

公開版

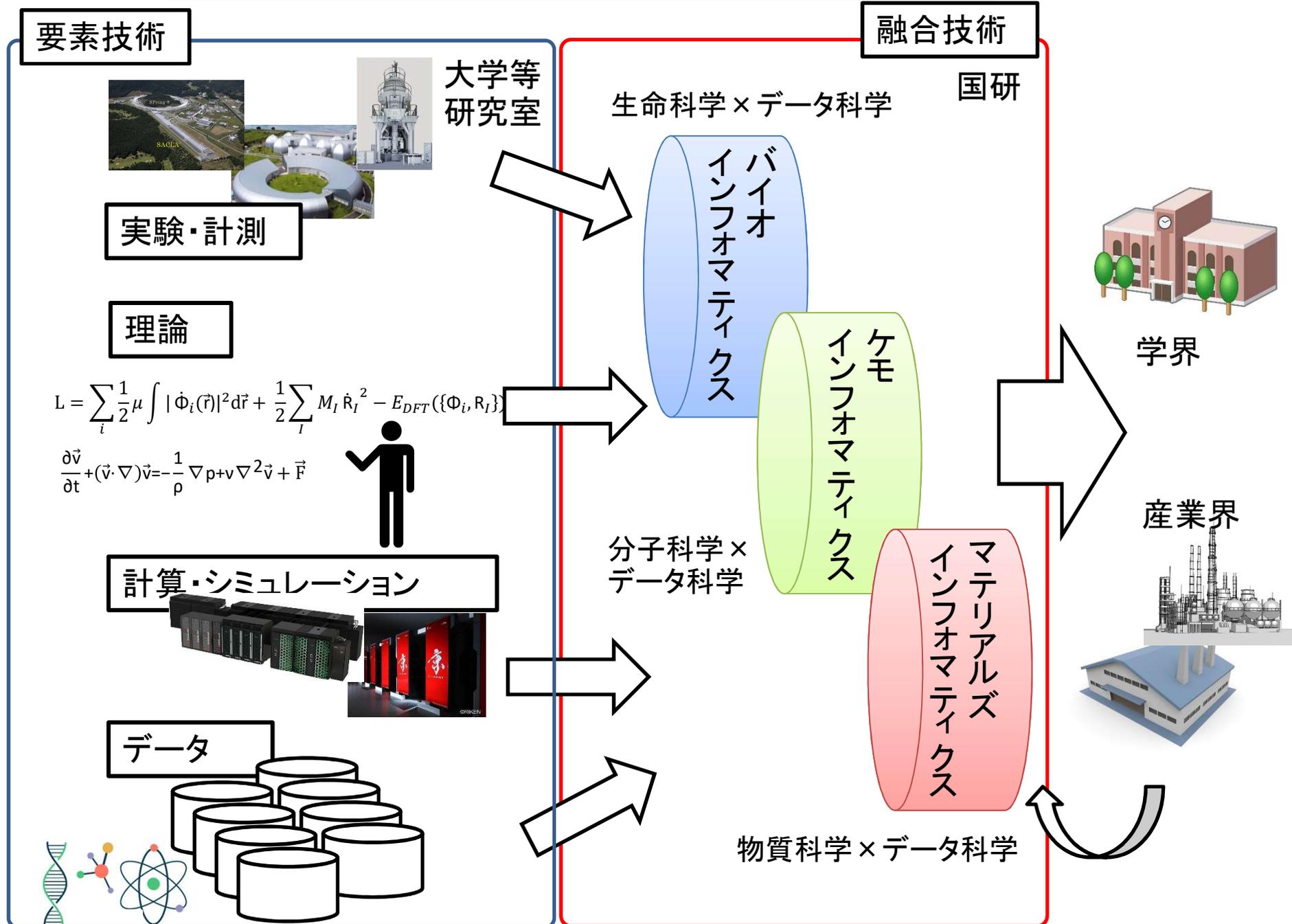
*Mi<sup>2</sup>i*

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

MI<sup>2</sup>I プロジェクトリーダー／NIMS  
伊藤 聡 ITOH.Satoshi@nims.go.jp  
2019年4月24日



# X-インフォマティクス = 既存分野 × データ科学

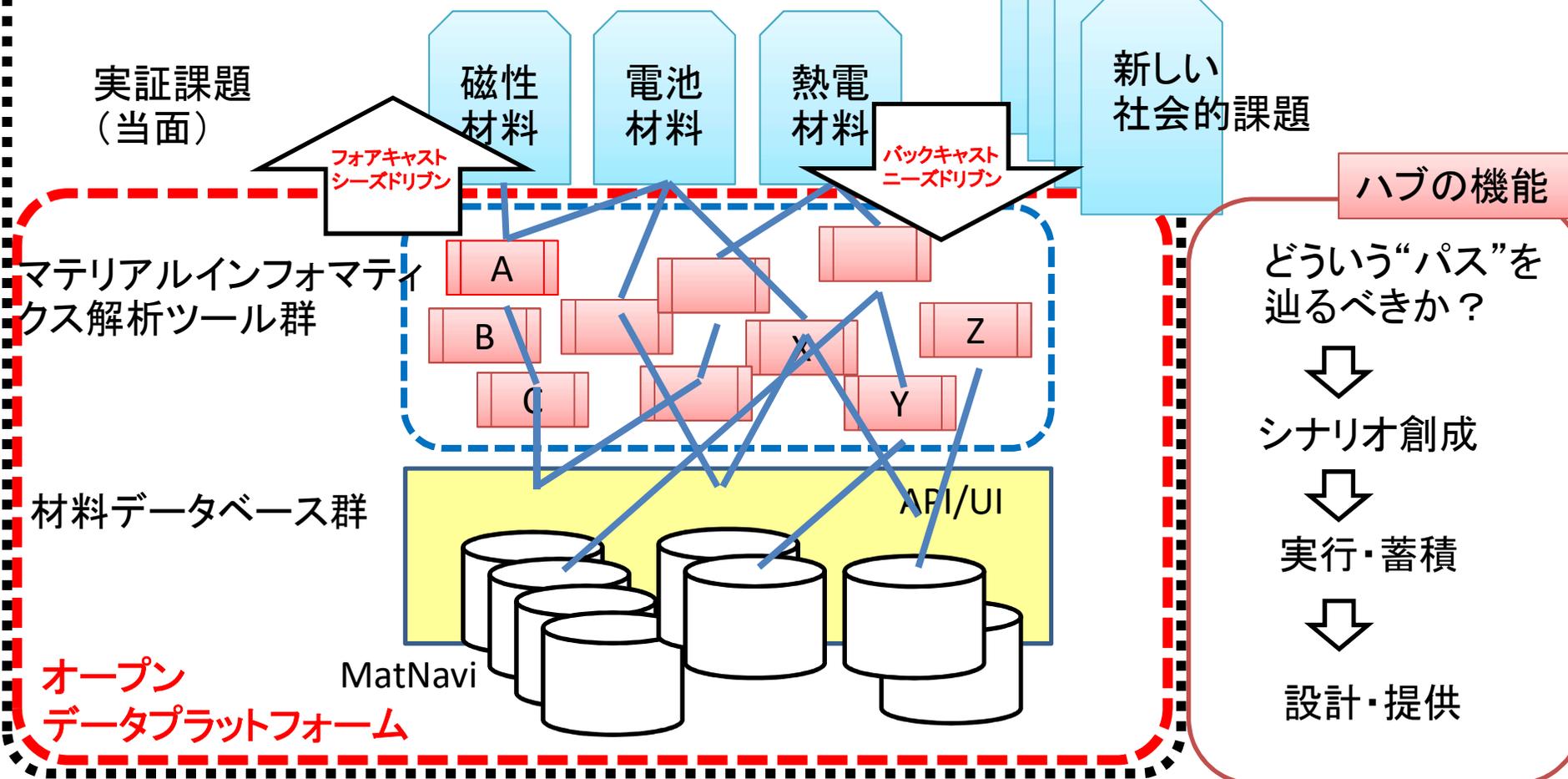


情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

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

プロジェクトリーダー:  
寺倉清之 (2015~2016)、伊藤聡 (2017~)

各社で取り  
組む課題



2015年7月1日～ 物質・材料研究機構をハブ拠点として実施

# イノベーションハブ構築

## 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

### ソフトインフラ

⇒ 人材糾合策: 広い分野の産学のプレーヤが利用しやすい複数の仕組みを実装

#### ◆ ハブ拠点構築に参加(アカデミア中心)

- クロアポ制度の整備・活用
- 招聘研究員制度等の活用
- オープンラボ研究者制度の活用

#### ◆ 共同研究契約の参加(企業中心)

- 共同研究の実施に関する規定」の資金受領型共同研究に準拠
- 組織的大型連携(連携センターなど)

