

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  
(Vol.2)

平成28年3月

“Materials Research with Data-Utilization toward Implementation  
of Low-Carbon Society (vol.2)”

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-FY2015-PP-09

## 概要

低炭素社会構築に資する材料の開発で用いられるデータ空間構造を試行的に概観した。データ空間は、①材料特性の利用先、②制御したい材料特性、③材料特性の支配因子、の3軸で整理可能であり、また、機能材料・構造材料の分類を超えて取り扱うデータ種の関係性を統一的に記述することが可能である。①の適用先に依らず、②制御したい特性を司る③支配因子は共通性が高く、③に関するデータ統合と蓄積と、①-③の相関関係をインフォマティクス手法等により分析することで、思いもよらぬ知見をもたらす可能性を示している。そうした知見を効果的に得るためには、②に対し、一般的かつ共通な記述法を確立することが急務である。

## Summary

We tried to grasp the structure of data-space used in research and development of materials for technologies as enablers to establish low-carbon society. The data-space could be pictured with three main axes, (a) “Applications” of Materials Properties, (b) “Materials Properties” to be controlled, and (c) “Dominant factors” of Materials Properties, and is able to describe relations among various kinds of data concerning about structural materials as well as functional materials in the same manner. (c) “Dominant factors” of Materials Properties are highly common keywords widely connected to (a) through (b), so that it indicates a potential to find out unexpected knowledge by analyzing correlation between (a) and (c) using informatics methods, if we could achieve accumulation and integration of data regarding (c). In order to find out such knowledge effectively, it is urgently necessary to establish general and common description scheme for (b).

## 目次

### 概要

1. 提案の目的と背景	1
1.1 データ活用型材料研究をめぐる状況の推移	1
1.2 前編の概要	2
1.3 提案の目的	2
2. 低炭素社会構築に資する材料の開発で用いられるデータ空間の試行的概観	3
2.1 俯瞰図の作成	3
2.2 俯瞰図に対する考察	7
3. まとめと今後の展開	8
参考文献	8

## 1. 提案の目的と背景

### 1.1 データ活用型材料研究をめぐる状況の推移

前編 [1] において、米国のマテリアルゲノムイニシアチブとその概要、さらに、マテリアルズ・インフォマティクスの名のもとで進む、日本の研究活動状況について述べた。それから1年が経過したが、この1年間における国内の関連活動の充実には眼を見張るものがある。

まず注目したいのは、2015年6月に総合科学技術・イノベーション会議が発表した「科学技術イノベーション総合戦略2015」[2]である。この中では、スマート社会の構築に向けたICT技術と個別分野技術の融合がクローズアップされ、物質・材料研究分野においては「マテリアルズインテグレーション」のコンセプトを軸とした、ICT技術をベースとした様々な関連知見の統合を目指すことがうたわれている。そのコンセプト実装の先行プロジェクトとして、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)の10プロジェクトの一つ「革新的構造材料」における「マテリアルズインテグレーションシステムの開発」が位置づけられ、2014年10月の開始以来、4年半のプロジェクト全期間のうちおよそ1年半が経過したところである。

こうした中で、2015年7月に「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(“Materials research by Information Integration” Initiative: MI<sup>2</sup>)」が開始された。これは、JSTのイノベーションハブ構築支援事業において公募採択されたプロジェクトであり、物質・材料研究機構が受託した[3]。プロジェクトの目標は以下の3つである。

- ・産業界の物質・材料研究開発課題に対して、データ駆動型物質・材料科学を用いることにより、有効なソリューションを短期間で開発・提供する。
- ・物質・材料研究開発に劇的な変革をもたらす新物質・新材料開発パッケージに必要なツール群を、人工知能といった基礎技術を活用しながら開発する。
- ・産業界とアカデミアの両者が活用できるデータベースを整備・構築し、上記ツール群とともに国の知的資産となる新たな物質・材料開発手法の基盤(データプラットフォーム)を構築する。

これと並行するようなタイミングで、JSTは戦略的創造研究推進事業のさきがけ領域に、マテリアルズ・インフォマティクスの領域を設置、本分野における挑戦的研究をファンディング面から支えている[4]。

