

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

技術開発編

低炭素社会実現に向けたデータ活用型材料研究

平成 27 年 3 月

Materials Research with Data-Utilization toward Implementation
of Low-Carbon Society

Strategy for Technology Development

Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies

国立研究開発法人科学技術振興機構
低炭素社会戦略センター

LCS-FY2014-PP-12
(平成 27 年 4 月印刷版)

概要

データ活用による材料科学分野における「予測モデル」の進化は、開発の試行錯誤のサイクルを従来以上に効果的にし、ひいては材料開発の加速につながるものと期待される。ただし、そうしたデータ活用を行なうためにはデータの蓄積が不可欠である。この観点から、本稿では、データベースと計測・分析が、予測モデルと三位一体的に運用され、それらの間で効果的なデータ流通がなされながら、効率的な研究開発を遂行する「データ活用型材料研究」のコンセプトを議論する。低炭素社会構築のための技術課題からブレイクダウンされた物質・材料の課題の解決に、このコンセプトに含まれる様々な手法を適用することで、低炭素社会実現に向けた効率的な物質・材料研究開発が可能になる。

Summary

Evolution of “Prediction models” used in the area of materials science and engineering by data-utilization can make a typical try-and-error cycle in this area more effective than ever, while it would lead to speed-up of materials-development. Because it is necessary to accumulate data before such utilization, a concept of “material research with data-utilization” is discussed in this article, under which efficient R&D could be performed by data-circulation among prediction models of materials, databases and experimental measurements and analysis. By applying the methods included in this concept to solve problems on materials, which is derived as a part of breakdowns of technological issues on implementation of low-carbon society, we can find important issues to be solved and the solutions of problems and consequently establish low-carbon society in more efficient ways.

目次

概要

1. 提案の目的と背景	1
1.1 米国のマテリアルゲノムイニシアチブ	1
1.2 我が国におけるマテリアルズ・インフォマティクスの検討	1
1.3 提案の目的	2
2. データ活用型研究の俯瞰	3
2.1 材料開発・物質探索の典型的サイクル	3
2.2 制御にみる予測モデルの発展段階	4
2.3 データ活用型材料研究	5
3. まとめと今後の展開	8
参考文献	9

1. 提案の目的と背景

1.1 米国のマテリアルゲノムイニシアチブ

2011 年 6 月 24 日、米国のオバマ大統領はカーネギーメロン大学で講演し、科学技術政策関連で新たなイニシアチブを二つ発表した。

一つは、「先端製造パートナーシップ (Advanced Manufacturing Partnership: AMP)」である。米国のグローバルな競争力強化を目的として、製造部門における雇用回復を掲げ、関連する新技術開発の取り組み等を、産学官をあげて行うことを目指す内容である。

もう一つは、「マテリアルゲノムイニシアチブ (Materials Genome Initiative: MGI)」であり、上記 AMP の目的を達成するための、サブイニシアチブに位置付けられる。MGI では、ヒトゲノム計画が生物の設計図としてのゲノムを解読し、インフォマティクスやデータベースと組み合わせることで自在な生体機能の制御を目指したように、材料の設計図を明らかにし、新材料開発のスピードアップを目指すとしている。具体的には、実験的手法の高度化、計算能力の向上、データ管理、などを統合し、次世代材料開発・発見のプロセスをより早く、より安価に、より予測的にすることを目的としている。こうした目的のもと、実験技術、シミュレーション技術、データ活用技術と、関連するインフラ構築に集中助成を行うとしている。

こうしてスタートした MGI の概要は、その後の、現在に至るまでのファンディングの状況から、次のように俯瞰整理できる。

- (1) MGI では、米国におけるグローバル競争力確保にむけた製造分野における雇用確保と技術向上を目標として、製造に決定的な役割を果たす材料開発の加速を、全米各セクター（産官学）に対して呼びかけている。
- (2) 上記目標達成のために、米国各セクターは材料に関する最先端の研究開発とインフラ整備を重点化し、開発の加速にむけての鍵として、計算・実験・データを「統合的」に扱えるような環境づくりと人材育成を進めている。
- (3) 連邦政府の役割を省庁別に整理すると、防衛省とエネルギー省が先端的材料開発の促進、エネルギー省がスーパーコンピュータを始めとする計算資源の整備、科学振興財団が融合的研究およびネットワークの促進、アメリカ国立標準技術研究所が各種ツール開発とそれらの統合化を進めている。

