

2.5.3 マテリアルズ・インフォマティクス

(1) 研究開発領域の定義

計算科学やデータ科学を用いた物性予測、ハイスループット材料合成・評価、データマイニングによる特徴抽出などにより、新材料の設計、探索、発見を飛躍的に加速することを可能にする取り組みを総称した技術分野である。従来、交わることが少なかった、材料合成/化学、第一原理計算/物理、データ科学/数学、データベース/リポジトリなどの分野から、研究者が集まっており、学術分野自体が異分野融合になっていることに特徴がある。究極的には、材料特性を支配する究極の関係性を発見し、自由自在に材料開発を進めると同時にその背景にある原理を見出そうとするものである。

(2) キーワード

データ駆動型、Materials Genome Initiative、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルズ・インテグレーション、機械学習、深層学習、データベース、データ同化、転移学習、回帰、ベイズ推定、ハイスループット合成、ハイスループット計測、プロセスインフォマティクス

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

2011年に米国が「Materials Genome Initiative (MGI)」を発表してから約10年が経過した。この間に、実験科学、理論科学、計算科学に続く第4の科学として、データ科学 (Informatics) が材料研究において非常に有力な手法であることはさまざまな研究事例をもって実証され、もはや材料研究にデータ科学を活用することは、当たり前となりつつある。特に、さまざまな材料データ (画像、スペクトル、結晶構造、物理量、文章 など) を記述子としてデータ科学により“新規材料を予測”する技術は確立されつつあり、あらゆる材料開発においてその技術は使われている。

一方、近年では新規材料の予測だけでなく、“新規材料の合成”まで行うことができるマテリアルズ・インフォマティクスが求められ始めている。実験科学、理論科学、計算科学、データ科学に加え、ロボティクス、プラットフォーム、通信、IoT、セキュリティなど、あらゆる技術を発展・融合させることにより“新規材料の合成”までのプロセスを最適化する技術を確立することができれば、材料研究分野における日本の国際競争力の強化に大きく貢献できると期待される。

[研究開発の動向]

• 日本

2015年に発足したNIMSを中核機関とする「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (“Materials research by Information Integration” Initiative: MI²)」(PL: 伊藤聡、2015～2019年度)、2014年に開始した内閣府戦略的イノベーション創造プログラム (Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program: SIP)「革新的構造材料」(PD: 岸輝雄、2014～2018年度)のなかの研究開発項目の1つ「マテリアルズインテグレーション」(領域長: 小関敏彦)、2016年に開始した経済産業省/NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超超プロジェクト)」(PL: 村山宣光、2016～2021年度)の3つのプロジェクトにより、補完的に研究開発が遂行されてきた。また、内閣府における統合型材料開発システムとして、上記の3プロジェクト (MI²、マテリアルズインテグレーション、超超プロジェクト)の間で、

実施者を加えた3府省連絡会議等を適宜開催し、各事業の進捗や成果の共有が図られた。2018年にはSIP(第2期)として、「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(PD:三島良直、2018~2022年度)が開始されている。

なお、NIMSにおいては材料データの収集が以前から行われてきたが、2017年度より従来の材料データベースMatNaviを包含し、実験データのリポジトリや解析ツールの提供も含めたデータプラットフォーム構築事業が行われている。

マテリアルズ・インフォマティクスを推進する研究開発事業として、JST 戦略的創造研究推進事業においては、さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」(研究総括:常行真司、2015~2020年度)、CREST・さきがけ複合領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」(研究総括:雨宮慶幸、副研究総括:北川源四郎、CREST:2016~2023年度、さきがけ:2016~2021年度)、CREST 研究領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」(研究総括:細野秀雄、2017~2024年度)が相次いで発足し、マテリアルズ・インフォマティクスが材料開発の重要なツールであることを示し続けている。

・米国

2011年より国家的な取り組みとして開始されたMGIは、材料開発に要する期間を2分の1に短縮するという目標を掲げ、「計算ツール」「実験ツール」「デジタル・データ」を材料イノベーション基盤として整備するべきであるとするものであった。このプロジェクトでは、以下にあげる3つの方向で研究が開始された。