以上のように、全日本的に関連施策の推進が加速するなか、2016年1月に「第5期科学技術基本計画」[5]が閣議決定された。それが指し示す方向性は大きく二つある。一つは「ソサイエティ5.0」と呼ばれるコンセプトで、あらゆる分野において、実質的(フィジカル)な空間と仮想的(サイバー)な空間を想定、両者を結びつけるものとしてビッグデータを位置づけ、ICT技術を基盤としたフィジカルとサイバーが統合されたスマート社会構築とイノベーション創出を目指すものである。物質・材料研究においては、計測・分析やプロセス技術がフィジカルに属し、計算科学・データがサイバーに属するものと考えれば、前出のマテリアルズインテグレーションが本基本計画の方向性に沿っていることが容易に理解できるだろう。

もう一つは、オープンイノベーションの推進である。これは、グローバルで展開の速い社会情勢に柔軟に対応するために、競争力の鍵となる技術基盤を固めて、その上で様々な関係者が集結し、協働してイノベーションの迅速な創出を目指すものである。特徴的なのは、協働の段階における様々な関係者が集結する「場」を提供する役割を、国立研究開発法人に求めている点である。前出のMI<sup>2</sup>が、物質・材料のデータをコア競争力とする場を構築して、求められる役割を果たすべく進められる施策であることは一目瞭然である。

## 1.2 前編の概要

このように状況が推移する中で、前編 [1] での結論を改めて振り返ってみよう。

まず、一つめの結論は、データ活用により、材料開発の加速が期待されるということである。とくに、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」がデータ活用により革新されることを強調した。

二つめの結論は、「データ活用型材料研究」のコンセプト提案である。データ活用を推進するには、まず、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、および予測モデルとの間の効果的なデータ流通を背景とする効率的な研究開発を遂行するコンセプトを構想した。

最後に、このコンセプトの適用先を、単純な材料特性のモデリングのみならず、LCS における「社会課題の把握・分析から、それを因数分解（以下、因子分解）して、要素技術課題までに落としこむ活動」と接続することで、技術を「使う」観点までも含むデータ活用型材料研究プログラムの提案への期待について述べた。

## 1.3 提案の目的

こうした背景のもと、本提案書の目的は、前編での考察を踏まえ、上記のような材料を「使う」段階までを含んだ統合的な材料開発の可能性を探求し、より具体的な政策提案を行うことにある。そこで、前編 [1] で述べたような低炭素社会を実現する技術を物質・材料レベルにまで因子分解する作業を、まずは精緻でなくとも網羅的に行うことを優先して、データ活用型材料研究が行われる情報空間の俯瞰的な把握を行う。さらに、俯瞰的に描き出された結果を用いて、前編で分析したデータ活用型材料研究の進め方、向かうべき方向性の選択肢を考察し、より具体的な政策提案を提示することを本提案の目的とする。

## 2. 低炭素社会構築に資する材料の開発で用いられるデータ空間の試行的概観

本節では、材料を「使う」段階までを含んだ、統合的な材料開発の可能性を探求するために、データ活用型材料研究で用いられるデータ空間を、低炭素社会構築に資する材料の開発を対象として俯瞰的に把握することを試みる。

### 2.1 俯瞰図の作成

LCS では、低炭素社会構築に資する技術を俯瞰し、それらを因子分解し、ボトルネックとなる箇所を点検し、そのボトルネックを解消するための技術発展なども踏まえて、社会実装にかかるコストの予測、さらには社会実装シナリオ策定を進めている。

本提案では、こうした因子分解の取り組みとデータ活用型材料研究を接続すること、さらに、用いられるデータ空間を俯瞰することが目的である。

これを実現するために、まず、LCS が 2012 年に公表した「低炭素社会作りのための総合戦略とシナリオ 第一版」[6] (以下、「LCS 総合戦略シナリオ」) に記載されている低炭素社会実現に資する技術項目を俯瞰する。それぞれの技術は、LCS の技術評価により因子分解され、分解された因子が列挙されている。例えば、太陽光発電については、図 1 のようなロードマップの形でまとめられている [7]。