3 年間の活動を通じて、各セクターで様々な取り組みが推進され、ステークホルダーも増加した。将来にむけて、それぞれの施策をより戦略的に進めるために、国家科学技術会議 (National Science and Technology Council: NSTC) より戦略計画 (Strategic Plan) が策定される予定である。これが承認されれば、ナノテクノロジーイニシアチブ (2011 年 2 月) と同様、戦略計画に基づいたファンディングが開始されることが予測される。

1.2 我が国におけるマテリアルズ・インフォマティクスの検討

一方、我が国における最近の動きは次のようである。まず、JST 研究開発戦略センター (CRDS) において、2013 年 2 月と 6 月に「データを活用した設計型物質・材料研究 (マテリアルズ・インフォマティクス)」ワークショップが開催された。これらの会合では、データ科学に基づく予測・推論、実験と計算のデータ同化、インシリコ創薬、ハイスループット第一原理計算、コンビナトリアル薄膜合成等のハイスループット実験、鉄鋼等のマイクロストラクチャ 3 次元データとその活用、CALPHAD 法、データベース連携などの話題提供がなされた。また、それらの議論の結果を踏まえて CRDS が 2013 年 8 月にまとめた「戦略プロポーザル (マテリアルズ・インフォマティクス)」では、「計算機科学 (データ科学、計算科学) と物質・材料の物理的・科学的性質に関する多様で膨大なデータを駆使して、物質・材料科学の諸問題を解明するための科学技術的手法」であるマテリアルズ・インフォマティクスの重要性を提案している。

産業競争力懇談会（COCN）では、産業界からのメンバーを中心に、計算科学をものづくりの現場に普及していくための施策検討について、産業界における実用に即した観点から、構造材料・複合材料を想定し、解析品質の向上、人材育成、データベースの有効活用、情報共有のあり方など、共通課題や連携の仕組みを検討した。その報告として「シミュレーション応用による新材料設計手法」を発表し（中間報告書 2013 年 11 月、最終報告書 2014 年 3 月）、材料設計と情報科学の連携（マテリアルインフォマティクス）のあり方について提言している。

具体的な研究開発プログラムとして、科学研究費助成事業（以下、科研費）の新学術領域研究における、「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成（2013 年度開始 5 年間、領域代表：東京大学 岡田真人 教授）」と「ナノ構造情報のフロンティア開拓 - 材料科学の新展開（2013 年 6 月開始 5 年間、領域代表：京都大学 田中功 教授）」の二つが挙げられる。いずれの領域代表も、CRDS のワークショップに話題提供者として登壇している。また、2014 年度より科研費の枠組み内での公募研究をスタートさせており、物質・材料に関連するデータ駆動型モデリングのプロジェクトも採択されている。

また、2014 年度中に、内閣府総合科学技術イノベーション会議がはじめて独自予算をもって自らファンディングを行う「戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）」で推進する 10 課題のうちの一つ「革新的構造材料（SM4I）」において、構造材料分野において実験・計算・データの統合を目指すマテリアルインテグレーションというコンセプトが提案され、公募採択されたプロジェクトが 2014 年 10 月に開始された。

他にも、学協会や既存プロジェクトの中でのネットワーキング施策として、様々な取り組みがなされている。日本鉄鋼協会における研究会「鉄鋼インフォマティクス」、文科省委託事業「数学・数理科学と諸科学・産業との協働によるイノベーション創出のための研究促進プログラム」における勉強会「計算材料科学と数学の協働によるスマート材料デザイン手法の探索」などがこうした取り組みに挙げられる。同じく、物質・材料研究機構（NIMS）においても、「マテリアルズ・インフォマティクス」をテーマに、理事長主催による公開勉強会シリーズ（全 8 回）が開催された。