1つ目は、第一原理計算を主体として物質の構造や物性に関するデータを作り出し、所望の性能や機能を持つ物質・材料を見つけ出そうとする流れであり、実験と計算科学にもとづくデータベースとデータ科学にもとづく各種分析ツールを融合した物質の網羅的スクリーニングを行うものである。その例として、マサチューセッツ工科大学(MIT)のグループ(現在はUC Berkeley)とローレンス・バークレー国立研究所による“Materials Project”がある。ここでは、無機結晶構造データベースに収録された結晶構造データをもとに、網羅的に第一原理計算を行った結果を、熱力学データベースをリンクさせて、状態図や構造予測、化学反応予測などを収録したデータベースを公開している。さらに、これらのデータを活用できる各種アプリケーションソフトウェアも公開しており、リチウムイオン電池の正極材料の探索などに用いられている。同様のデータベースの構築と公開は、デューク大学、ノースウェスタン大学をはじめとする、大学・国研で行われている。

2つ目は、コンビナトリアル合成・計測によるハイスループットデータ収集であり、実験家を中心に、高速に物質を合成し、物性を計測し、データベース化するとともに、視覚化ツール、分析ツールを用いて最適物質、構造を予測するというサイクルを構築するものである。こうしたコミュニティの活動は、エネルギー省傘下の国立研究所ネットワークのもとで、High-Throughput Experimental Materials Collaboratoly (HTE-MC) のプログラム推進に結実している。

3つ目は、統合計算材料工学(Integrated Computational Materials Engineering: ICME)の流れであり、構造材料を中心に、結晶構造(第一原理計算)から高次構造までさまざまなスケールのモデリングをリンクさせ、また、加工プロセスと組織構造の相関もデータにより統合していくものである。2014年、NISTが立ち上げたCenter for Hierarchical Materials Design (CHiMaD)は、ノースウェスタン大学、シカゴ大学を中心としたもので、熱力学・状態図計算など、個別のニーズに合わせて速度論のシミュレーションを行って材料特性の予測、材料開発の支援を実施している。

MGIに関する最近の注意すべき動きとしてあげられるのが、「Materials Research Data Council

(MaRDaC)」の動きである。この評議会は、2019年11月にスタートし、オープン・アクセス可能・相互運用可能な材料データを実現することを目的として設立された「材料研究データアライアンス (MaRDa)」の運営委員会として位置づけられている。

具体的な動きとして、最初の会合である「Materials Data Summit」がシカゴで開催されたほか、NSFから研究コミュニティに向けて2019年10月に発信されたCSSI Dear Colleague Letter「データ集約型の科学・工学研究をサポートするサイバーインフラストラクチャに関する情報のリクエスト」に呼応して、材料コミュニティからの返答書を2019年12月に返信している。この返信に記述された内容は、(1) サイバーインフラストラクチャ、(2) データベース技術、(3) 相互運用可能システムとユーザビリティ、(4) 自動データキャプチャ、(5) 機械学習、(6) コミュニティ (文化、持続可能性、人材、トレーニング) に関する材料コミュニティからの現状の説明となっている。

もう1つ特筆される取り組みは、NIST-CoE プログラムの1つとして推進されていたCHiMaDの継続である。前述のように2014年からノースウェスタン大学を中心とする研究チームの5年プログラムのファンディングが開始し、NISTのMGI研究チームとの密接なコラボレーションのもとシカゴ地区でのデータ活用型材料研究を牽引してきたが、2019年にさらに5年間にわたるファンディングの継続が決定された。研究チームの中心人物であるOlson教授は2019年12月にMITに移籍しており、CHiMaDセンターとの今後の関係が注目される。

データインフラストラクチャに関しては、MGIの黎明期から国家プロジェクトにおいて開発が進められてきた米国におけるデータプラットフォームシステムのいくつかにおいては、データ公開のサービス運用が開始されている。

Materials Data Facility (MDF) は、CHiMaDのデータツールの1つとしてアルゴンヌ国立研究所を中心に開発が進められてきたものであり、登録されるデータにDOIを付与し、グローバルな学術コミュニケーションの中でデータを流通させることができるほか、組織、登録年、キーワード、関連する元素などに注目した検索機能を有している。