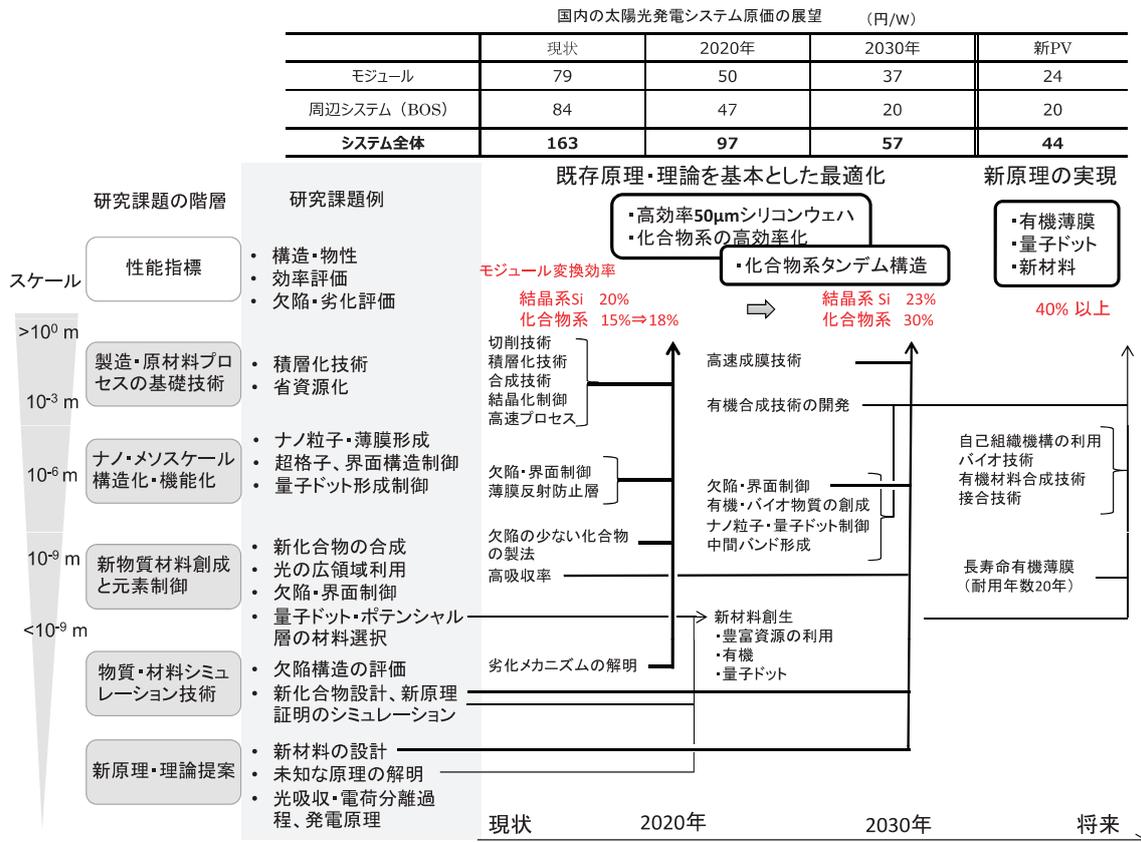


図 1 LCS の太陽電池ロードマップ (文献 [7] より引用)

ここから分かることは、「低炭素社会構築」を技術の「使用」目的として出発し、因子分解を経て、技術毎に様々な物質・材料の「制御すべき特性」に至るというものである。このとき、上記の太陽光発電の例 [7] でいうと、Si インゴットからのウェハーの切り出し（切削）効率の向上などもコスト算定を行う上で考慮されるなど、「使用」に向けて、様々な材料技術の可能性を考慮している点に特徴がある。このような、物質・材料の「適用先」から「特性発現」の階層にいたるまでの因子分解を、シナリオに掲載された他の低炭素技術（低炭素社会の構築に貢献する多種多様な技術 [6]）についても行き、共通概念をまとめながら記述できる。