1.3 提案の目的

以上のように、米国マテリアルゲノムイニシアチブに刺激される形で、我が国においても、物質・材料研究分野におけるデータ活用の検討が、「マテリアルズ・インフォマティクス」の名のもとに急速に進んでいる。データ活用は、あらゆる材料研究課題に適用が期待される「ツール」として、計測・分析技術などと同様に横串的な役割が期待される一方、その定義すら明確でない黎明期にある。このため、現在の研究開発状況を俯瞰し、その全体像を踏まえながら、社会的に重要な課題に対してデータを活用した物質・材料研究の具体例を作っていくことが、今後の発展を考えたときに重要である。

こうした背景のもと、本提案書では、これまでの調査研究をもとに得られた「データ活用型材料研究」のコンセプトを提案する。その内容を一言で言えば、「データベース」「計測・分析」「予測モデル」が三位一体的に運用され、それらの間で効果的なデータ流通が行われる姿である。「インフォマティクス」の単語は、「コンピュータ」や「シミュレーション」をまず想起させ、マテリアルズ・インフォマティクスにおいても、とくにシミュレーションによる予測への期待が先行している印象が強い。しかしながら、インフォマティクスに不可欠なデータの生成・蓄積を考える上で、計測・分析の果たす役割は本質的である。むしろ、データ活用を念頭にいたときに、新たな計測・分析手法の開発の必要性が見えることを本稿で述べたい。

2. データ活用型研究の俯瞰

本節では、データ活用型材料研究について考察し、その概観を示す。そのためにまず、材料開発・物質探索の典型的サイクルについて説明し、そのサイクルにおいて、予測モデルが重要な役割を果たしていることを見る。その後、予測モデルおよびその確立方法を「データ」が革新する可能性を、制御方法の段階的発展から考察する。最後に、現在の関連研究を調査分析した結果から、予測モデルを中心として、データベースと計測・分析手法を互いにつないでその間をデータが流通する三位一体的な「データ活用型研究」の概形を示し、その細目について述べる。

2.1 材料開発・物質探索の典型的サイクル

「材料開発・物質探索」は、使用目的に合致した材料や望みの性質をもつ物質を創製・発見することである。まず、典型的な「材料開発・物質探索」の手順について考察してみよう。具体例として、「可視光を使い切るタンデム構造型太陽電池の開発」をとりあげ、どのような手順がありうるのか考えてみる。

最初に行うのは、要求に従い、何をどのように作るか、予測モデルを用いながら材料/部材をデザインする「設計」であろう。例では、「可視光を使い切る」ということが要求であり、そのためには、バンドギャップ、吸収透過、界面接合性等を考慮して、タンデム構造を設計し、候補を絞込むことが必要である。

次に、設計に従って、実際に材料/部材を得る「創製」の段階がある。例では、実際に薄膜プロセス等を駆使し、タンデム構造を積層させる。

さらに、こうして得られた材料/部材の特性および性能が、実際に要求したようなものなのか「評価」の段階が必要である。例では、実際の発電能力を確認し、もし望みどおりでないとしたら、どこで何が起きているかを観察・把握する必要がある。

最後に、把握された状況をもとに、原因追求により「改善」をはかる段階がある。改善策は、「このようにすれば結果が改善されるはず」という「予測」を伴い、新たな「設計」に反映される。場合によっては、「評価」の段階で得られた知見から予測を行なうモデルを更新し、さらに新しいプロセスを考えて、設計に反映する場合もあるだろう。タンデム構造の例では、設計通りに可視光を使い切ることができていない理由を突き止め、改善策を考えていくことになる。

いずれにせよ、評価の段階で望みの特性が得られていないのであれば、改善を図るために、設計の段階に戻って手順を繰り返すことになる。つまり、4つの段階は、図1に示すように循環構造で整理できる。