#### ◆ コンソーシアム型の参加(産学ともに)

- ツールとデータを用いたハンズオンセミナー等の実践的活動
- 単なる情報提供のとどまらない研究会などの定期的行事
- NIMSにデータプラットフォーム試用実作業の“場”

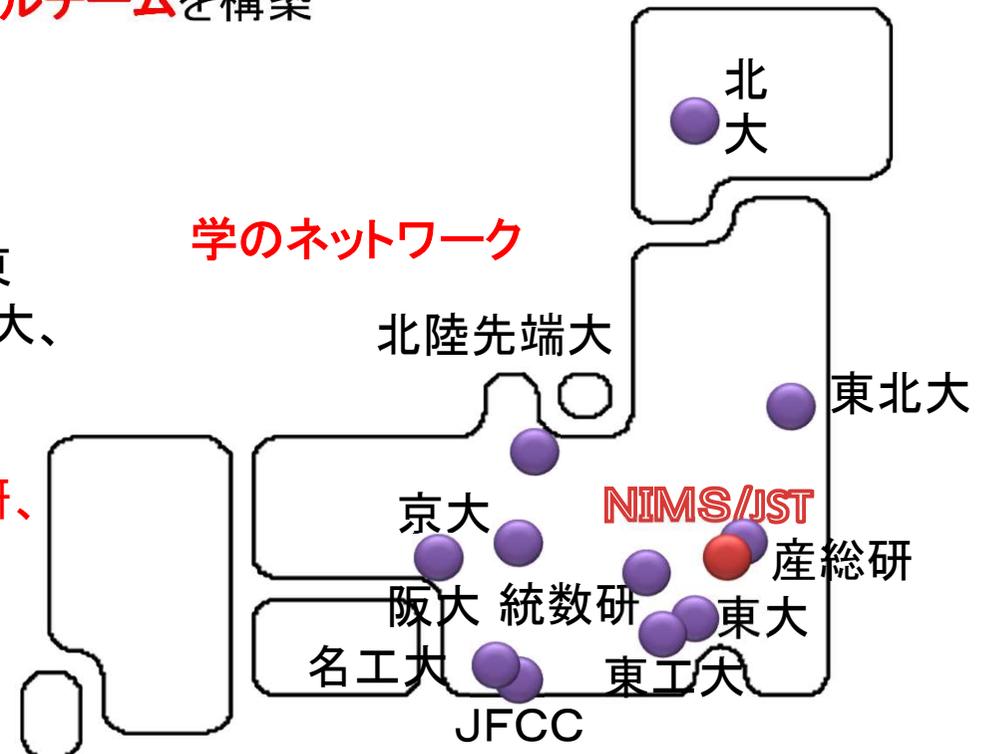
## 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI<sup>2</sup>i: "Materials research by Information Integration" Initiative融合分野開拓のために**クロスファンクショナルチーム**を構築分野間・地域間連携

- ハブ拠点としてのNIMS/JST
- 学のネットワーク・・・統計数理研究所、東北大、東大、東工大、北陸先端大、名工大、京大、阪大、北大、産総研等
- **社会実装サテライト拠点(阪大、名工大)**
- **機関間連携覚書の締結(東北大、統数研、北陸先端大)**

セクター間連携

- 従来型の産官学連携(共研)
- **新しい産官学連携(MI<sup>2</sup>iコンソ)**

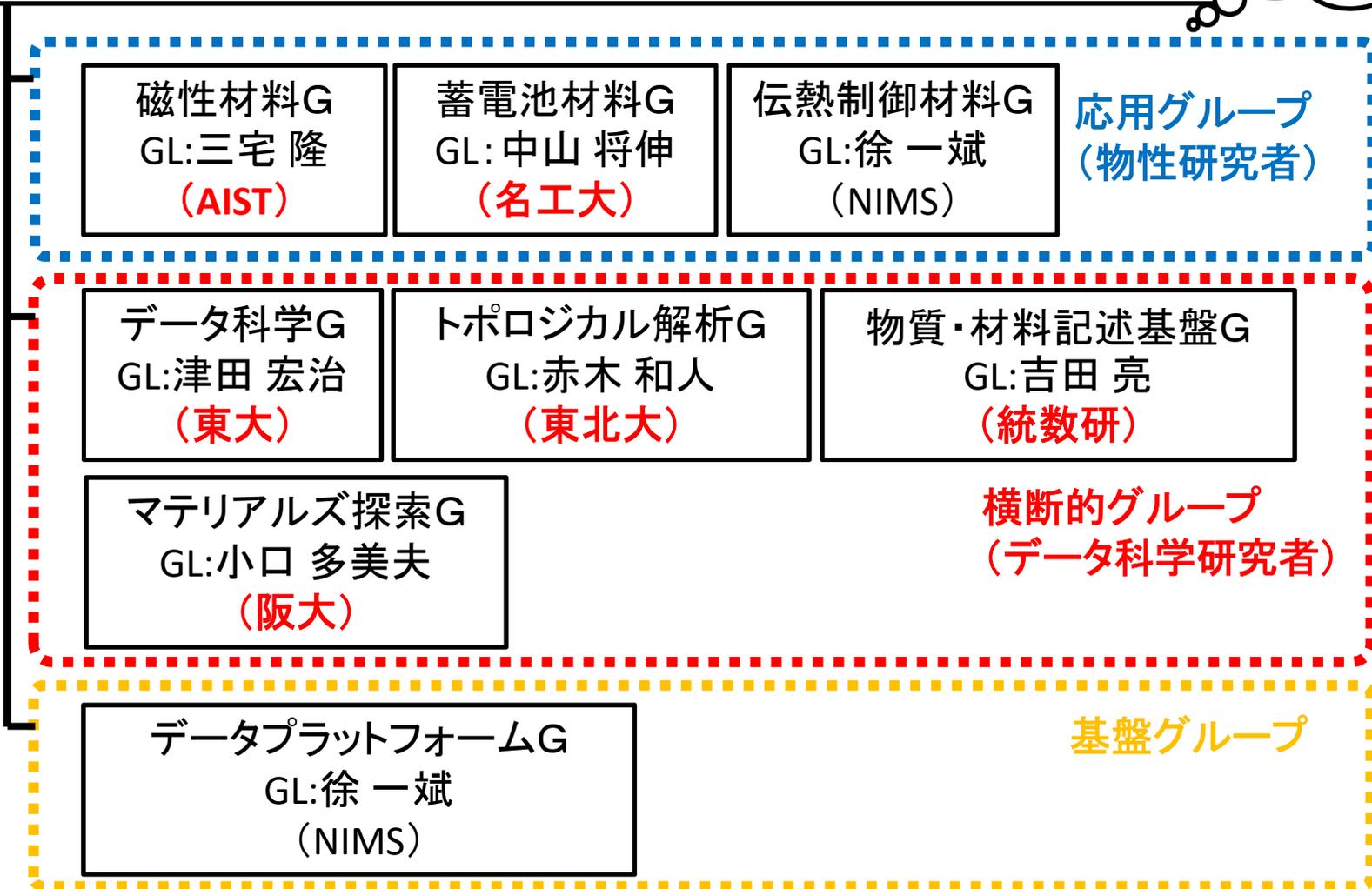


産／企業の参加  
官／自治体との連携(兵庫県)  
知／知的基盤インフラを構成

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

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)

