

さがけ研究領域

「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」

事後評価資料

2021年 3月

研究統括 常行真司



科学技術振興機構

戦略研究推進部 ICTグループ

戦略目標

- ①多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製
- ②情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製
- ③分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理的手法の創出・高度化・体系化
- ④環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築



常行真司 研究総括
(東京大学
大学院理学系研究科 教授)

本領域の取り組み

先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤構築

実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合を強力に推進し、それぞれの手法の強みを活かしつつ相互に得られた知見を活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤を構築する。

牽引役となる世界レベルの若手研究リーダーの輩出

先進的マテリアルズインフォマティクスを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出を目指す。

具体的な研究対象一覧

- ① 社会的・産業的に要求される機能を実現する新物質・材料の発見の促進、設計指針の構築
- ② 大規模・複雑データから構造・物性相関や物理法則を帰納的に解明する手法の開発とそれを用いた新材料の探索・設計
- ③ 未知物質の物性を高精度に予測し、合成・評価の実験計画に資する候補物質を高速・大量にスクリーニングする手法の構築
- ④ 多種多様な物質データを包括的に整理・記述・可視化する新しい物理的概念や方法論の構築
- ⑤ データ科学と物質・材料科学の連携・融合に資する物性データ取得・蓄積・管理手法の開発、データベースの整備、各種計算・解析ツールの構築

研究の推進方法

- 情報技術分野の研究者と物質・材料科学の研究者と連携する
- 諸分野の研究者が情報技術分野に参入する
- 様々な分野の研究者が相互に触発しながらシナジー効果を得る体制を整える
- エネルギー、医療、素材、化学など多くの産業応用に資する物質・材料の設計を劇的に加速しうる先駆的・革新的な研究を推進する



物質・材料科学にパラダイムシフトを起こすことを目指す

提案募集する研究テーマ

募集においては、「マテリアルズインフォマティクス」という分野は、当時はまだ一般的ではなかったため、以下のように研究領域について求められる研究テーマの具体例を示すことで、多岐の研究分野にわたるよう多くの応募を促した