加えて、この図には、「シミュレーション」も書き込まれている。シミュレーションは「設計」をもとに、「評価」をダイレクトに行なうものと位置付けられ、「創製」をスキップする働きをするものと考察される。このように、シミュレーションを活用し、「創製」すべき材料のあたりをある程度付けたのち、実際に「創製」を試みることで、循環構造で示される試行錯誤の回数の削減が期待される。

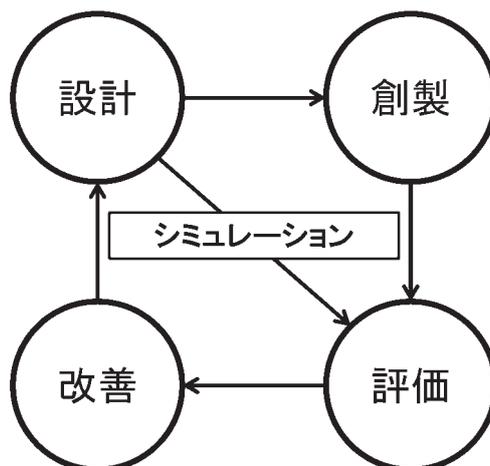


図 1 材料開発・物質探索の循環構造

さて、この試行錯誤の循環において、ただ闇雲に試行錯誤を繰り返すのではなく、開発対象において現実に起こっていることを認識し、モデル化し、得られたモデルを用いて結果を予測しながらそれぞれ「設計」「シミュレーション」「改善」を行なうことで、より効率的に試行錯誤が行われることが期待される。このように開発対象を適切に記述する「予測モデル」の確立により、効率的な材料開発・物質探索が期待される。

2.2 制御にみる予測モデルの発展段階

ここで、少し本題から外れて、対象を制御するという観点から、予測モデルの発展について考えてみよう。

何か制御したい対象系があるとして、その制御方法について思考実験してみる。まずは、外部より何らかの働きかけを対象系に行い、対象系の注目量（これを制御量と呼ぶ）が望みどおりに制御できればよい。このときの入力は、最初は直感に基づき闇雲に行われるかもしれないが、何度か繰り返すうちに「勘」が働くようになるだろう。このとき、制御を行おうとする人間の脳内では、対象系の特徴を抽出して把握している、すなわちモデル化が行われていると考えられる。いずれにせよ、この段階では、対象系に働きかけを行なうための「アクチュエーター」が必要である。そして、それへの入力と対象系の反応が脳内でパターン化されているのが、この段階である。

その次の段階として、入力する操作量を正確に制御し、より早く、正確に決まった制御量を得ることが考えられる。これは機械による制御によって達成されるが、そのためには、予測モデルを機械が読み込めるように式やアルゴリズムで形式化する必要が出てくる。つまり、予測モデルは「記述」されることで、人間の脳内から引き出されて形を持つようになる。この段階では、式やアルゴリズムを組み合わせた計算で、対象系の精緻な操作が可能となる。

さらに、対象系が孤立しておらず、外界から絶え間なく刺激を受けながら常に変化する場合、対象系で何が起きているかを測定・観測し、その結果をフィードバックし、対象系を制御する方法が出現する。これを行なうためには、対象系を観測する「センサー」を備えて、そこからの入力が必要となる。この段階で記述されるモデルは、外界の変化も織り込んだ形で対象系の反応を予測できる。しかし、対応できる変化は、基本状態に対して、短い時間で起こる小さな擾乱に限られる。

もっと長期的で大きな変化に対して予測を行なうためには、長期的な視点で対象を把握して、大局的に方向性を定めるような制御を行なうことが求められる。これは変化に対する瞬間的な反応では制御できず、過去に起こった事例を記憶・蓄積し、パターンを学習し、モデルに組み込む

という方法が必要となる。そのためにモデルが備える必要があるのが「記憶装置」である。そして、記憶されたデータを活用して複雑な事象の予測を行なうアルゴリズムが、特に、脳の働きを模倣して研究されているのが、現状であろう。この段階で記述されるモデルには、長期的で大きな変化も織り込まれ、ある程度の確度をもった、複雑さを伴う事象や非平衡の事象の予測が期待されている。