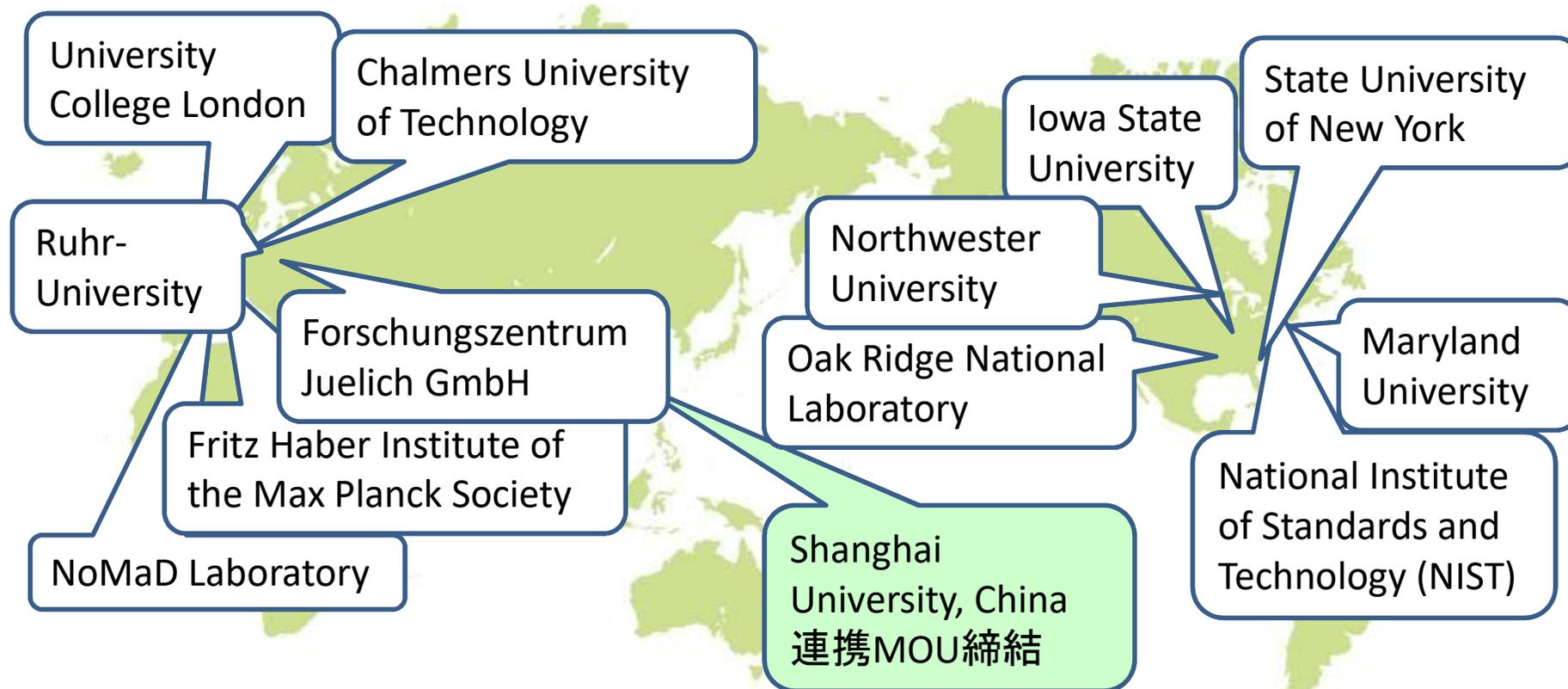


情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

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

海外研究機関との連携

- アドバイザーに招聘
- 研究者の短期滞在・相互交流

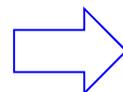


日本のMI推進のセンター機関として  
海外MI関係拠点と交流・連携

## 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

産業界等での数少ない研究者・  
技術者のネットワーク化



- 分野振興
- 持続的発展

MI<sup>2</sup>Iコンソーシアム(2016.6～)

メルティング  
ポット体制

- 材料開発にかかわる研究者・技術者がMIの知識を身につけ、それぞれの研究開発業務に活用
- 材料DBおよびMIツールを試用、使いこなせる実践的スキルの体得
- MI技術を実証・実用化していくための相互活動(情報共有、DPFシステムへのフィードバック、研究開発テーマの探索・提言等)
- MIを推進していく産官学・分野横断型コミュニティーの形成・醸成
- これらの活動の拠点となる『場』がコンソーシアム

法人会員: 82社  
アカデミア会員: 10名  
(2019年1月24日時点)

# 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

## 自治体(兵庫県)との連携

### 兵庫県の科学振興施策

✓ 世界最高性能の大型放射光施設「SPring-8」や国家基幹技術であるX線自由電子レーザー施設「SACLA」を活用した『光科学』と、世界最高水準の演算性能を有する国家基幹技術のスーパーコンピュータ「京」を活用した『計算科学』を中心に、**産業界における新産業・新技術の開発促進とイノベーションの創出に向けた支援**を実施。

播磨科学公園都市【光科学】  
神戸ポートアイランド【計算科学】

大型放射光施設「SPring-8」(H9)  
X線自由電子レーザー施設「SACLA」(H24)

スーパーコンピュータ「京」(H24)

#### 産業利用(共用・専用ビームライン)のフェーズ変化

第1期	第2期	第3期
<b>【SPring-8整備当初～H20(2008)年頃】</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>利用企業による専用ビームライン設置(使いたい時に、使いたいだけ、使いたいように使える) 例:サンビーム、蛋白質構造解析コンソーシアム</li> <li>共用ビームラインとは補完関係(トライアルユースなどによる裾野拡大)</li> </ul>	<b>【H20(2008)年頃～現在】</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>企業と大学等の産学共同研究を機軸として、目的別に専用ビームライン設置 例:FSBL、NEDO(RISINGビームライン)</li> <li>SLIT-J(コウリジョンコンセプト)も同様の形態</li> </ul>	<b>【今後】</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>共用ビームライン、専用ビームラインの枠組み見直し? 新たな利用制度? (今回の中間評価であり方を議論)</li> </ul>

#### 兵庫県の科学振興施策

【パワーユーザーへの利用機軸】

- 産業界への放射光利用の促進
- 共用ビームライン、他のユーザーの展開
- JASRIと連携した国内ユーザー開拓(高分子・コム)

【県内2大研究拠点間の連携】

- スパコン「京」との相互利用(計算科学との融合)
- ポスト「京」との連携検討(情報科学との融合、データ検証・流通基盤の構築)
- マテリアルズ・インフォマティクスの推進
- 放射光利用の新分野の開拓

【SPring-8全体の動きとの協調】

- SPring-8のあり方を踏まえ、どのような役割を担うべきか?  
(県放射光戦略会議による検討)

## これまでの主な沿革

- I SPring-8及び播磨科学公園都市の整備**
  - SPring-8立地決定[H1]:兵庫県用地無償提供
  - 高輝度光科学研究センター設立[H2]:兵庫県出捐
  - SPring-8着工[H3]
  - 県立先端科学技術支援センター開設[H5]
  - 阪神・淡路大震災[H7]
  - SPring-8供用開始[H9]
- II 兵庫県独自の産業利用支援**
  - 兵庫県ビームライン(BL24XU)設置[H10]
  - ニュースバル供用開始[H12]
  - 地域結集型共同研究事業「ナノ粒子コンポジット材料の基盤開発」(JST委託事業)[H16～20]
  - 兵庫県ビームライン(BL08B2)設置[H17]
  - 兵庫県放射光ナノテク研究所開設[H20]
- III 実験科学と計算・情報科学の融合の促進**
  - SACLA供用開始[H24]
  - スーパーコンピュータ「京」共用開始[H24]
  - ポスト「京」の神戸への立地決定[H26]
  - NIMS(MI<sup>2</sup>i)との連携・協力の覚書締結[H28]
  - 兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス研究会の立ち上げ[H30]

兵庫県科学情報局 局長 落合正晴氏  
 文部科学省 大型放射光施設(SPring-8)及びX線自由電子レーザー施設(SACLA)中間評価(第4回)  
 科学技術・学術審議会 量子ビーム利用推進小委員会(第26回)