今回、とりあげる低炭素技術として、「LCS 総合戦略シナリオ」[6]においてとりまとめた例に倣うことにした。それによれば、技術分野は大分類、中分類、小分類の 3 階層で分類され、最も大きな分類は以下の 6 項目からなる（図 2 参照）。この内、今回の分析では、CCS を除く 5 項目をとりあげることにした。

<b>発電</b>	太陽光発電、太陽熱発電、風力発電、波力発電、潮力発電、海洋温度差発電、バイオマス発電、廃棄物発電、地熱発電、高温岩体発電、マグマ発電、燃料電池、燃料電池複合発電、高効率石炭火力発電、原子力発電
<b>CCS</b>	CO <sub>2</sub> 回収、CO <sub>2</sub> 貯留
<b>エネルギー媒体・輸送</b>	蓄電池、水素、雪氷冷熱利用、バイオマス燃料、超伝導送電
<b>エネルギー消費：民生</b>	建物断熱、省エネ空調システム、自然エネルギー利用、ヒートポンプ利用、省エネ家電利用
<b>エネルギー消費：交通</b>	ハイブリッド自動車、電気自動車、水素自動車、燃料電池自動車、高度道路交通システム（ITS）
<b>エネルギー消費：産業</b>	高純度リサイクル材の製造

図 2 低炭素社会構築への貢献が期待される技術（大分類、中分類）[6]

一方、物質・材料研究の観点から技術の「使用」を眺めた時には、個々の物質や材料が備える特徴的な「特性」に注目して、有望な適用先を見定め、それにしたがって、注目特性を最大化・最適化するように研究を進める。このとき、最適化の対象となる特性を支配する因子を明らかにし、それら因子と特性の関係を明らかにすることで、特性の制御を行う。こうした研究の進め方を俯瞰的に見た例として、低炭素社会構築に向けて用いられる物質・材料研究を俯瞰した冊子である「環境・エネルギー材料ハンドブック」[8]をとりあげることにした。

このハンドブックは基礎編・材料編・技術編の 3 部から成り立ち、その基礎編の中で、「新しい社会基盤技術を準備するための材料科学」という節が設けられている。その中で取り上げている分類は図 3 に示す様な構成となっている。

更に、続く材料編において、各材料の機能発現の仕組みや問題点などを解説しており、本稿では、その記述内容から「支配因子」と「制御すべき特性」の項目について共通概念をまとめながら、それらの関連性を書きだすことができる。なお、図 3 中で（★）をつけた 3 項目は、材料機能を

発現させる手段や材料機能のモニタリングを行う手段であり、材料そのものとその特性の支配因子に注目した前 4 項目とはその位置づけが異なるため、今回の分析からは除外した。

<b>電子エネルギー材料</b>
電子が有するエネルギーと電子、光、熱などのエネルギーを直接変換できる半導体材料
<b>化学エネルギー材料</b>
化学反応や電気化学反応によって熱や電気に変換できる化学エネルギーを発生・貯蔵するための材料
<b>高効率基幹発電用材料</b>
集中型大規模発電を支える材料
<b>エネルギー輸送・転換材料</b>
エネルギーの輸送や物の輸送に関わる材料、ならびにエネルギーの転換に関係する材料
<b>ナノドリブンエネルギー・環境材料 (★)</b>
ナノテクノロジーの活用
<b>グリーンプロセッシングとそのための材料 (★)</b>
プロセスの効率化
<b>診断・寿命予測材料 (★)</b>
材料損傷に対する診断・寿命予測技術

図 3 「新しい社会基盤技術を準備するための材料科学」での分類 [8]

さて、これまで述べてきたことをまとめると、次のとおりである。

低炭素社会構築に資する材料の開発で用いられるデータ空間は、「①材料特性の利用先」と「③材料特性の支配因子」の二つの観点を、「②制御すべき特性」を介して結びつけることにより記述できる。

例えば、「LCS 総合戦略シナリオ」[6] から、太陽光発電を「①材料特性の利用先」とした場合、環境・エネルギー材料ハンドブックを紐解くと、「②制御すべき特性」は電子の運動特性であり、それを司る「③支配因子」として、バンドギャップ・伝導機構・空間電荷層・格子振動・結晶構造・不純物・欠陥などを挙げるができる。こうした解析は、他の「①材料特性の利用先」についても同様の分解を行うことができる。