以上のように、制御技術の進化は、予測モデルの進化と深く関連していることが考察される。その最も進んだ段階にあるのが、データ活用により長期的な変化を織り込んで予測できるモデルの構築である。前節で考察した材料開発・物質探索の試行錯誤においても、データを活用したモデリングが本質的に効力を発揮するのは、材料の使用状況や長い時間など、複雑で不確定な要因からの影響が避けられない事象や特性の予測においてであろう。

2.3 データ活用型材料研究

前節まで見てきたように、典型的な材料開発・物質探索を効率的に行なうためのポイントとして、効果的な「予測モデル」の構築が挙げられる。そして、予測モデルは、経験による対象の直感的把握、物理的なモデリング、観察・計測に基づく定量的な対象把握によって進化し、さらに、ビッグデータ時代である現在において、データ活用を通じた予測モデルおよびモデリング手法の革新への期待が持たれていると言えよう。こうした状況を踏まえて、本節では、データ活用型材料研究の具体的な形を見ていくことにする。

材料研究で用いられる「予測モデル」は、経験に基づく予測モデル（経験則）、物理法則から導かれる予測モデル（物理モデル）が存在する。前者については、例えば構造材料分野における「ホール-ペッチ（Hall-Petch）の関係¹⁾」のようなものが挙げられる。一方、後者については、密度汎関数理論のような汎用的なモデルを挙げることができるだろう。これらのモデルは、主に「物質・材料において起こる現象・事象」「物質・材料が示す性能」を、予め把握しうる諸条件から予測するものである。

その諸条件のもとで、実際に起こった結果、もしくは予測される結果（材料内外で起こる現象・事象、材料が呈する性能、合成される材料、etc.）の関連性を記録・蓄積し、必要なデータをいつでも引き出せる形にしておく役目を果たするのがデータベースである。そして、そこに蓄えられたデータの傾向を情報統計学等の知見等を用いて分析し、それにより予測モデルを確立することが、まず考えられるデータ活用型研究の形であろう。これは、データ駆動型モデリングと呼ばれている。それにより得られる予測モデルは、まずは、データが示す単純な傾向を反映したものになる。このような単純なケースでは、従来から行われてきた重回帰分析との違いが見えにくい。しかしながら、前節で見たように脳が行う記憶・学習のプロセスを模倣して、より深く広いデータ活用ができるようになれば、これまでにない予測モデルの確立に結び付けることが期待できる。

とはいえ、現時点でデータ駆動型モデリングを遂行できるのかについては、疑問が残る。なぜなら、利用できるデータが少なく、断片的であり、統合して用いることができないケースがほとんどのためである。したがって、少なくともデータ駆動型モデリングを有効とするためには、まずは、モデリングに用いるデータを生成し、これを蓄積して、データベースを充実することが求められる。