1. 新物質発見の促進、 設計指針の構築

機械学習による物性予測の高精度化・高速化、未知の候補物質、反応経路の網羅的探索、設計に有用な記述子の抽出、設計指針に資する新概念

2. 大規模データからの相関・ 法則の帰納的解明

構造-物性相関、構造-活性相関、背後にある物理法則の推定

3. 候補物質の高速・ 大量スクリーニング

未知物質の物性の高精度予測、合成・評価の実験計画に資する候補物質を高速大量スクリーニング

4. 物質・材料データの 包括的記述

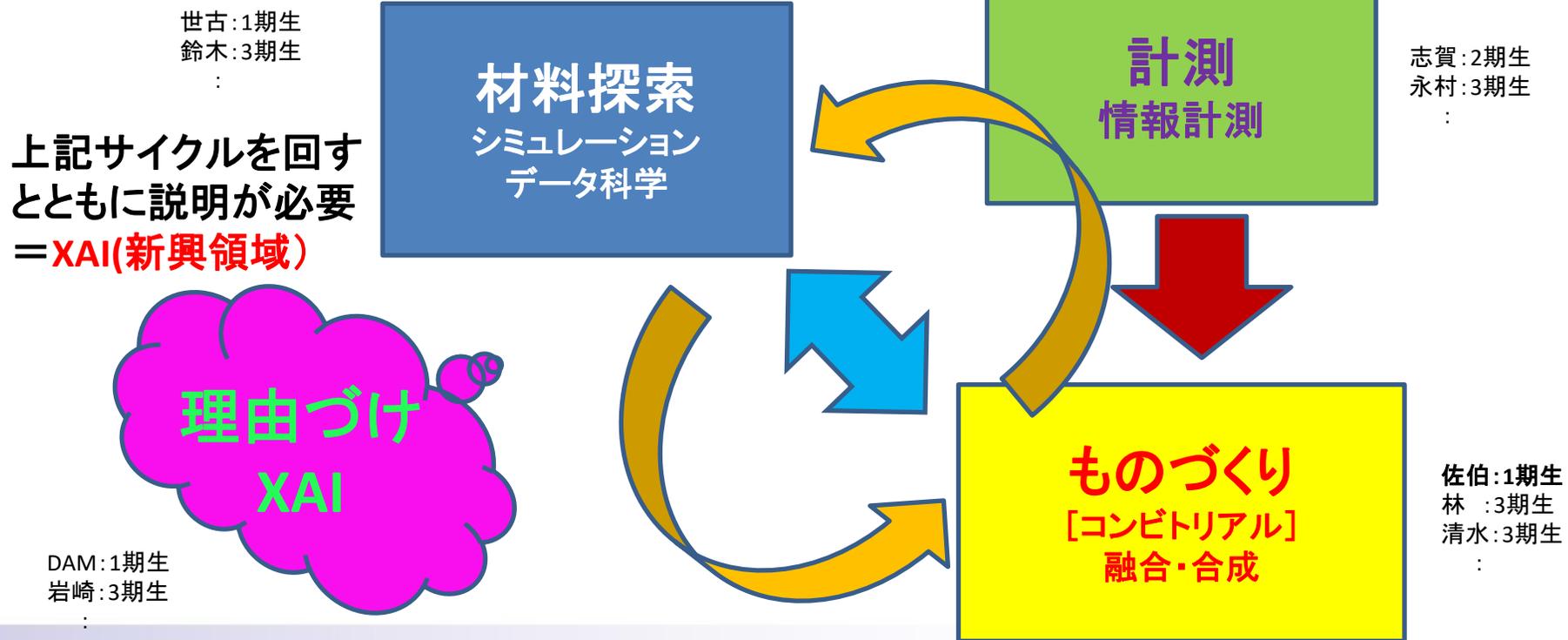
各種測定データの管理・共有の方法論、多次元データの解析・可視化

5. データ取得・蓄積・管理手法、 計算・解析ツール

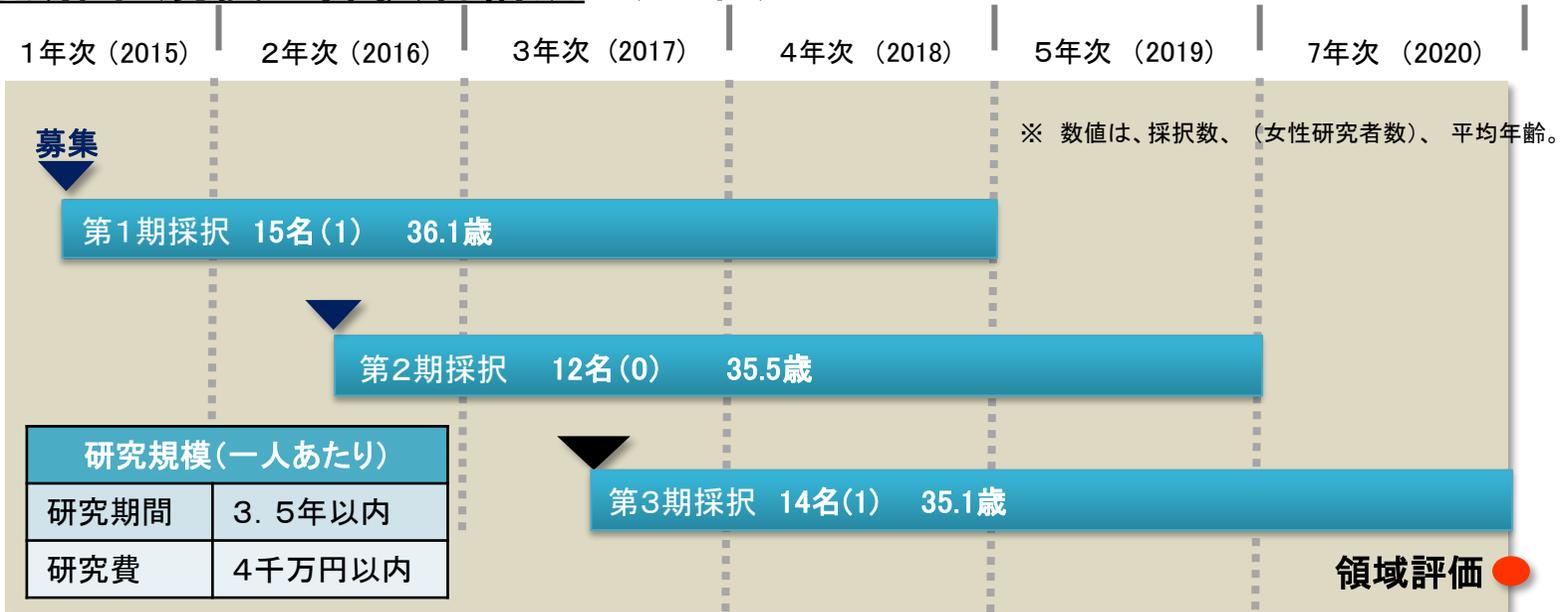
ハイスループットの試料評価手法、データベースの構築・管理手法、各種計算・解析ツールの構築