## 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

### ハードインフラ

⇒ データプラットフォーム(プロトタイプ)構築・運用  
セキュア環境と利便性・アクセシビリティの確保

#### ◆ PCクラスタシステム

- さまざまな利用形態に対応できる柔軟なPCクラスタシステムを構築

#### ◆ データベースシステム

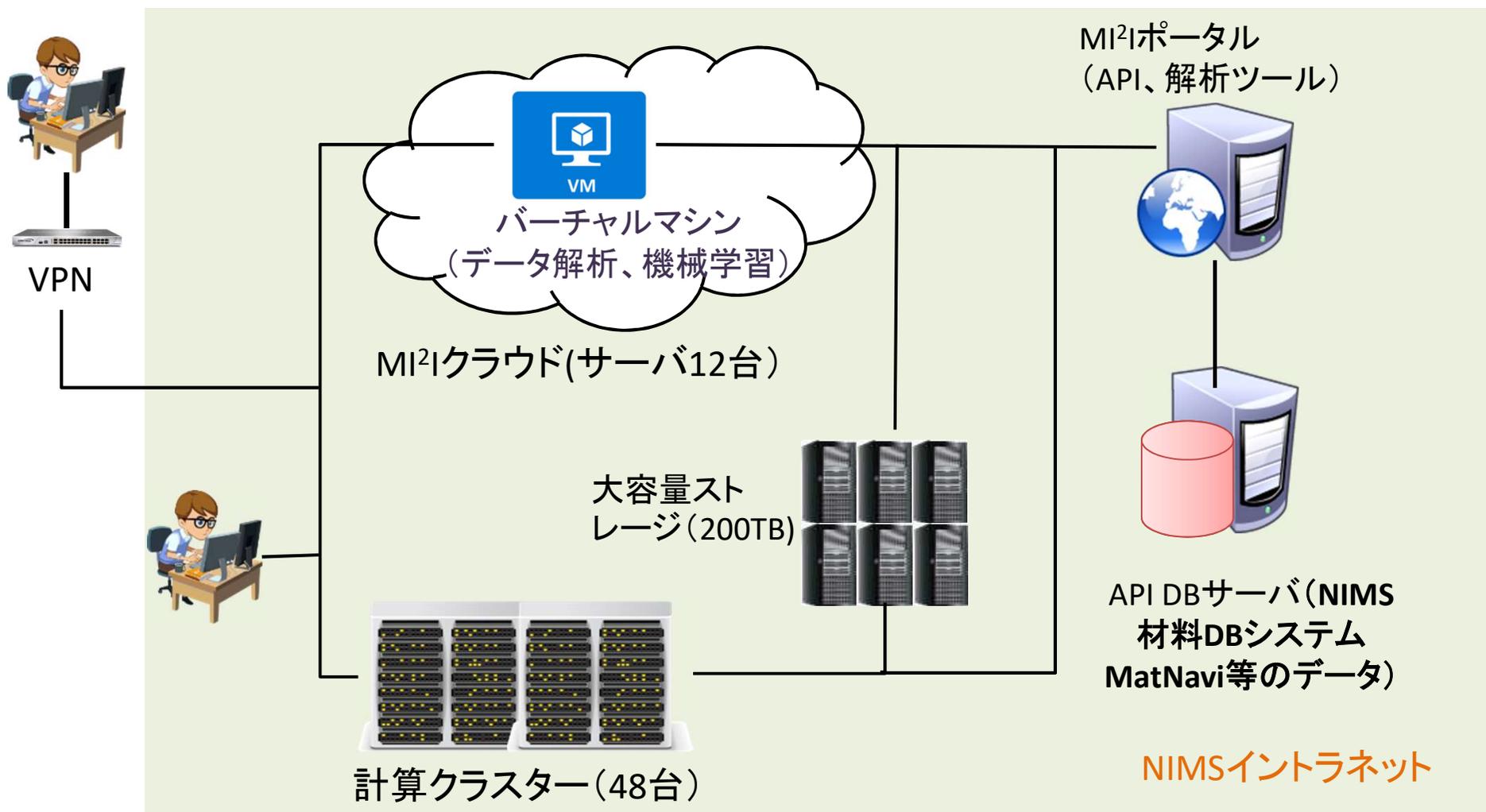
- 無機材料データベースAtomWorkAdv等の各種データベースを整備し、ソフトウェア(解析ツール)とのインターフェースシステム(API)を開発・運用

#### ◆ セキュリティネットワークシステム

- MI<sup>2</sup>I参加者、コンソーシアム会員が利便性良くかつ安全にアクセスできるセキュアなネットワークを構築

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



## 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

## 社会実装・アウトリーチ

## フォーラム(2回/年)

- ・ 一般向け
- ・ 成果・動向の概要講演

## チュートリアル(2回/2018年)

- ・ 研究者・技術者向け
- ・ データ科学的手法の入門(座学)
- ・ 九州大学(AIMaP)共催

## ハンズオンセミナー(10回/2018年)

- ・ 研究者・技術者向け

## コンソーシアム(4回/2018年度)

- ・ おもに産業界の技術者向け
- ・ 会員制(会費無料)
- ・ DPF試用(実践)

## 兵庫県マテリアルズインフォマティクス研究会

- ・ SPring-8兵庫県ビームライン利用企業など

広く関心のある方へ

MI技術を活用したい/  
している人へ活動の場(含サテライト  
拠点活動)

- ・ NIMS/JST
- ・ 東京地区
- ・ 中京地区
- ・ 大阪地区
- ・ 北陸地区
- ・ ...

MI<sup>2</sup>iデータプラット フォーム  
(2017/1~)  
(PCクラスタ、材料DB等)

# 研究事例ハイライト

百の論より一つの証拠  
～ 手法の実験的検証

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

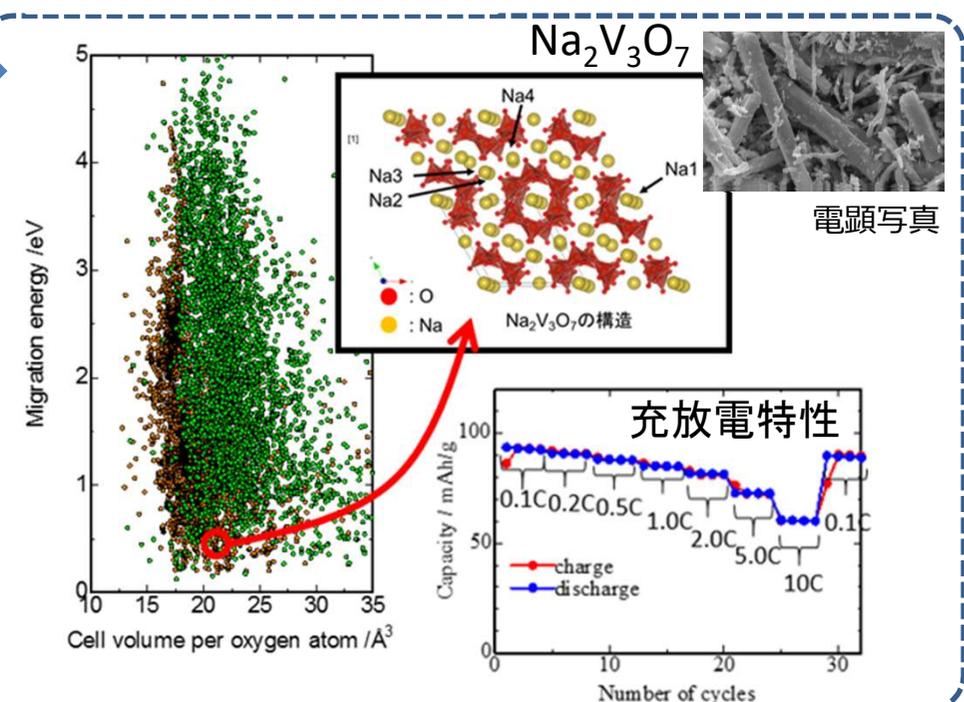
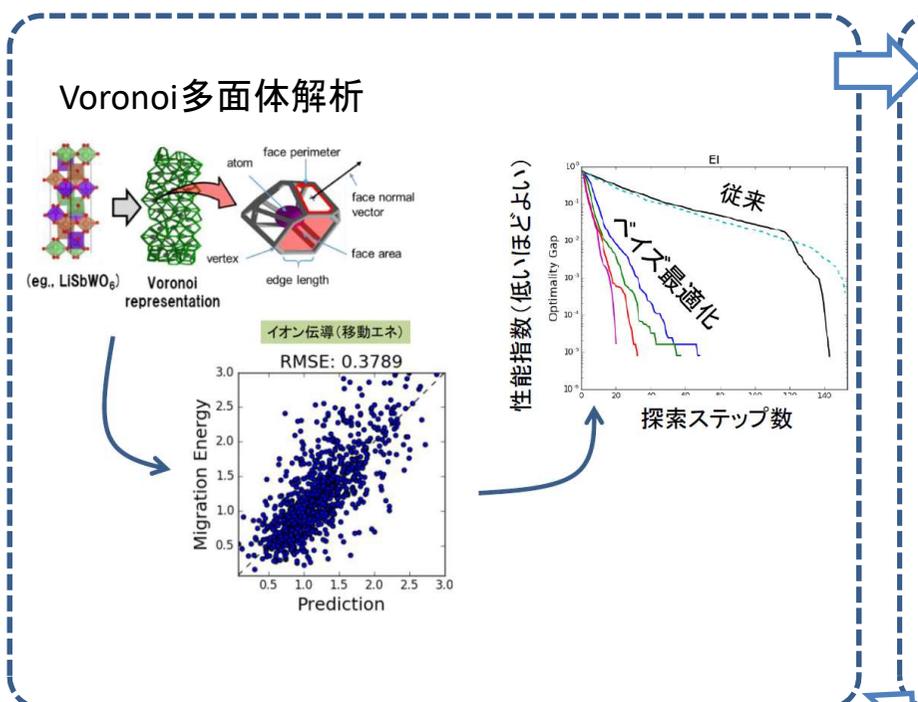
MI<sup>2</sup>I: "Materials research by Information Integration" Initiative