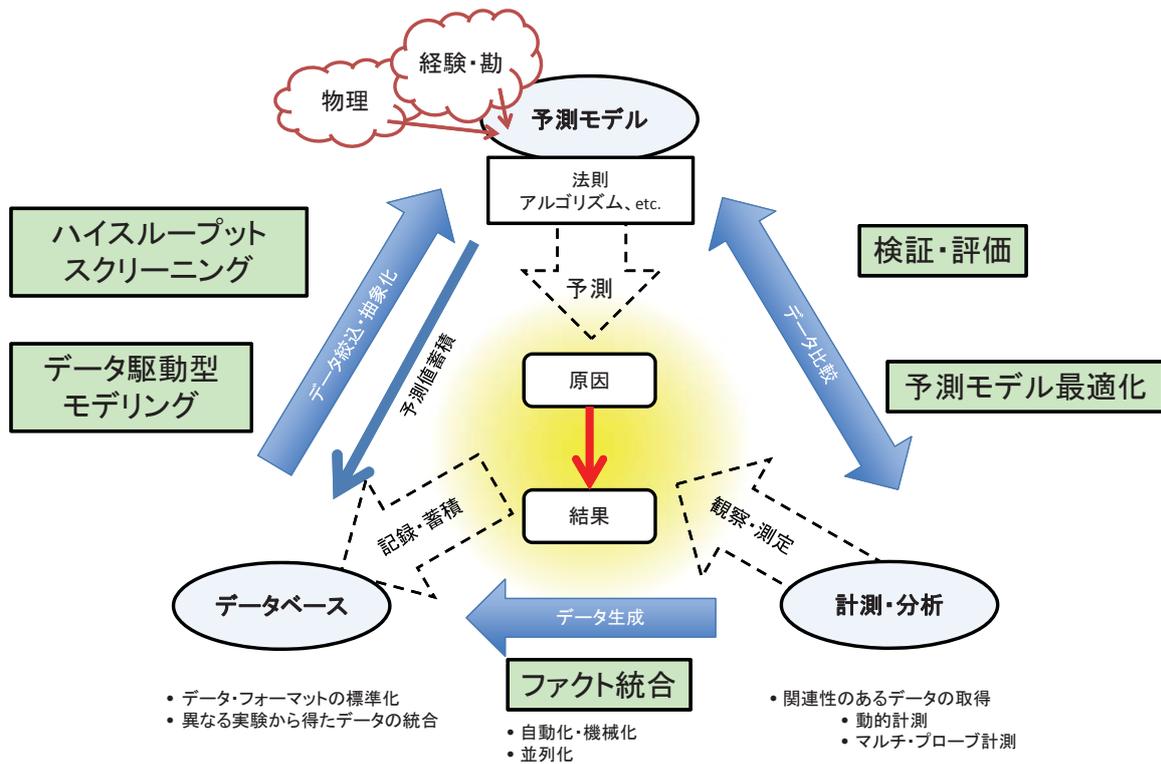
データの生成源として、以下に示す二つが考えられる。一つは、予測モデルからの出力とその時の入力（諸条件）を一組とするデータセットである。第一原理計算のように、予測結果を得るのに多くの計算を必要とするような場合、その都度、何度も同じ計算を行なうのは無駄が多い。このため、入力パラメータと出力結果をデータとして保持する意味合いが出てくる。このような

¹⁾ 金属組織の細粒化による硬化と結晶粒径の関係を表した経験式で、降伏点や引張強さは、（結晶粒径の逆数）^{1/2} に比例して大きくなることを表している。

データを用いた顕著な成功例として、MIT で運用されているシステム「Materials Project^[1]」がある。このシステムでは、第一原理計算に基づく汎用的な電子状態予測モデルの入出力をデータベース化し、内外に提供している。電子状態からは、多くの物性値が計算可能であり、それらも合わせてデータベース化し、物性の傾向分析や、物質・材料のハイスループットスクリーニングの機能も提供する。こうした第一原理計算の結果をデータベース化する試みについては、他にも幾つか存在する^[2]。

もう一つは、対象を実験的に計測・分析して得られるデータセット、いわゆる実験データである。そのデータは、測定装置、測定者の技量、測定環境、測定手順などによって、得られる結果が変わる。つまり、計算がいつも同じ条件を入力できるのと異なり、測定はその場限りのものとなる。ゆえに、実験的測定において記録は本質的であり、記述法の策定（標準化も含む）、およびデータベースとの連携は重要である。

以上のように、予測モデルと計測・分析は、それぞれデータ生成源としてデータベースと関係付けられ、それらの間でデータが流通することで、データベースが充実する姿が見えてくる。それをまとめて、予測モデル・データベース・計測分析が三位一体的に運用される様を示したのが、図 2 である。



なお、予測モデルと計測・分析の関係も興味深い。計測・分析において、測定時のあらゆる状況を記録するのは不可能であり、同時に、その結果現れるものをすべて見ることも不可能である。つまり、入力となる諸条件も、得られる結果も、「何を見るか」「何を見たいか」という限られた視点の範囲のなかでしか記録できない。しかしながら、一方で、この限られた視点というのは、対象系を単純化し理解する「モデリング」にも共通する。すなわち、計測・分析を行なう時点で、対象をどのように理解・把握するか意志が表れているのであり、その意味で、「計測・分析」は「予