その他としては、ミシガン大学のPRISMSセンターが開発したMaterials Commonsも、同じようなデータ公開機能を有するほか、民間ではCitrine informaticsが旧来からのプラットフォームサービスを継続し、AI活用可能なデータ管理機能を強みとして、製造業との連携を強めている。

• 欧州

FAIR原則 (Findable, Accessible, Interoperable, Re-purposable/Reusable) の重要性が材料科学分野においても認識されつつあるなかで、2018年9月に「FAIR Data Infrastructure for Physics, Chemistry, Materials Science, and Astronomy e.V. (FAIR-DI)」がドイツ・オランダを中心とする研究機関連携の母体として発足している。この団体は、Horizon 2020で2015年からファンディングされているNOMAD-CoEを主軸に置すが、材料分野にとどまらずバイオ分野・天文学分野とも横串を刺す形でFAIR原則に従うデータ管理の実現と、そのための世界的なデータインフラストラクチャを構築することを目的としている。NOMADにおけるインフラストラクチャの整備は系統的に進んでおり、生データを登録・管理するリポジトリサービスのほか、解析ツール、可視化、知識ベース、メタデータの統合と合わせて合計5つのサービスを柱として発展している。2020年3月に3年間の追加ファンディングが決定し、2020年6月には材料分野におけるFAIRデータ管理を主題とした国際ワークショップを開催している。

FAIR-DIがデータインフラストラクチャに焦点を当てている一方で、エクサスケールのHigh Performance Computingのためのインフラストラクチャに焦点を当てるのが「MATERIALS design at the eXascale (MAX)

a European centre of excellence」である。このセンターでは、5カ所のHPCリソースをネットワークし、それらの上で動くコード開発をテクノロジーパートナーとともにサポート、さらにはHPCリソースを必要とするコミュニティとの連携などを主な活動項目としている。

このセンターのデータ管理プラットフォームとして機能するのが、Materials Cloudである。このシステムはPythonをベースとするオープンなインフラストラクチャシステムであるAiiDAをベースとして動作するもので、特に、計算データの生成ワークフローを管理し、これに伴うデータ来歴（provenance）の管理も行えることが特色となっている。AiiDA、Materials CloudのいずれもスイスEPFLにおいて開発が進められてきたものであり、必然的にEPFLはMAXの中心的な推進機関でもある。

データの標準化に関しては、European Materials Modeling Council (EMMC) がHorizon 2020ファンディングを得て進めてきたオントロジーを中心としたものになっている。EMMCはその目標として、材料分野において産業界、とくに中小企業をカスタマーとするデータ市場の立ち上げを掲げており、市場でデータを流通させるために必要な共通記述様式の策定を進めてきた。2018年にロードマップをまとめ上げてHorizon 2020プロジェクトを終了したが、2019年7月に非営利法人化してその後も活動を継続している。データ市場実現に向けたプロジェクトは2つ並行して走っており、いずれもMODAと呼ばれる材料モデリングにおけるデータ記述のための標準規格に準拠した標準オントロジーを基礎においてデータ構造化を進めている。

一方、入出力するデータの形式を揃える別の手段として、入出力結果へのアクセスを全てAPI化し、そのAPIの仕様を標準化するという方法がある。この方式のもと、コミュニティ主導で進められている活動が「OPTIMADE」である。OPTIMADEは、2018年から一年に一度のワークショップを毎年主催し、材料分野におけるデータ入出力をREST API化することについて議論を進めてきた。現在、バージョン1.0.0として仕様が公開されており、さまざまなプログラムが入出力をその仕様に合わせるように調整を行い始めている。その先鋒となっているのが、NOMADおよびMaterials Cloudの両リポジトリである。加えて、米国の代表的な第一原理計算データベースを運営するAFLOW、Materials Project、OQMDはいずれもこの取り組みに関与しており、現在、16のAPIプロバイダーがOPTIMADEに準拠するとしている。今後、第一原理計算コミュニティにおいて、OPTIMADEはデータ入出力のデファクト標準になる可能性があり、注視する必要がある。