自動探索によるナトリウムイオン電池向け新規正極材設計開発



最適記述子設計

正極材探索と検証



高速分子動力学シミュレーター (NAP)



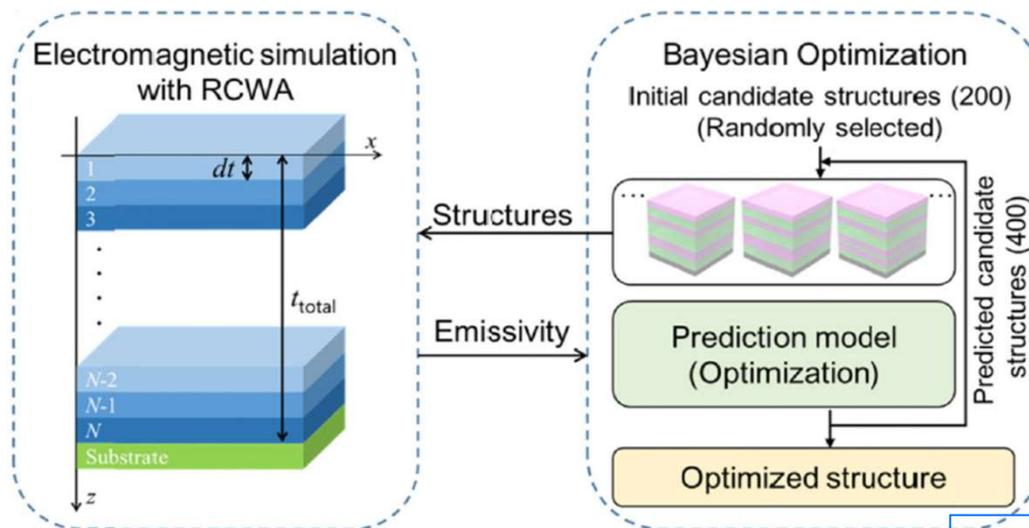
5000候補物質からスクリーニングし、  
試作セルで検証

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

ベイズ最適化による波長制御熱輻射多層膜材料設計開発

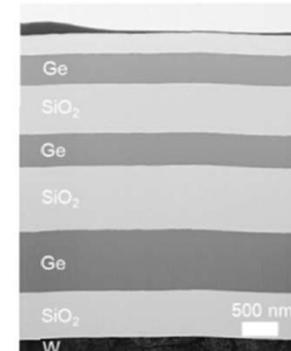
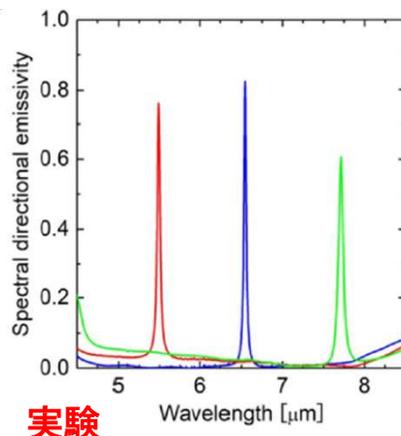
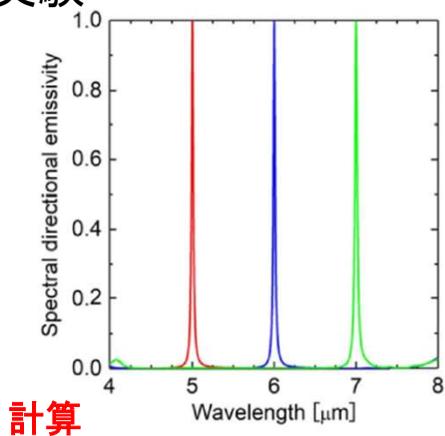
スカイラジエータ



全探索(80億通り)  
の2%程度で最適解

汎用ベイズ最適化ライブラリ(COMBO: Common Bayesian Optimization)

実証実験



NIMS招聘研究員津田宏治  
(東京大学)ら

機械学習による設計  
結果を**実験的**に検証

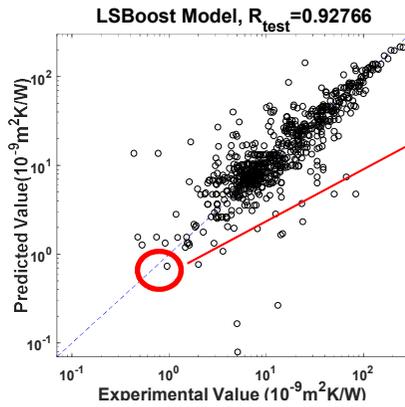
作成したGe-SiO<sub>2</sub>多層膜  
(電顕写真)

NIMS特別研究員塩見淳一郎(東京大学)ら

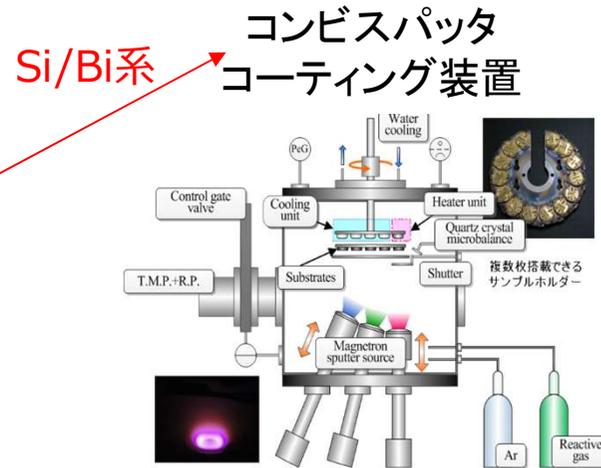
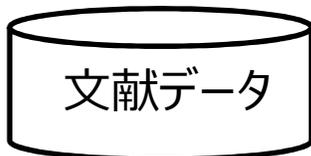
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

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

機械学習による低熱伝導性無機複合材料設計開発

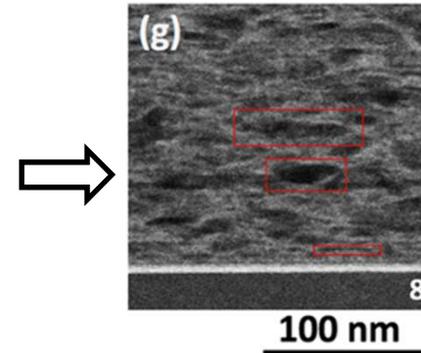


界面熱抵抗の機械学習モデル構築 (LSBoost)

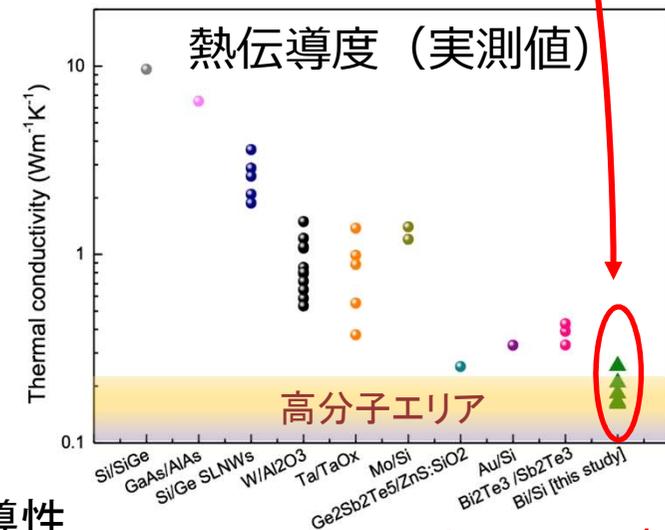


選択した複合材料をナノレベル制御合成

高分子並みの低熱伝導性無機ナノコンポジットを合成



作成したSi/Biナノコンポジット材料(電顕写真)



$\lambda = 0.16 \text{ W/Km}$

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

機械学習による高熱伝導性高分子材料設計開発

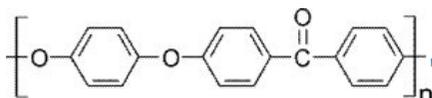


ベイズ推定を用いた逆定量的構造特性相関  $P(S|Y \in U)$  (候補分子の作成)

分子構造(S)

記述子( $\phi$ )

特性(Y)