以上の考えに基づき、データ空間を具体的に書きだしたのが、図 4 である。

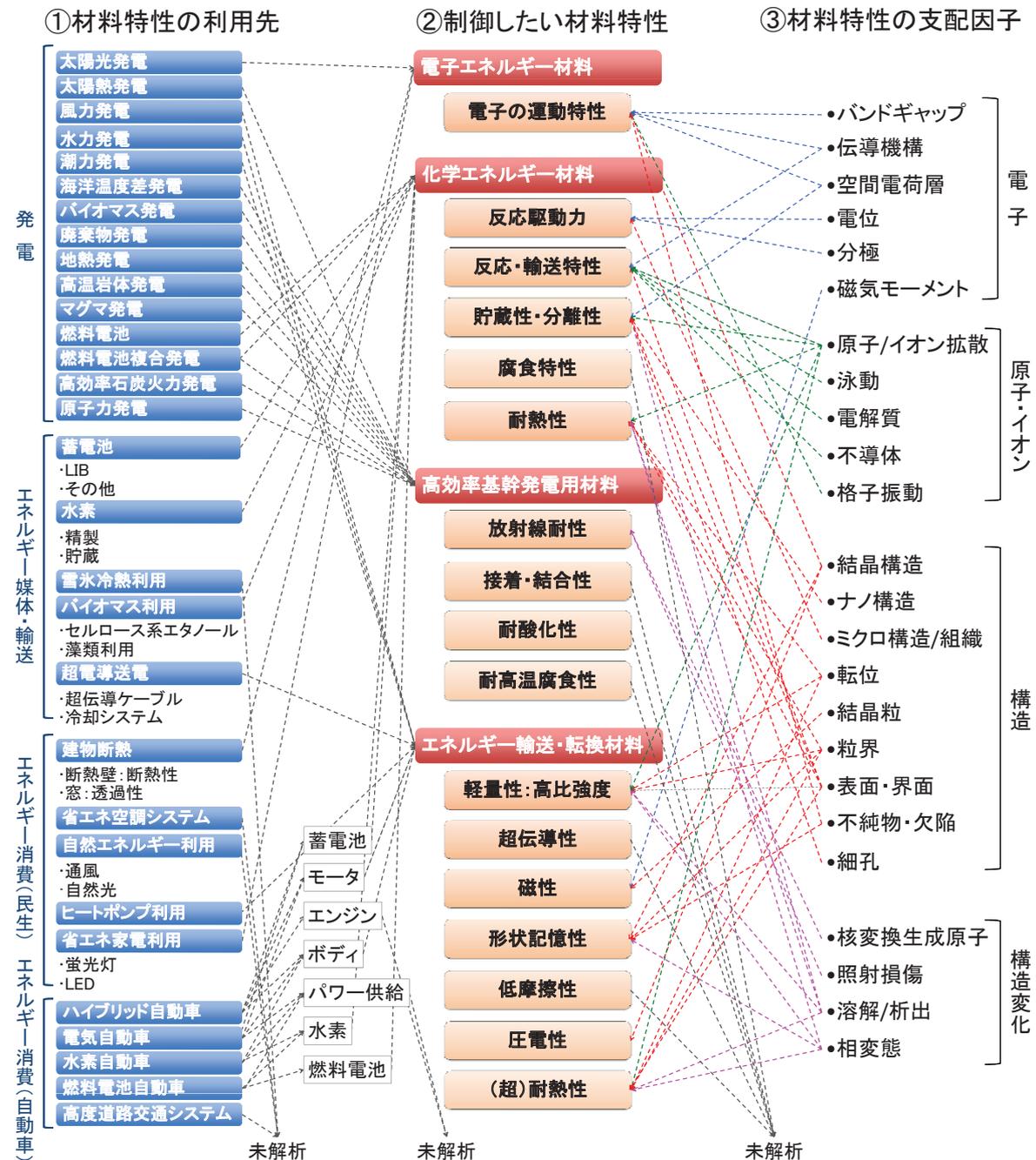


図 4 低炭素社会構築に資する材料の開発で用いられるデータ空間の俯瞰図  
(②-③の相関を示す線は、電子(青)、原子・イオン(緑)、構造(赤)、構造変化(ピンク))