期待する研究成果

本研究領域は、さがけではあるが異分野融合のチーム型の研究が必要である



研究期間・規模／採択者構成（41名）



- 新しい研究分野を育てるため、総括裁量経費などは持たず、**できる限り多くの研究者を採択した**
- 視野が広くオープンマインドで**異分野交流に長けた優秀な若手研究者**を多数採択できた
- 結果的に**研究者間の自発的コミュニケーション**が進み、想定を超えた多数の共同研究が生まれた

研究者の位置づけ

黒字: 第1期生

青字: 第2期生

桃字: 第3期生

	固体・結晶				分子				高分子・液体・ガラス		
	材料	伝熱	磁性	強相関	量子化学	触媒	発光	電池	バイオ	アモルファス	太陽電池
合成 実験	大久保勇男(41)NIMS コンビナトリアル合成・評価										
計測	永村直桂(35)NIMS 放射光分析、X線、計測	林博之(35)京大 合成手法推薦システム	清水亮太(33) 東工大 ロボット、水素、超伝導	相澤直矢(29) 九州大学 有機EL、発光、レーザー発信	加藤俊顕(36) 東北大 ナノカーボン、プラズマ合成		緒明佑哉(36)慶応大 剥離制御とナノシート材料		林智宏(42) 東工大 バイオ、再生医療	小原真司(44)NIMS 放射光実験基盤構築	田中大輔(36) 関西学院大 合成化学、太陽電池
理論 設計	中島千尋(34)東北大 圧縮センシング 蛍光X線フオログラフィ	世古敦人(35)京大 結晶構造線形モデル 物性予測モデル構築	辻直人(32)理研 グラフ、強相関 高精度量子多体計算	清野淳司(35) 早稲田大学 反応予測システム 高速電子状態計算	畑中美穂(31)奈良先端 発光センサー設計指針確立		溝口照康(41)東大生研 界面構造機能解明		中村壮伸(36)東北大 多次元ホモロジー アモルファス構造の記述		坂上貴洋(40)九州大 高分子物質探索 ひも、トポロジ構造解析
計算 探索	Dam Hieu Chi(39) 北陸先端大 スパースモデリング 固体材料の構造推定	塚田祐貴(30)名大 フェーズフィールド法 材料組織シミュレーション	山地洋平(34)東大 相関第一原理計算 トポロジカル物質設計	柳井毅(37) 分子科学研究所 第一原理計算、 ニューラルネットワーク	森寛敏(37)お茶の水 混合系熱力学物性予測		袖山慶太郎(39)NIMS DFT-MD法、電解液探索		佐伯昭紀(38)阪大 超高速スクリーニング法による 有機・無機材料の物性解明		本郷研太(38) 北陸先端 色素分子、太陽電池
データ 科学 情報・統計・数学	志賀元紀(37) 岐阜大 電験、X線、スペクトル 物質材料の微細構造計測	瀧川一学(38) 北大 ディープラーニング 電子物性予測	岩崎悠真(30) NEC 材料開発、スピン	五十嵐康彦(32) 東大 電験、X線、スパースモデリング			烏山昌幸(31) 名工大 機械学習 界面・粒界構造解析				