• 中国

中国においては、2014年に上海市と上海大学が共同で進めるShanghai Materials Genome Instituteを設立し、最近、急速にデータ科学を活用した材料開発研究を進めている。また、2016年に中国科学院物理研究所と北京科技大学が共同で北京マテリアルズゲノム工学イノベーション連盟を設立している。さらに同年、上海交通大学においてもマテリアルズゲノム連合研究センターを設立するなど、国を挙げてマテリアルゲノム研究に力を入れ始めていると同時に欧米の研究者との連携を強くしている。2016年3月に発表された科学技術イノベーション第13次五カ年計画においても、中国産業の国際競争力向上のための重点技術の1つ「新素材技術」のなかに「マテリアルズゲノム工学（目標：新材料の開発期間・コストの半減）」と明記されている。さらに、国家重点研究開発計画の1つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」（2016～2018年の3年間に計44課題、総額約8億元）が推進されている。

• 韓国

2015年から10年計画でCreative Materials Discovery Projectが開始している。また、最近、韓国科学技術研究所（Korea Institute of Science and Technology：KIST）において計算科学を中心とした

Materials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS) が設置された。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

新型コロナウイルス感染症の流行の影響もあり、国内外において研究者がラボに行くことができない状況が多発した。そのため、研究者がラボに出向くことなく材料研究を進めることができる材料開発システムの需要が増大している。また近年、マテリアルズ・インフォマティクスの領域において、『自律的 (Autonomous)』という単語が1つのキーワードとなっている。人間が介在することなく、コンピュータ自身が状況に応じてルールを生み出し、自律的に材料開発を進める材料開発システムの構築が、本領域におけるチャレンジングな課題の1つとして考えられる。自律的に材料探索を行うことができる材料開発システムは、大きく分けてバーチャル (仮想空間) での自律的材料探索システムと、リアル (実空間) での自律材料探索システムの2種類に分けて考えることができる。仮想空間での自律的材料探索システムとしては、材料シミュレーション (e.g 第一原理計算) と機械学習を組み合わせた手法の開発が進められている。仮想空間で材料創製および材料特性評価を行う材料シミュレーションを、ベイズ最適化や強化学習などの機械学習を用いて逐次的に実行し続けることによって、仮想材料空間にて自律的に材料を探索することができる。一方、実空間での自律材料探索システムとしては、ロボティクスと機械学習を組み合わせた手法の開発が進められている。簡単な実験系 (例えば、材料合成の条件出し) であれば自律的に探索を進めることができるため、人間の工数を削減することができつつある。

機械学習モデルの『解釈性 (Interpretability)』も、マテリアルズ・インフォマティクスの領域において大きく取り上げられている。深層学習のようなブラックボックス型の機械学習モデルは、高い予測性能を誇る一方、モデル内部の詳細な情報を抽出することが難しい。そこで近年、高い予測性能を保ちつつ高いモデル解釈性を持つ機械学習手法の開発が進められている。機械学習モデルの解釈性に関しては、材料研究領域だけではなく機械学習 (AI) 研究領域全体においても非常にホットなトピックであり、“Interpretable machine learning” や “Explainable AI (XAI)” といったカテゴリとして急速に研究が進められている。解釈性の高い機械学習を用いると、物理/化学/材料学の知見をベースとして人間が機械学習モデル内部を解析することができるため、材料研究にかかわる多くの知見や新たな物理法則の導出につなげることができる。そのため、解釈性の高い機械学習技術は、物理/化学/材料学の知見を持った人間とAIが協奏して材料研究を推進するためのキーテクノロジーの1つとして考えられる。機械学習モデルの解釈性を活用し、AIと人間が協創しつつ材料開発を成功させた事例もいくつか報告されている。当然、機械学習のみを使い盲目的にマテリアルズ・インフォマティクスを進めるよりも、研究者が所有する物理/化学/材料学の知見を有効活用しながらマテリアルズ・インフォマティクスを推進した方が効率的であるため、機械学習モデルの解釈性の重要さは、材料研究領域においても認識されつつある。