01000100000011010011

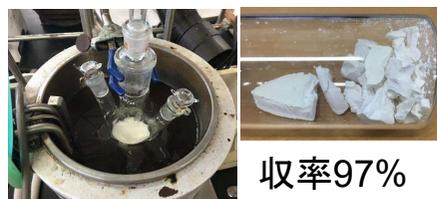
定量的構造特性相関  $P(Y|S)$  (学習モデルの作成)

候補分子 (フィルタリング1: 液晶分子らしさ)

 ID: 1 Precision Tg (C): 188.854 Precision Tm (C): 203.693	 ID: 2 Precision Tg (C): 46.954 Precision Tm (C): 14.833	 ID: 3 Precision Tg (C): 25.44 Precision Tm (C): 11.859	 ID: 4 Precision Tg (C): 279.248 Precision Tm (C): 197.482	 ID: 5 Precision Tg (C): 44.938 Precision Tm (C): 46.832
 ID: 6 Precision Tg (C): 64.852 Precision Tm (C): 79.209	 ID: 7 Precision Tg (C): 44.176 Precision Tm (C): 179.724	 ID: 8 Precision Tg (C): 79.642 Precision Tm (C): 166.961	 ID: 9 Precision Tg (C): 41.921 Precision Tm (C): 182.42	 ID: 10 Precision Tg (C): 142.723 Precision Tm (C): 204.839
 ID: 11 Precision Tg (C): 81.757 Precision Tm (C): 141.187	 ID: 12 Precision Tg (C): 100.959 Precision Tm (C): 248.472	 ID: 13 Precision Tg (C): 203.199 Precision Tm (C): 139.89	 ID: 14 Precision Tg (C): 14.292 Precision Tm (C): 215.579	 ID: 15 Precision Tg (C): 251.091 Precision Tm (C): 273.522
 ID: 16 Precision Tg (C): 221.04 Precision Tm (C): 92.044	 ID: 17 Precision Tg (C): 70.174 Precision Tm (C): 133.814	 ID: 18 Precision Tg (C): 147.236 Precision Tm (C): 262.219	 ID: 19 Precision Tg (C): 128.939 Precision Tm (C): 168.291	 ID: 20 Precision Tg (C): 91.661 Precision Tm (C): 174.717

フィルタリング2: 合成しやすさ  
有機化学のルールベース

↓ 新規高分子



収率97%  
 $\lambda=0.4$  W/Km

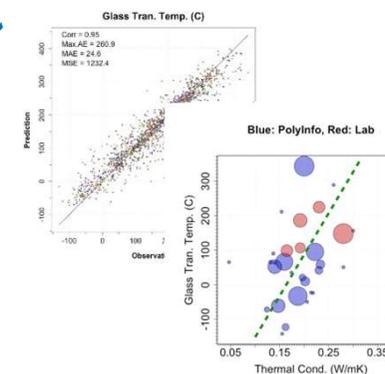
深層学習  
正則化法  
サポートベクターマシン等

×  
転移学習

- ガラス転移温度
- 融点

- 熱伝導率
- 熱容量

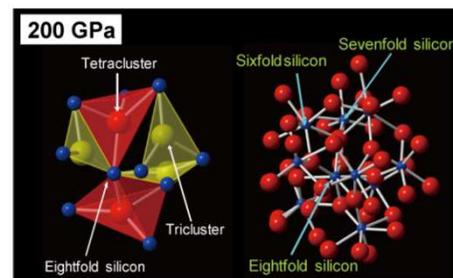
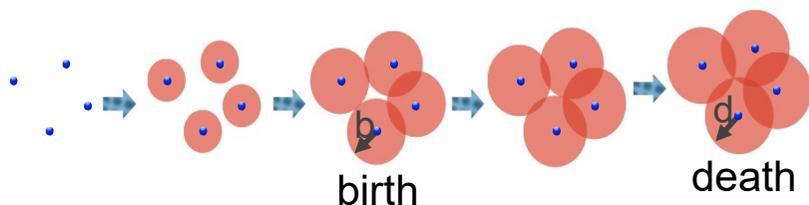
データ数が非常に少ない



情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

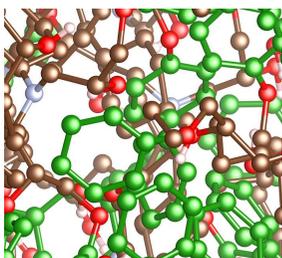
MI<sup>2</sup>i: "Materials research by Information Integration" Initiative

離散幾何学による物質の特徴付け ~ 高圧下での新規ガラス構造の発見

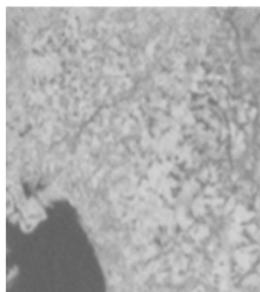


放射光 / JPARC

NIMS主幹研究員 小原真司ら

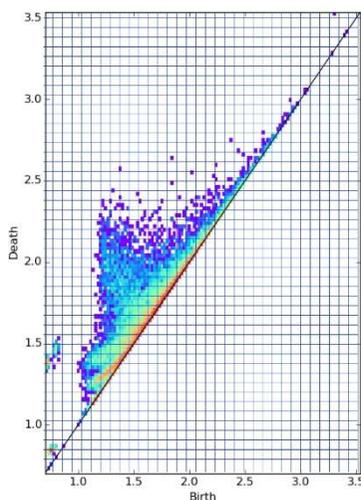


原子配列データ



顕微画像データ

パーシステント図  
2次元データへの変換



ベクトル化した記述子

□ □ □ □ □ □ ..... □ □ system 1

□ □ □ □ □ □ ..... □ □ system 2

□ □ □ □ □ □ ..... □ □ system N

種々の機械学習を適用

順方向 (右) : 隠れた秩序への気づき、階層構造の取り出し  
逆方向 (左) : 粗視化モデルの生成、物理的な意味の理解

## 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

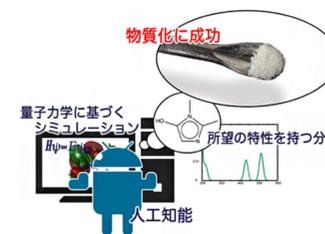
MI<sup>2</sup>i: "Materials research by Information Integration" Initiative

## ■ 他のプレス発表（アカデミア）

## ● AIによる有機分子の設計とその実験的検証に成功

ー有機エレクトロニクスなど機能性分子の設計に道筋ー

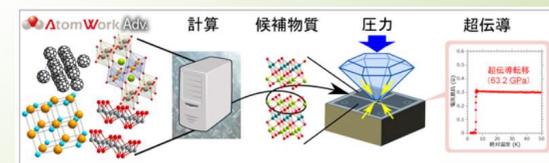
(理研・NIMS・東大・JST 2018/8) …報道 3件（鉄鋼、日刊産業、日刊工業）



## ● データ科学主導で超伝導が発現する物質を高効率で探索

ー圧力下で発現する新しい超伝導物質を発見ー

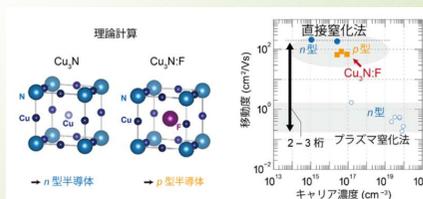
(愛媛大学・NIMS 2018/8) …報道 3件（日刊産業面、化学工業日報、日刊工業）



## ● ありふれた元素で高性能な窒化物半導体を開発

ー第一原理計算に基づいた有効なキャリアドーピング法との組み合わせー

(東工大・NIMS 2018/6) …報道 4件（鉄鋼、日刊産業、日刊工業、化学工業日報）

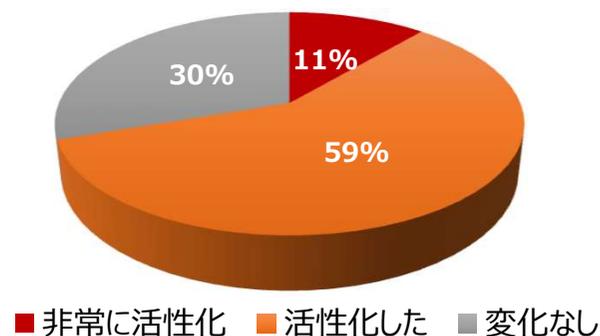
MIによる新しい材料創生  
の手法実証へ

## 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

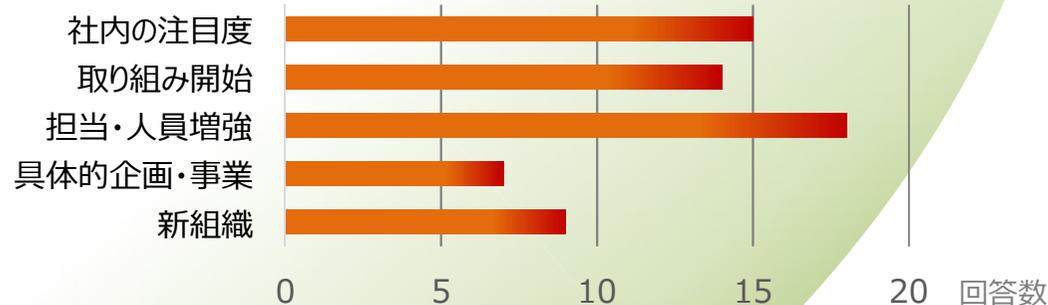
MI<sup>2</sup>I: "Materials research by Information Integration" Initiative