測モデル」と深く関係付けられ、それぞれから出力されるデータは互いに比較検討されるべきものである。

要素間はデータの流通により結び付けられ、その流通形態は、表 1 のとおりまとめられる。

表 1 データの流通経路と流通形態

データ流通の経路	データの流通形態
計測・分析 →データベース	データ生成：事実(ファクト)としての計測分析データを生成する
計測・分析 ↔予測モデル	データ比較：予測モデルの値と実験的測定値を比較する
データベース →予測モデル	データ絞込・抽象化：数多くのデータから重要要素を絞り込んで一般化する、もしくは、条件に適合するデータを探し出す
予測モデル →データベース	予測値蓄積：予測モデルによる出力結果を予め揃えておく

効率的なデータ流通を実現する具体的な項目について、それぞれ以下に解説する。

(1) 検証・評価

予測モデルは、あくまでも注目する特徴を、現実から切り出して記述したものであり、適用範囲は自ずと限られる。こうした適用範囲がどれほどのものか、また、そもそも予測モデルが妥当な精度で現実を予測しうるのか、モデルの予測値と現実の値の比較を通じた検証・評価が必須である。

(2) 予測モデル最適化

予測モデルはあくまでも現実から注目する特徴を切り出して記述したものであり、現実との差が生ずるのは避けられない。これを逆に考えて、現実の値から、予測モデルの記述を修正し、現実的な値を予測できるようにするような方法が存在する。これは、データ同化と呼ばれており、気象予測や地震予測の分野で既に有効活用されている^[3]。

(3) ファクト統合

既に述べたように、個々の実験はその場限りのものである。したがって、異なる実験を比較するためには、測定条件を可能な限り共通化し、差異が生ずる箇所を把握することが肝心である。これを達成するために、例えば、自動化・機械化による測定条件やワークフローの標準化、異なる特徴量を同じ瞬間に観測するマルチプローブ同時観測およびその動的観測、異なるサンプルに対してまとめて計測・分析・合成を行なうコンビナトリアル手法などが、データ活用にむけて重要である。さらに、得られたデータの記述法(フォーマット)の標準化も、ファクトを統合していく上で必須である。

(4) データ駆動型モデリング

既に述べたように、データベースに蓄えられたデータの傾向を、情報統計学等の知見を用いて分析し、予測モデルを確立する方法である。機械学習で用いられる方法論の応用が期待される。また、膨大な数にのぼる様々な場合をすべて学習するのは不可能であり、統計学を援用して、学習する場合の数を絞り込むことも行われる。こうした手法として、自然現象にはスパース性が備

わるとする仮定（スパース原理）のもとで、少ない場合の数から学習するモデリング手法（スパースモデリング¹⁴⁾）などがある。

（5）ハイスループットスクリーニング

予め様々な場合について結果を計算しておき、コンピュータの検索技術を用いて、複雑な条件の中から望みのデータを探し出す方法を指す。とはいえ、材料とその特性/性能が呈する探索空間はたいへん膨大なため、様々な工夫が求められる。例えば、こうしたスクリーニングをデータ生成とセットで考え、場合によってはその実行中に行なう「その場（オンザフライ）分析」などが挙げられる。また、一度に測定するデータ量に応じて探索空間も広がることになるので、マルチプローブ同時解析や超高分解能解析においても、こうした工夫が重要である。なお、大型望遠鏡や加速器などを用いる高コストの実験では、関連手法が発達しており¹⁵⁾、参考にすべきであろう。

データ活用型材料研究にとって、(1) - (5) のようなターゲット項目は、それらの開発自体が一つの研究ターゲットである。これらの開発をバランスよく推進することで、データ活用型材料研究を統合的に進めることができ、材料開発・物質探索のスピードアップをはかることが可能になると期待される。

