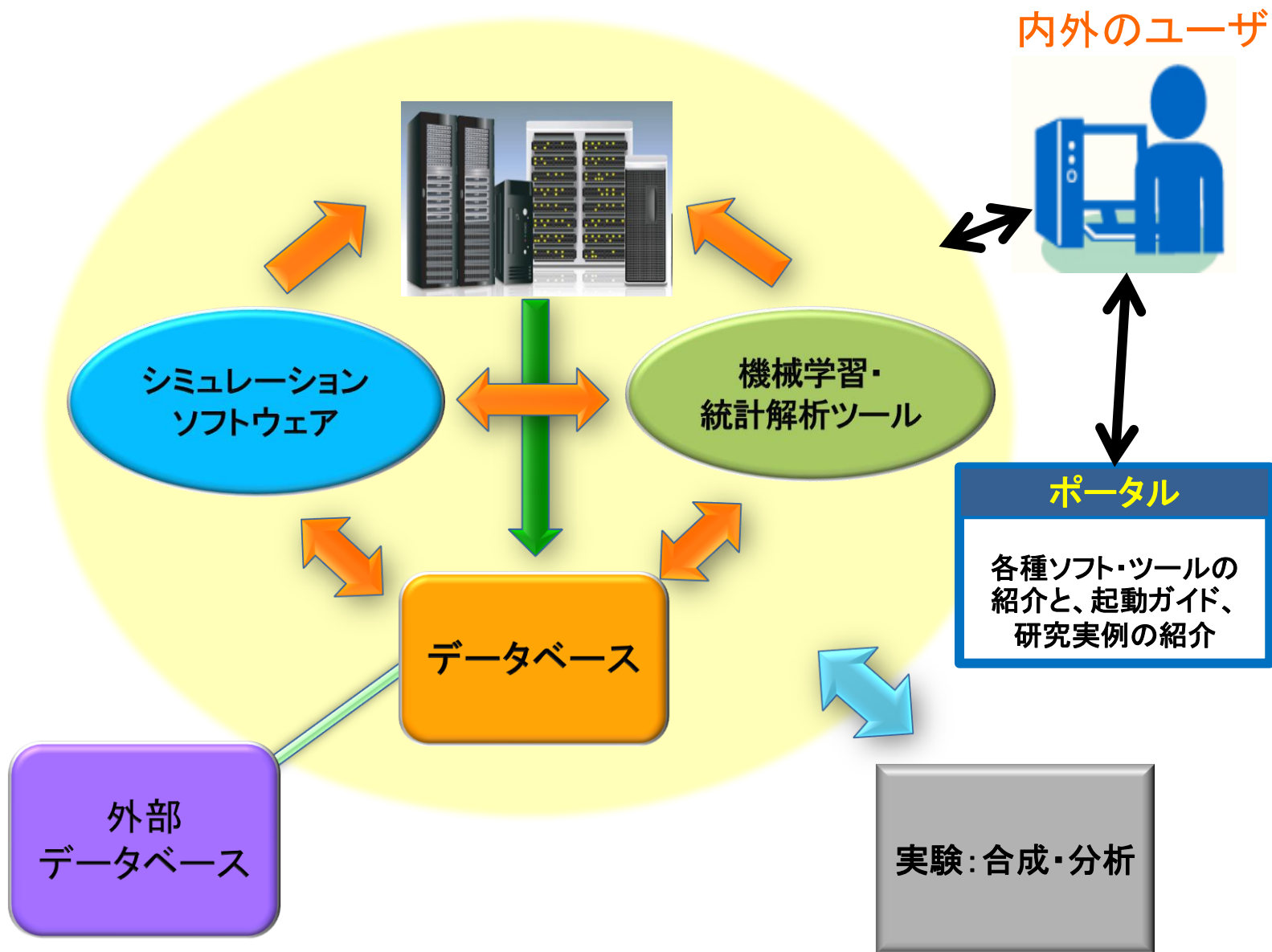
さらに、

データ

○使えるデータベースを整備、上記ツール群を加え、国の知的資産として新たな研究開発手法の基盤（データプラットフォーム）を構築。

Lower Level: 知識基盤・基礎的研究

情報統合型物質・材料開発プラットフォームの構築と公開



MI²Iへの参加の形態

共同研究契約型の参加

- ◆ 特定企業向けのカスタマイズを想定した事業
- ◆ 研究開発予算は企業側が負担
- ◆ 成果非公開

MI²I活動

MI²I
拠点事業

企業
社会

コンソーシアム型の参加

- ◆ ハブ拠点機能のトライアルユース
- ◆ 研究開発予算は持ち寄り方式
- ◆ 成果はコンソーシアム内公開

ハブ拠点構築(集中研)に参加

- ◆ 拠点事業戦略に沿った研究開発
- ◆ 研究開発予算は拠点側が原則負担
- ◆ 成果は拠点に帰属

来年の1月に予定している
MI²I フォーラムまでに参加形態
を確定する予定。
ブースまでお越しください。