①の要素および②の分類は、それぞれ「LCS 総合戦略シナリオ」[6] および「環境・エネルギー材料ハンドブック」[8]に基づく。①-②および②-③の要素間に引かれた線は、相関関係があることを示している。相関を読み取れなかった項目については、「未解析」として欄外にまとめた。②-③の相関を表す線は、支配因子をグループ化した概念ごとに、それぞれ「電子(青)」「原子・イオン(緑)」「構造(赤)」「構造変化(ピンク)」で着色している。なお、自動車については、構成部品に一度分解し、その部品ごとに制御したい特性との関係性を分析した。

## 2.2 俯瞰図に対する考察

本節では、得られたデータ空間の俯瞰図（図 4）について議論する。

まず分かることは、機能材料・構造材料の分類を超えて、①材料特性の利用先―②制御すべき特性―③支配因子、で記述される空間構造により、統一的に記述ができているということである。

さらに、低炭素社会構築に資する技術（①材料特性の利用先）は、太陽光発電から次世代自動車まで多岐にわたっているのに対し、それらを「②制御すべき特性」を介して「③支配因子」まで分解してみると、かなりの共通性が見られることである。こうした「③支配因子」の共通性の高さは、関連データを蓄積することの有効性、さらに、異なるデータを統合できる可能性、さらに、統合されたデータセットに対して、インフォマティクス手法等を活用したデータ分析により、他分野からのデータが別の分野に対し思いもよらぬ知見をもたらす可能性を示している。

そうした知見を効果的に得るためには、「②制御すべき特性」が技術の「①使用」という観点に結びつけやすい形で整理されていることが極めて重要である。今回の俯瞰図では、「LCS 総合戦略シナリオ」[6]に記述された「②制御すべき特性」を、「環境・エネルギー材料ハンドブック」[8]に書かれた分類に合わせこむ形で俯瞰図を書きだした。しかしながら、そこでの「②特性」の分類は、エネルギー輸送材料、高効率基幹発電材料など、材料別の適用先を強く意識したものとなっており、逆に言えば、想定外の適用先をこの俯瞰図から見出すことは困難である。こうした問題意識から、「特性」の記述について、より一般的な分類やその記述法を模索することができるはずである。しかし、材料特性を利用する立場と、それを確立する立場で共有できるような、一般性の高い共通の語彙はまだ未整備なのが現状であり、そうした記述法および語彙の整備が急がれる。

もし「特性」の階層が共通性の高い一般的な語彙で記述されたなら、「③支配因子」と「②特性」の間にデータ活用が期待できるのと同様に、「①使用」と「②特性」の間（①―②間）にもインフォマティクス等のデータ活用を期待することができるだろう。以下では、その意義について、述べてみたい。

同じ材料でも、使用目的に応じて特性を最適化することが、現代における材料の「使用」には不可欠である。このことに加えて、社会発展に伴い、技術が満たすべき必要条件はより増大するのが常であり、「低炭素社会構築」はそうした増大する必要条件の顕著な例として理解することができる。例えば、半導体業界で SEMI 規格として標準化されているように [9]、現代では製造プロセスにおける環境負荷を考慮せずに新技術を生み出すことは、社会的な制約上不可能である。さらには、もっと能動的に、固定価格買取制度のように、社会に対して「コト」をしかけて、それに沿う形で技術の備えるべき条件が定められることもあろう。

このように社会のあり方に応じて、技術のあり方、技術に求められるもの、技術が成立する諸条件は変化し、それを実現する「材料」の最適化目標も変わってゆく。つまり、「①使用」と「②特性」の関係性（①―②間）は、こうした変化を前提とすることが不可欠なのであり、このことは、自然現象の普遍法則を描き出したい「③発現因子」と「②特性」の関係性（②―③間）と対照的である。言い換えれば、普遍法則として書き出しにくい「①使用」と「②特性」の間におけるデータ活用は、「③発現因子」と「②特性」の関係性を解析対象とする場合よりも、むしろ本質的であると考えられる。