本領域の主な活動一覧

- 領域会議 年2回(計11回)
- 公開シンポジウムの開催(計3回)
- 国際シンポジウムの開催(計2回)
- 他領域との連携・協業(さ「革新的触媒」、C「革新的材料開発」)
- 研究者の自主的な勉強会開催(計6回)

年度	領域会議	公開 シンポジウム	国際 シンポジウム	他領域連携	領域勉強会
2015	東京/12月				東京/1月
2016	北海道/5月 葉山/12月			さ「革新的触媒」 領域会議参加	青森/8月 名古屋/10月
2017	淡路島/6月 沼津/11月	東京/2018年2 月			北海道/8月
2018	富山/6月 奈良/12月	東京/8月	東京/2019年2 月	C「革新的材料開 発」領域会議参加	福岡/4月
2019	盛岡/5月 大阪/11月	東京/8月	横浜/12月		赤穂/6月
2020	Online/6月 Online/11月				

本領域の活動事例 1

例1. 公開シンポジウムの開催

- ◆ 様々な研究テーマをさらに深掘する機会を得るため、広く社会のステークホルダーへの参加を期待し公開にて開催
- ◆ 一般の方が来場しやすいように平日に半日で開催

	日時	入場者数	発表数
第1回	2018年2月22日	109名	1～2期生から7名
第2回	2018年8月24日	88名	1～2期生から7名
第3回	2019年8月27日	109名	2～3期生から7名

全ての回において、企業関係の参加者が50%を超えており、産業界の注目の高さがうかがわれた。その中でも、

- ハイスループットスクリーニング実験手法
- 放射光実験データによるハイスループット解析手法
- 少ないデータからの機械学習を用いた予測手法
- ロボット技術を用いた薄膜合成の自動化手法

などに多くの興味が集まった。

2019年度プログラム例



「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」

第3回 公開シンポジウム

データを学び、知を未来へつなぐ。

2019年8月27日(火) 13:00-17:20
於 AP市ヶ谷 7階B会議室

【参加費無料】参加申し込みは下記webサイトから
URL: https://form.jst.go.jp/enquetes/m_OpenSympo3

プログラム

13:00	開会挨拶	東京大学	常行 真司
13:10	「実験化学者による小規模実験データへのマテリアルズインフォマティクス適用事例」	慶應義塾大学	精明 佑哉
13:40	「機械学習によるX線吸収スペクトルの直接予測」	大阪府立大学	池野 豪一
14:10	「電子状態インフォマティクスによる環境化学関連物質の迅速設計」	中央大学	森 寛敏
14:40	休憩		
15:10	「AI-Robotシステムを導入した無機固体材料研究」	東京工業大学	清水 亮太
15:40	「クラスター多極子理論による磁気構造生成と第一原理計算による磁気構造データベースの構築」	東北大学	鈴木 道人
16:10	「実験と情報科学の融合によるハイブリッド解析とバイオマテリアル設計」	東京工業大学	林 智広
16:40	「機械学習を活用した分光スペクトルのハイスループット解析」	物質・材料研究機構	永村 直佳
17:10	閉会の辞		
17:30	交流会	5階D会議室	

国立研究開発法人科学技術振興機構・戦略的創造研究推進事業

お問い合わせ先：国立研究開発法人科学技術振興機構 戦略研究推進部「マテリアルズインフォ」研究領域担当
TEL: 03-3512-3526 mail: presto@jst.go.jp

本領域の活動事例 2

例2. 国際シンポジウムの開催

◆ 本研究領域の成果を広く世界に向けて発信し、会議研究者との交流を図ることを目的に開催

名称	概要	日時	入場者数	発表数
PRESTO International Symposium on Materials Informatics	1期生終了を機に、全期生が揃う集大成での発表機会として開催	2019年 2月9～11日	538名 (延人数)	海外招聘者13名 1～3期生から11名
MRM(Materials Research Meeting)2019	CREST「革新材料開発」、NIMSのMI ² Iと合同で、トピカルシンポジウム開催	2019年 12月10～13日	600名以上 (延人数)	海外招聘者8名 1～3期生から25名 (ポスター含む)

