

（プロジェクト実施期間：平成27～31年度）

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）
物質・材料研究機構

<課題の概要>

物質・材料研究を第4の科学である情報統合型へと変革させる潮流が起きている。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。このため導入を検討する企業は多いが、膨大なデータ群の蓄積、高度なデータ科学の取込み等、大胆な新手法構築が必要であり、導入に踏切れない状態にある。

そこで、物質・材料研究の中核的機関であるNIMSをハブとして、産学官の人材を糾合し、データベースの構築、データ科学との融合を進展させると共に、より広範な企業の参画を促し、画期的な磁石・電池・伝熱制御等の新材料設計の実装を目指す。

(1) 総合評価

A：着実な進捗があり、十分なイノベーションハブの構築が期待できる

(2) 個別評価

ア．イノベーションハブの構築及び法人のシステム改革の状況・・・a

- ・ハブ構築に向け、COE機能、データプラットフォーム機能、スクール機能という3つの目標を掲げ、参加者全体にハブ構築の概念を共有し、橋本理事長のM³構想に寄与した点は、高く評価できる。
- ・今年の4月より橋本理事長のトップマネジメントによるM³の中に、他の大型プロジェクトであるSIP革新的構造材料、MOP等のマテリアルズ・インフォマティクス（MI）機能を横串に指すM^aD^ISに再編され、イノベーションハブ活動が機構全体と協調できる組織運営体制が整備された点は特筆すべき取り組みと評価できる。
- ・本構想は、2013年からJST・CRDSやCOCNと連携して構想してきており、前PL寺倉先生の研究者ネットワークを活用して、大学・研究機関に所属するデータ科学領域の物質材料の有力研究者を本プロジェクトに遍く取り込めた点、人材糾合は順調に進んでいる。企業で活躍する研究者の取り込みがやや弱いので、この点を改善できると、さらに望ましい状況を生み出せるのではないかと。
- ・企業の研究者を取り込むためにも、データプラットフォームの利便性・有効性を上げることが重要ではないかと。
- ・スクール機能は質量ともに非常に高く、計画以上の参加者を集客している点、高く評価できる。

イ．研究開発の状況・・・a

- ・研究成果については、東工大細野、NIMS・東工大大場、NIMS・京大田中による『新規の赤色発光材料の発見と合成』、NIMS・東大塩見による『機械学習を用いた伝熱材料のナノレベルの構造最

適設計』、NIMS・東北大平岡による『パーシステントホモロジー』等が創出され、更にMI研究開発の基盤的なソフトウェア、COMBO（NIMS・東大津田）、i q s p r（NIMS・統数研吉田）が生み出され、拠点研究者等に広く活用されている点、計画以上に成果が上がっていると評価する。

- ・JSTのさきがけ、CRESTにマテリアルズ・インフォマティクスの領域が新規に設定されたこともあり、多くの競争的資金が獲得されている。
- ・コンソーシアム活動については、51社、167名の参加や、有力企業によるWGの立ち上げなど、順調に進んでいる。

ウ. 今後の見込み・・・a

- ・ハブ構築の3本柱のうち、COE機能、スクール機能については発展・継続が期待できる。
- ・しかし、データプラットフォーム機能については進捗が見られるが、ユーザーの利便性に改善の余地が見られる。課題を直視し、その解決に向けてしっかり取り組んで頂きたい。

(3) 評価結果

総合評価	ア) イノベーションハブの構築 及び 法人のシステム改革の状況	イ) 研究開発の状況	ウ) 今後の見込み
A	a	a	a

以上