2017年、Iwasakiらは、3元コンビナトリアル試料の構造評価に機械学習を導入することで特定の箇所の計測だけで全点計測した結果とほぼ同じ結果を得ることが可能であることを示した。材料開発に共通して行われるX線構造解析を短時間化したインパクトは大きかった。評価の効率化により、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料予測からハイスループット合成・評価までのワークフローが同じペースで実行できプロセスデータを含む材料データセットの作成がほぼ、同じペースで可能となった。教師データの蓄積にも貢献し、バーチャルスクリーニングの精度を向上させることになると期待される。

実験データを共有化する試みも始まっている。National Renewable Energy Laboratories (NREL) では、

これまで蓄積してきたハイスループット実験のデータをプロセス条件も含めて公開している。これらの実験結果は機械学習における教師データとして利用され材料設計の予測精度の向上に寄与すると期待されている。

最近、実験室内を移動ロボットが動き、自動で合成から評価まで行う「ロボット化学者」が登場した。これはリバプール大学にある“Materials Innovation Factory”で行われた試みであるが、今後はハイスループット合成・評価とロボティクスとの融合が進むと考えられる。

【注目すべき国内外のプロジェクト】

■ JST-さきがけ、CREST / 計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用 (2016年～)

計測・解析技術の深化による新たな科学の開拓や社会的課題の解決のために、多様な計測・解析技術に最先端の情報科学・統計数理の研究を高度に融合させることによって、これまではとらえられなかった物理量・物質状態やその変化あるいは潜在要因等の検出、これまでは困難であった測定対象が実際に動作・機能している条件下でのリアルタイム計測等を実現するインテリジェント計測・解析手法の開発とその応用をめざしている。

■ JST-CREST / 実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新 (2017年～)

これまで実施されてきた物質・材料開発の基本となる実験科学と、理論、計算、データ科学とを融合させることにより、革新的材料開発へとつながる手法の構築をめざしている。

■ SIP第2期 / 統合型材料開発システムによるマテリアル革命 (2018年～)

第1期SIP「革新的構造材料」後継プロジェクトとして発足し、マテリアルズインテグレーション (MI) の技術基盤を生かし、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする逆問題MIに対応した統合型材料開発システムの開発をめざしている。

■ 新学術領域研究 / ハイパーマテリアルのインフォマティクスとhidden orderの探索 (2019年～)

ハイパーマテリアル (準結晶・近似結晶等、補空間を含む高次元空間で統一的に記述される物質群) を対象とするマテリアルズ・インフォマティクス (MI) の学術基盤の構築をめざしている。

■ JST未来社会創造事業 / Materials Foundryのための材料開発システム構築とデータライブラリ作成 (2018年～)

データ科学を使ったバーチャルスクリーニング、ハイスループット材料合成・評価を使った材料データライブラリを作成し、新材料開発のワークフローの開発をめざしている。

■ JST未来社会創造事業 / マテリアルズロボティクスによる新材料開発 (2019年～)

人工知能とロボット、そして、研究者の知識・経験・勘を統合した研究開発共通基盤技術 (人工科学者) の確立をめざしている。

【海外】

■ Materials Genome Initiative : MGI (2011～2016年)

「計算、データ、実験の各手法を連携させた統合アプローチを主流にするための研究者意識の醸成」「実験・計算・理論の各研究者の統合」「データへの容易なアクセス環境の整備」「世界水準の人材育成」を目標として掲げ、計算科学・データベース・機械学習・深層学習を用いた材料開発の高効率化が進められている。本イニシアティブ自体は、2016年に終了したが、各省4つのセンター (CNGMD、CHiMaD、SUNCAT、PRISMS) を中心にマテリアルズ・インフォマティクスにかかわる研究開発が活発に継続されている。

■ Materials Project (2011年～)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

材料シミュレーションによるデータ蓄積や機械学習など用いてオンラインツールとして材料スクリーニングを可能とすることを目指している。現在、開発されたオンラインツールやデータベースは、その利便性から世界中で広く使用されている

■中国 国家重点研究開発計画 / 材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム (2016年～)