### ■ 産業界：コンソーシアム参加会員のアンケート調査

MI<sup>2</sup>Iコンソーシアム入会後のMI関係の社内変化：入会后、会員企業の2/3で活性化感有



具体的社内変化状況



### ■ 報道に見る産業界のMI展開例

- ・「材料開発ソリューション」を提供開始（日立製作所 2017/10）
- ・MIの社内導入加速（旭化成 2018/3）
- ・MIをタイヤゴム充填剤開発に適用（横浜ゴム 2018/3）
- ・高誘電材料を理論計算で設計（JFCC・TDK 2018/4）
- ・ベイズ最適化による全固体電池の材料探索（トヨタ・NIMS 2018/6）

産業応用への様々な取り組みが始まっている

## 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短期間でハブ構築・コミュニティ形成・研究事例創出が可能であった理由

- 幅広い産官学の人材糾合の仕組み
- イノベーションを予感させる研究テーマの設定
- 人材育成にもつながるアウトリーチ活動の充実

仕組みは重要だが、  
人の力が本質

ではありません！

一番の貢献は **プロジェクトリーダーの力**



開始時のプロジェクトリーダー  
寺倉清之 物性理論の第一人者

- 全国を行脚して同志を集める
- 安易に走らない学理の追及



副プロジェクトリーダー 真鍋明  
企業における材料開発の専門家

- 製造業でのイノベーション実践

# 持続可能なハブ拠点



## 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

## 第一期(2015~2017)

JSTイノベハブ事業

- ◆ データプラットフォームの開発・整備
- ◆ 応用3課題における成功事例の雛形創出
- ◆ 利用環境(ICT環境、権利関係等を含めて)の整備・試行
- ◆ スクール・講習会等の開催

## 第二期(2018~2019)

- ◆ データプラットフォームの試行
- ◆ 応用3課題での成功事例の提示
- ◆ 新規応用課題の実施
- ◆ 社会実装サテライトの試行的に運用
- ◆ スクール・講習会の充実と相談システム(シナリオ作成機能)の試行

## 第三期(2020~)

機関事業

- ◆ データプラットフォームの本格運用
- ◆ 材料開発ソリューションの『場』の提供



パブリックサイエンスサービスステーション(場)の実現

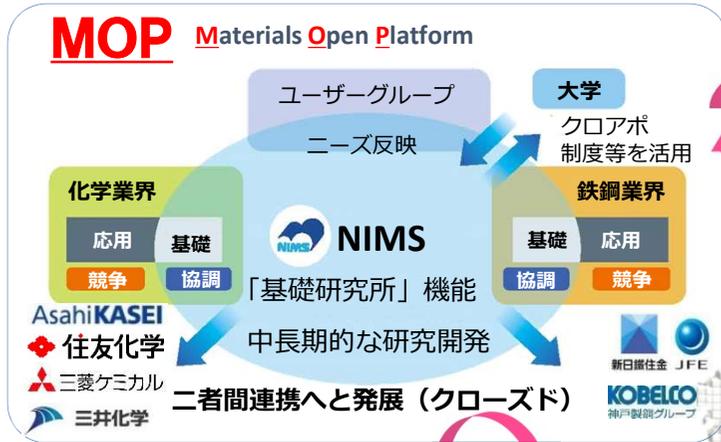


# NIMSの革新的材料開発力強化M<sup>3</sup> (M-cube) プログラム

ナノテク・材料分野においてイノベーションの創出を強力に推進するため、基礎研究と産業界のニーズの融合による未来を見据えた非連続な革新的材料創出の場や、世界の研究機関や企業の研究者が集うグローバル拠点、全国の物質・材料開発のネットワーク化/最先端計測・データ基盤整備による知見の集約・提供・提案を行う機能を構築する。

産業界、研究機関による **オープンイノベーション** を推進

世界中の人・モノ・資金が集まる **国際研究拠点** を構築



新たな物質・材料開発力の強化

MOP, MGCを最大限活かす **世界最高水準の研究基盤** を整備

グローバルなネットワーク構築により  
日本の材料開発力を牽引



# 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

国の共用設備

- スパコン(京)
- 放射光
- ナノテクPF

各種テストベッドとしてのMI<sup>2</sup>i-DPF

- MI研究実践の場

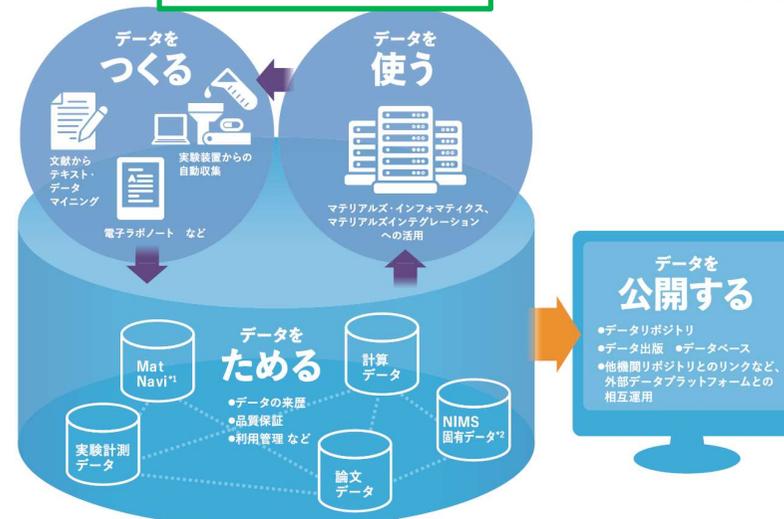
MI<sup>2</sup>i-DPF



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 <sup>\*2</sup> 事故調査記録データ、研究者プロフィールデータなど

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

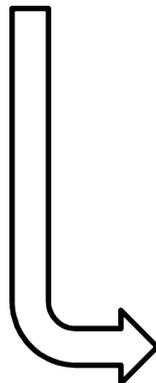
コミュニティ機能

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)



「分かる人」によるコンソーシアム活動

- MI<sup>2</sup>Iコンソーシアム2.0(仮称)

「分かる人」になるためのコミュニティー活動

- 日本学術振興会産学協力研究委員会
- 各種学協会マテリアルズインフォマティクス分科会



産学共同体  
への展開



対象者に合わせた  
スクール・普及促進



# MI<sup>2</sup>イノベーションHubにおける組織運営体制整備

## 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



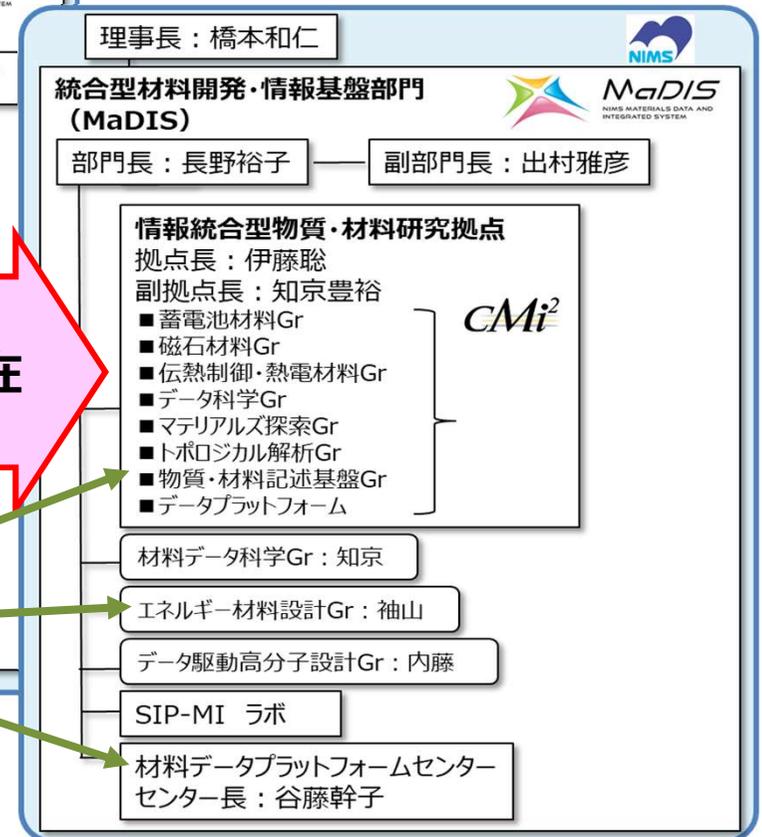
## 2017年度MaDIS設置

・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



Mi<sup>2</sup> 2015~18年度⇒現在

### PJ参加機関間の人材異動

⇒NIMS定年制へ (5名)