「使われてこそ材料」というスローガンがあるように、材料を考える際には、「①使用」の側面を欠かすことができない。これまでは、突き抜けるような特性、全く新奇な特性の発現を目指し、そうした新たな特性こそが、材料の適用範囲を開拓し、イノベーションを引き起こすものと考えて、研究が行われてきた。しかし、データ活用型材料研究の時代においては、制御すべき特性を最大化するためだけでなく、嗜好の複雑化や社会的制約の増大などが進む中で、もしくは、そうした嗜好や制約をイノベティブになるよう設計するなかで、適材適所の見極めを如何に効率的に行えるか、材料が「使われる」場面を左右することが容易に想像できる。「①使用」までを含

めたデータ空間の俯瞰作業は、そうした新たな「使われてこそ材料」の具現化に向けて、基本的視座を与えるものとして位置づけられるだろう。

### 3. まとめと今後の展開

本稿では、データ活用型材料研究のコンセプトと、LCS の定量的技術シナリオにおける技術分析を接続し、「使う」までを含めた材料研究で用いられるデータ空間を試行的に俯瞰した。そのデータ空間は、「①材料特性の利用先」と「③材料特性の支配因子」の二つの観点を、「②制御すべき特性」を介して結びつけることにより記述可能である一方で、「②制御すべき特性」の記述方法に検討の余地があることを明らかにした。

とくに求められることは、「①使用」に向けて効果的な特性の記述・分類方法の策定と語彙集の整備である。同時に、共有可能な語彙を整備することは、コミュニティ構築や国際連携を進める上でも考慮されるべき内容である。研究プロジェクトという形では実施が難しいこともあり、考慮がおろそかになりがちだが、データ活用型材料研究を遂行する上では、本稿で述べてきたように、データのみならず語彙の整備も、同等もしくはそれ以上に重要であることを強調したい。なお、こうした基盤的な環境整備は、オープンイノベーション推進のための「場」作りそのものであり、ハブ拠点を中心として、特性の記述・分類方法の策定と語彙集の整備を推進するようなプログラムの設置と遂行を本稿では提案したい。

これらの施策によりデータ空間の記述を充実させた先には、低炭素社会構築に重要な材料について、LCS と共同で経済・環境定量評価に結び付ける活動が広がることを述べて、本稿の結びとさせて頂く。

### 参考文献

- [1] JST-LCS イノベーション政策立案のための提案書, 低炭素社会実現に向けたデータ活用型材料研究, LCS-FY2014-PP-12 (2014).
- [2] 内閣府 総合科学技術・イノベーション会議 科学技術イノベーション総合戦略 2015 (2015).  
<http://www8.cao.go.jp/cstp/sogosenryaku/2015/honbun2015.pdf>
- [3] NIMS プレスリリース (2015.6.11).  
<http://www.nims.go.jp/news/archive/2015/06/201506110.html>
- [4] JST 戦略的創造研究推進事業, さきがけ領域, 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.  
[http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research\\_area/ongoing/bunyah27-4.html](http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html)
- [5] 第 5 期科学技術基本計画 (2016).  
<http://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/5honbun.pdf>
- [6] JST-LCS 「低炭素社会作りのための総合戦略とシナリオ」 (2014).  
<http://www.jst.go.jp/lcs/documents/publishes/scenario01.html>
- [7] JST-LCS イノベーション政策立案のための提案書, 太陽光発電システム—要素技術の構造化に基づく定量的技術シナリオと科学・技術ロードマップ—, LCS-FY2013-PP-02 (2013).
- [8] 物質・材料研究機構 監修, 環境・エネルギー材料ハンドブック, オーム社 (2011).
- [9] SEMI ホームページ.  
<http://regions.semi.org/jp/>

---

---

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 (Vol.2)

平成 28 年 3 月

**“Materials Research with Data-Utilization toward Implementation  
of Low-Carbon Society (vol.2)”**

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,  
2016.3

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

---

### 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  
<http://www.jst.go.jp/lcs/>

© 2016 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。