例3. 他領域との連携・協力

- ① さきがけ「革新的触媒」(総括:北川宏先生)
領域会議における合同セッション
- ② CREST「革新的材料開発」(総括:細野秀夫先生)
研究者の領域会議参加

などで交流をおこない研究者間のつながりを深めた

例4. 領域勉強会開催

開催年月	開催地	概要
2016/1	東京	1期生6名参加
2016/8	青森	1期生13名参加
2016/10	名古屋	1期生10名参加
2017/8	北海道	1～2期生10名参加
2018/4	博多	1～3期生18名参加
2019/6	赤穂	他領域からの招待3名 Spring-8見学等(計19名参加)

物質・材料分野と情報科学分野との連携・融合を醸成した

特筆すべき研究成果（1期生）

採択期	研究者	研究成果概略
1期生	佐伯昭紀	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 実験データの機械学習による有機分子のバーチャルスクリーニングと、デバイス作成を要しない独自の実験的高速スクリーニング法により、有機太陽電池材料の探索に成功 ➤ 高品質成膜技術も開発
	世古敦人	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 機械学習のための様々な元素・結晶構造・化合物記述子を開発 ➤ 第一原理計算により様々な物性データセットを構築し、予測モデルを作成することにより、記述子の有効性を実証 ➤ オンラインショッピングなどで利用される「推薦システム」を材料開発に持ち込みその有用性を示す

特筆すべき研究成果（2期生）

採択期	研究者	研究成果概略
2期生	溝口照康	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 転移学習とベイズ最適化を組み合わせ、従来に比べて約3600倍も高速に界面構造を計算で予測する手法を開発 ➤ さらに、ニューラルネットワークを利用することで、スペクトルデータから物質情報を直接決定するための手法を開発
	緒明佑哉	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 自前の小規模データからの機械学習と研究者の経験や考察によって予測モデルを構築することにより、原子層単層から数層ほどの厚さをもつナノシート材料の合成プロセスを開発 ➤ リチウムイオン二次電池の新しい有機負極活物質の探索において、これまでの試行錯誤のみ頼った実験よりも効率的な収率向上や新規物質の発見に成功

特筆すべき研究成果（3期生）

採択期	研究者	研究成果概略
3期生	相澤直矢	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 2期生の<u>原淵祐</u>研究者とともに、有機半導体の弱いスピン-軌道相互作用に基づく逆項間交差の速度定数を、計算で予測する方法を開発 ➤ この予測法を活用して、従来の100倍高い速度定数を持つ熱活性化遅延蛍光分子を設計・合成し、高輝度時にも20%という高い外部量子効率を示す有機ELデバイスを実現
	岩崎悠真	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 解釈性の高いホワイトボックス型のAI技術、コンビナトリアル実験、計算機シミュレーションを駆使して研究を行い、世界記録を更新する高効率なスピン熱電材料(一部未発表)を含む、複数の新材料候補を発見
	加藤俊顕	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 手作業では限界があった合成条件と合成触媒の探索を、独自の高速スクリーニング手法と機械学習を活用して高効率化した結果、電子物性を支配するカイラリティ分布がこれまでになく均一な、単一カイラリティカーボンナノチューブ(CNT)の合成に成功
	清水亮太	<ul style="list-style-type: none"> ➤ ロボット技術を用いて薄膜合成の全自動化を実現し、機械学習を用いた材料創生につながるシステムを開発

研究総括のねらいに対する達成状況

- 1～3期あわせて41名中、実験科学者12名、理論科学者13名、計算科学者11名、データ科学者5名の内訳
- 特にデータ科学者は、
 - ◆ データ科学に関して経験の浅い物質・材料研究者の良き相談相手
 - ◆ 様々な共同研究に参加
 などにより、本領域の全体的底上げに大きく貢献