2016年から中国国内の研究開発の強化を目的とした国家重点研究開発計画が開始され、その1つとして「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」を指定。2016年に14課題、2017年に19件、2018年に11課題を採択し、総額約8億元が投資されている。

(5) 科学技術的課題

現状、日本のマテリアルズ・インフォマティクスは、物質・材料設計にかかわる3つの基礎技術「実験科学」「理論科学」「計算科学」に、第4の科学「データ科学（機械学習）」を加えた合計4つの技術の強化およびその融合に注力している。しかし今後は、これら4技術に加え、新たな技術領域の強化およびその融合にも注力すべきと考えられる。具体的には、実空間での自律的材料探索システムで重要な技術となる「ロボティクス技術」、データを効率的に管理・共有するための「プラットフォーム技術」や「クラウド技術」、遠隔操作（リモート制御）でのリアルタイム材料実験を実現するための「通信技術」、材料やプロセスのビッグデータを効率的に取得するための「IoT技術」、安全なデータ共有およびデータ融通を実現するための「セキュリティ技術」などがあげられる。これらの技術を材料研究へ積極的に取り込み、“新規材料の予測”だけでなく“新規材料の合成”までを一貫して効率的に行うことができる次世代のマテリアルズ・インフォマティクスに向けて材料研究を推進するべきと考えられる。

(6) その他の課題

昨今のマテリアルズ・インフォマティクスの進展によって、材料開発分野とデータ科学（機械学習）分野の技術連携は強化された。しかし、上記したその他の技術分野（ロボティクス、通信、プラットフォーム、IoT、セキュリティ）との連携はいまだ希薄なままである。

インフォマティクスを行うためのデータが少ない点は引き続き大きな問題となっている。元来インフォマティクスはビッグデータを扱うための方法論である。良質の材料データを大量に集めていくことが必要となるが、2020年6月に文部科学省、経済産業省合同の戦略準備委員会から「マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けて」という取り纏め文書が発表された。そのなかで日本として戦略的にデータを創出し、活用するための基盤、マテリアルDXプラットフォーム構想が打ち出されており、今後の動向が注目される。

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	○	↗	・ MI 技術にかかわる論文数は増加 ・ 数多くの国家プロジェクトにMIにかかわる記載あり
	応用研究・開発	○	↗	・ 産業界からSIP等の国プロへ参加している事例が増大 ・ MIのベンチャー企業も登場

米国	基礎研究	◎	↗	・ MGI 終了後も、広範囲で MI に関する基礎研究支援体制は継続 ・ MI 技術にかかわる論文数は増加
	応用研究・開発	○	↗	・ MI のベンチャー企業の 1 つである Citrine 社が健闘 (SBIR フェーズ 2)
欧州	基礎研究	○	↗	・ MI 技術にかかわる論文数は増加
	応用研究・開発	○	↗	・ GRANTA 社の MI にかかわる活動が顕著
中国	基礎研究	○	↗	・ MI 技術にかかわる論文数は増加 ・ 中国 MGI が進展
	応用研究・開発	○	↗	・ MI 関連特許多数
韓国	基礎研究	○	↗	・ MI 技術にかかわる論文数は増加
	応用研究・開発	○	↗	・ ChemEssen Inc. から MI 関連特許多数

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDS の調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

参考・引用文献

- 1) E. Gianchandani and M. Parashar, “Dear Colleague Letter : Request for Information on Data-Focused Cyberinfrastructure Needed to Support Future Data-Intensive Science and Engineering Research”, National Science Foundation, <https://www.nsf.gov/pubs/2020/nsf20015/nsf20015.jsp> (2020年12月21日アクセス)
- 2) Material Resource Centers, “Materials Genome Initiative”, NIST, <https://www.nist.gov/mgi> (2020年12月21日アクセス)
- 3) M. Wilkinson et al., “The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship”, *Sci Data* 3 (2016) : 160018. doi : 10.1038/sdata.2016.18
- 4) CHiMaD, “Center for Hierarchical Materials Design”, NIST, <https://chimad.northwestern.edu/> (2020年12月21日アクセス)
- 5) Cynthia Rudin, “Stop explaining black box machine learning models for high stakes decisions and use interpretable models instead”, *Nat. Mach. Intell.* 1 (2019) : 206-215. <https://arxiv.org/abs/1811.10154> (2020年12月21日アクセス)
- 6) R. Guidotti et al., “A survey of methods for explaining black box models”, *ACM Comput. Surv.* 51, no. 5 (2018). doi : 10.1145/3236009
- 7) J. Chen et al., “Learning to explain : an information-theoretic perspective on model interpretation”, *Proceedings of International Conference on Machine Learning (ICML) . PMLR* 80 (2018) : 883-892. <http://proceedings.mlr.press/v80/chen18j.html> (2020年12月)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御