3. まとめと今後の展開

これまでの議論をまとめると以下のとおりである。まず、材料開発・物質探索の典型的な試行錯誤のサイクルにおいて重要な役割を果たす「予測モデル」は、データの活用によりその革新が期待され、ひいては開発の加速が期待される。そのためにはデータの蓄積が不可欠であり、この観点から、データベースと計測・分析が、予測モデルと三位一体的に運用され、それらの間で効果的なデータ流通を背景に、効率的な研究開発を遂行するコンセプトを「データ活用型材料研究」として提案した。

しかし、ここまででは、単純に材料開発・物質探索を効率的に行なうという話にとどまってしまう。これをどのように活かすかが、技術の社会実装の観点からは最も重要である。

LCS は、低炭素社会構築という世界的な重要課題の達成に向けて、必要な技術の見定めと社会実装を総合的・定量的に検討するという、極めて特徴的なミッションを有する研究センターである。これまでに当センターでは、社会課題の把握・分析から、それを因数分解して、要素技術課題までに落としこむ活動が行われてきており、知見が蓄積されている。

もしも、LCS で行われている技術の因数分解が、物質・材料のレベルまで行われ、導き出された課題を解決するために用いるツールとして「データ活用型材料研究」を組み合わせることができるならば、低炭素社会構築に大きなインパクトを持つデータ活用型材料研究プログラムの提案が期待できる。

こうした考えに基づき、現在 LCS では、NIMS との協働体制を組み、その可能性を具体的に追求している。具体的には、まず、NIMS が中心となり、データ活用型材料研究に用いられるツールを俯瞰する。その具体例は、例えば、2.3 節中の(1) - (5)であり、さらにそれらの細目である。俯瞰された各ツールは、課題解決を行なうための言わば「共通ツール」に相当し、様々な課題に対して適用する横串的な役割が期待される。そして、LCS との議論を通じて、低炭素社会実現に向けて物質・材料レベルにまで因数分解された技術課題に対し、どのような適用可能性があるのかを思考実験する。その結果をとりまとめて、ツールやデータの共通化・統合化の可能性、それが見込まれる重要課題領域の発掘を行なう。また逆に考えれば、ツールやデータの共通性・統合性から新原理・新設計手法の着想を得たり、新規計測技術を提案する可能性も大いに期待できる。

現在、LCS で具体化された、太陽光発電、蓄電システム、固体酸化物型燃料電池における要素

技術課題を対象として、「データ活用型材料研究」の適用について思考実験を開始している。その結果を順次まとめ、近い将来、プロポーザルとして提案を行なう予定である。

参考文献

- [1] Materials Project: <https://www.materialsproject.org/>.
- [2] 例えば、Duke 大学の Aflowlib (<http://afloplib.org/>)、NIMS の Compes-EX (近日公開予定)、など。
- [3] 樋口 編著 “データ同化入門 (予測と発見の科学)”, 朝倉書店, 2011 年.
- [4] 文部科学省科学研究費補助金「新学術領域研究」、スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成 - <http://sparse-modeling.jp/>.
- [5] 岩田修一, 私信.

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

技術開発編

低炭素社会実現に向けたデータ活用型材料研究

平成 27 年 3 月

Materials Research with Data-Utilization toward Implementation
of Low-Carbon Society

Strategy for Technology Development,
Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies,
Center for Low Carbon Society Strategy,
Japan Science and Technology Agency,
2015.3

国立研究開発法人科学技術振興機構 低炭素社会戦略センター

(平成 27 年 4 月印刷版)

本提案書に関するお問い合わせ先

- 提案内容について・・・低炭素社会戦略センター 特任研究員 門平 卓也 (Takuya KADOHIRA)
- 低炭素社会戦略センターの取り組みについて・・・低炭素社会戦略センター 企画運営室

〒102-8666 東京都千代田区四番町5-3 サイエンスプラザ4階

TEL : 03-6272-9270 FAX : 03-6272-9273 E-mail : lcs@jst.go.jp

<https://www.jst.go.jp/lcs/>

© 2015 JST/LCS

許可無く複写・複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。