No.	成果	詳細
1	新物質・新材料の発見	スピン熱電材料、高性能遅延発光材料、カーボンナノチューブの選択的合成触媒など
2	物質・材料の安定性や機能を決定する記述子(descriptor)の提案と高精度物性予測	沸点・共沸、発光材料など
3	候補材料のハイスループットスクリーニング手法の提案と実証	太陽電池材料、発光材料、電池材料、触媒など
4	先行する欧米にはない独自の電子状態データベース構築	半導体欠陥、バンド構造を記述する強束縛モデル、磁気多極子
5	放射光や電子顕微鏡による大量計測データの自動解析手法の開発	-
6	ガラスや液体の構造解析手法の開発	-
7	粒界構造の数学的特徴の発見	-
8	誤差の少ない生体物質の吸着データ取得と特性予測	-
9	ロボット技術を用いた薄膜成長の完全自動化	-
10	新物質および新物質合成手法の推薦システムの提案と実証	酸化物、二次電池電極材料

互いに刺激し合い実質的な連携が行われ、多くのオリジナリティの高い成果が得られた

戦略目標の達成状況

それぞれの戦略目標に対する顕著な成果

No.	戦略目標	顕著な成果
1	多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 独自の高速スクリーニング手法と機械学習を活用して高効率化した結果、均一なカイラリティを持ったカーボンナノチューブの選択的合成触媒を創製
2	情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製	<ul style="list-style-type: none"> ➤ AI技術、コンビナトリアル実験、計算機シミュレーションを駆使して、世界記録を更新する高効率なスピン熱電材料を発見 ➤ 量子コンピューターへの応用が期待されるナノ構造中での単一電子の電荷・スピン状態ダイナミクスを解明。データ科学手法と組み合わせ、電子状態測定の高精度化、高速化を実現
3	分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理的手法の創出・高度化・体系化	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 走査透過型電子顕微鏡による電子エネルギー損失分光イメージングデータの自動解析手法を開発 ➤ 放射光X線イメージングデータの高速解析手法を開発 ➤ ガラスや液体の構造データにトポロジカルデータ解析手法を応用し、特徴づけに成功 ➤ マテリアルズインフォマティクスに適した各種記述子の提案と実証
4	環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築	<ul style="list-style-type: none"> ➤ 高性能な熱活性化遅延蛍光分子を予測し、有機ELデバイスを実現 ➤ 生体材料の化学構造から生体材料の濡れ性、タンパク質の吸着量を正確に予測する手法を開発

まとめ（業績）

- 研究リーダー輩出【**教授**昇格：4名、**准教授**昇格：14名】
- それぞれの研究の結果開発された手法は論文や解説記事、各種学会での講演と通じて普及が図られた
【**国際学術雑誌論文**：381報】、【**国際会議での招待講演**：149件】
- 多数のデータベースやソフトウェアが作成され、研究期間終了後も作成者によって利用されている。多くは個人利用にとどまるが、一部は公開、もしくは公開準備中である。
【**公開SW/DB**：8件（酸化物計算材料DB、磁気構造DB、放射光X線イメージングのデータ解析SW、スペクトルイメージングから化学成分を同定するSWほか）】
- 様々な学会、協会において多数の賞を受賞された
【**受賞者数**：19名（文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本学術振興会賞、本多記念奨励賞、日本金属学会功績賞ほか）】
- その他
【**特許出願数**：7件】、【**プレスリリース**：28件】、【**書籍、論説、解説等**：56件】

まとめ（所見）

研究領域のマネジメント

- 領域立ち上げ当初はデータ科学的手法の利用経験のない研究者が多かったが、データ科学の研究者とそれ以外の分野の研究者の連携を推奨した結果、研究者間の自発的コミュニケーションが進み、想定を超えた多数の共同研究が生まれた
- 公開シンポジウムおよび国際シンポジウムの開催は、研究者のビジビリティを高め、若手研究者の自信につながった

本領域を設定した意義

- 日本におけるマテリアルズインフォマティクス研究は、一部の先駆的研究を除き欧米より遅れて始まったと言わざるを得ないが、本領域はまさにその日本における“さきがけ”になったと言える
- 本領域の研究者は、学会や関連団体で多数の講演を行い、多数の執筆活動により、マテリアルズインフォマティクスの認知度を高め、研究手法として定着される上で大きな役割を果たした
- これらの活動を通じて本領域で構築された人的ネットワークは、将来に残る重要な財産である