- 21日アクセス)
- 8) R. Sawada, Y. Iwasaki and M. Ishida, “Boosting material modeling using game tree search”, *Phys. Rev. Mater.* 2, no. 10 (2018) : 103802. doi : 10.1103/PhysRevMaterials.2.103802
 - 9) Materials Data Facility, “The Materials Data Facility (MDF)”, NIST, <https://materialsdatafacility.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 10) Materials Commons, “A site for Material Scientists to collaborate, store and publish research”, Univ. Michigan, <https://materialscommons.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 11) Globus, “10 Years of Connecting the Research Universe : Research data management simplified”, Univ. Chicago, <https://www.globus.org/> (2020年12月21日アクセス)
 - 12) Citrine Informatics, “The AI Platform for Materials Development”, Citrine Informatics, <https://citrine.io/> (2020年12月22日アクセス)
 - 13) FAIR-DI, “WELCOME”, FAIR-DI, <https://www.fair-di.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 14) NOMAD, “NOMAD Center of Excellence”, NOMAD, <https://nomad-coe.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 15) CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE, “MAterials design at the eXascale, European Centre of Excellence in materials modelling, simulations and design”, CORDIS, <http://www.max-centre.eu/project/id/824143> (2020年12月22日アクセス)
 - 16) Z. D. Szotek, “Ab initio (from electronic structure) calculation of complex processes in materials”, Psi-k, <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.434.8016&rep=rep1&type=pdf> (2020年12月22日アクセス)
 - 17) CECAM, “Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire”, CECAM, <https://www.cecam.org/> (2020年12月22日アクセス)
 - 18) CORDIS, “European Materials Modelling Council”, European Commission, <https://cordis.europa.eu/project/id/723867> (2020年12月22日アクセス)
 - 19) 21) EMMC, “The European Materials Modelling Council”, EMMC ASBL, <https://emmc.eu/> (2020年12月22日アクセス)
 - 20) EMMC, “EMMO : an Ontology for Applied Sciences”, The European Materials Modelling Council, <https://emmc.info/emmo-info/> (2020年12月22日アクセス)
 - 21) Materials-Consortia/OPTIMADE, “OPTIMADE v1.0.0”, Materials-Consortia/OPTIMADE, <https://github.com/Materials-Consortia/OPTIMADE/releases/tag/v1.0.0> (2020年12月22日アクセス)
 - 22) aiidateam/aiida-optimade, “OPTIMADE RESTful API implementation for AiiDA”, aiidateam/aiida-optimade, <https://github.com/aiidateam/aiida-optimade> (2020年12月22日アクセス)
 - 23) NOMAD, “NOMAD's OPTiMaDe API implementation”, NOMAD, <https://nomad-lab.eu/prod/rae/optimade/> (2020年12月22日)
 - 24) AFLOW, “Aflow - Automatic - FLOW for Materials Discovery”, Duke Univ., <http://www.aflow.org/> (2020年12月22日アクセス)
 - 25) The Materials API, “The Materials Project”, materialsproject/docs, <https://materialsproject.org/> (2020年12月22日アクセス)

- 26) 材料データプラットフォームセンター「材料データプラットフォームセンター」国立研究開発法人物質・材料研究機構, <https://www.nims.go.jp/research/materials-data-pf/>, (2020年12月22日アクセス)

2.5

俯瞰区分と研究開発領域
物質と機能の設計・制御