

未来社会創造事業 探索加速型探索研究

事後評価結果

1. 領域

「共通基盤」領域

2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

3. 研究開発課題名

数理科学を活用したマルチスケール・マルチモーダル構造解析システム

4. 研究開発代表者名(機関名・役職は評価時点)

小野 寛太(高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 准教授)

5. 評価結果

本課題の探索研究期間において、当初の目標として設定した最適な計測条件を自動で策定する方法論の確立、シグナル／ノイズ比の低い計測データからの情報抽出、計測データ解析の自動化、深層学習を用いたマルチスケール・マルチモーダル計測データの統合について、目標を達成し、本格研究にあたって必要な要素技術を実証したことを高く評価する。特に材料探索空間について、材料研究の全体像を俯瞰し、研究戦略を検討可能とするマテリアル空間の地図の作成に成功したことは特筆すべき成果と考える。また、結晶構造データ解析の自動化という非常に困難な課題解決へ挑戦した。さらに、本格研究へ向けてオムロンサイニック エックス社との共同研究を進化させ、深層学習によるマルチモーダル構造解析を達成するなど体制の充実も精力的に行った。世の為、人の為に本課題がどのような新しい価値を提供しているのかについて、マテリアル空間の地図によって、膨大とも言える探索空間と、材料研究の方法論の革新の必要性や、さらに効率的な探索が可能ということを明らかにした。また、国内外の動向把握も着実に実施してきた。

以上のような、探索研究期間での活動および成果によって、当初の計画は順調に進捗しており、今後の研究開発の進展についても大きな期待が持たれる。

以上