⇒NIMS外企業へ (1名)



# ハブ拠点活動を超えて

Something of everything…  
～国分寺構想

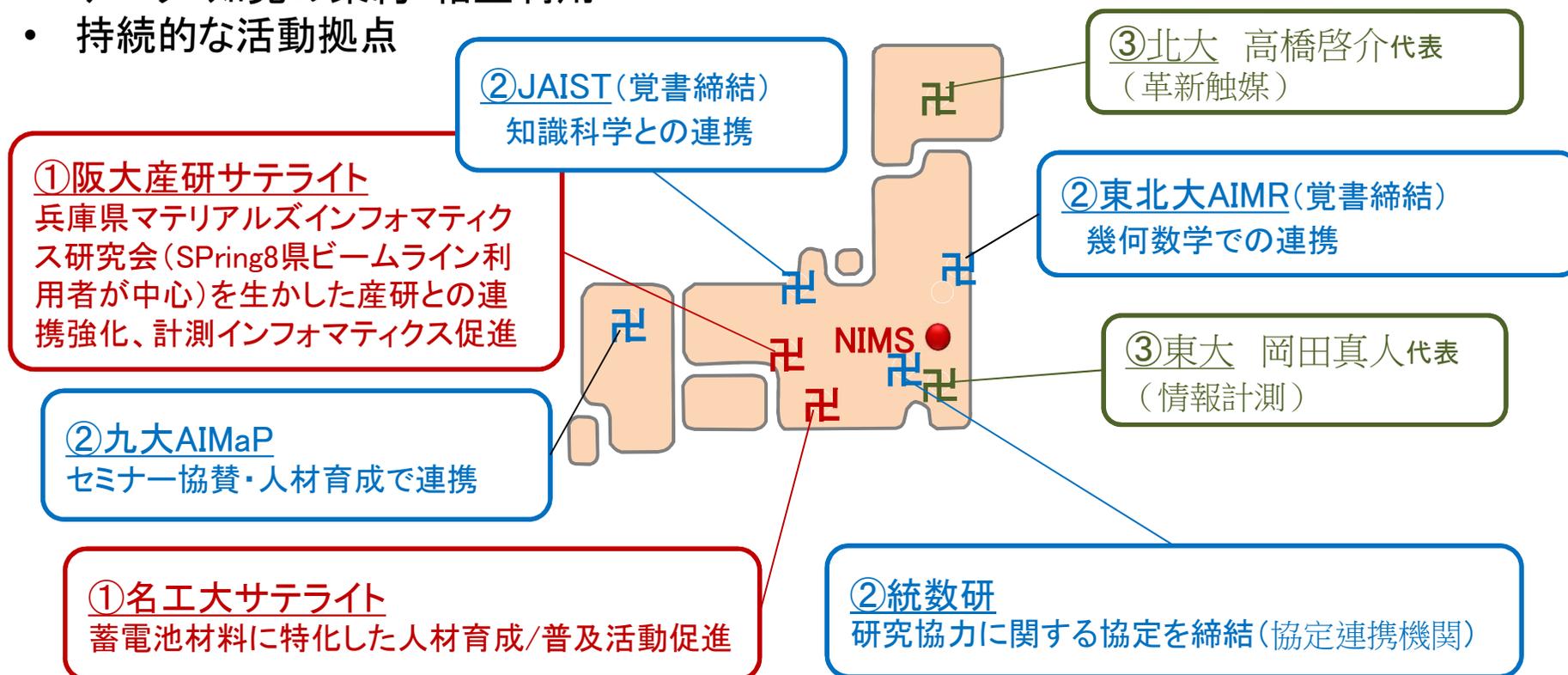
## ハブ拠点機能の全国展開：国分寺方式

- 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 数理科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)



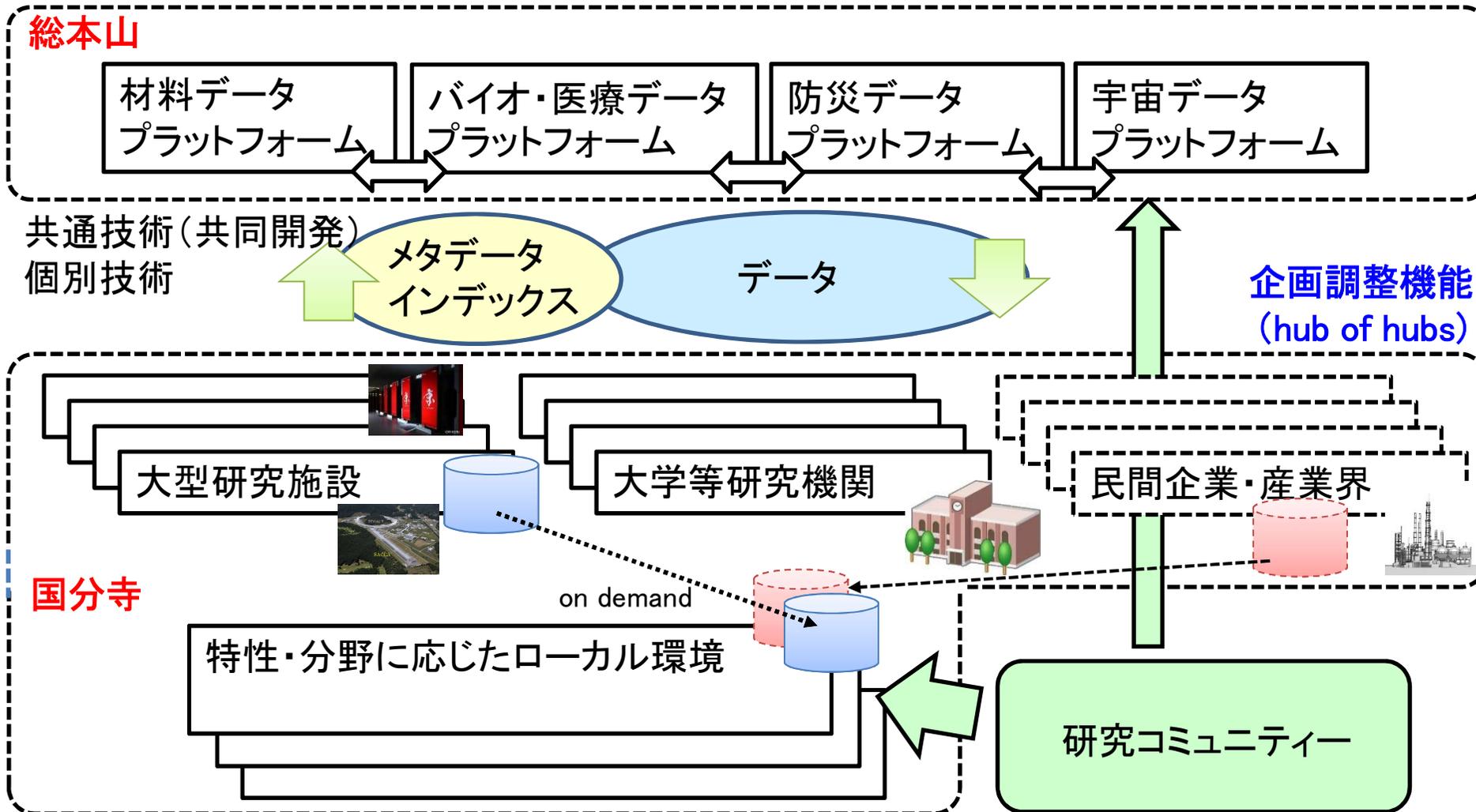
国分寺では、**それぞれの特性を生かして**

- 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



**MaDIS**  
NIMS MATERIALS DATA and  
INTEGRATED SYSTEM

*Mi<sup>2</sup>i*

**ご清聴ありがとうございました**

