

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

超広域材料探索を実現する材料イノベーション創出システム

研究開発代表者： 谷池俊明 北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科 教授

共同研究機関： 北海道大学, 株式会社日本総合研究所



目的：

ハイスループット実験技術とデータ科学技術を連動させた、材料イノベーション創出システムを構築する。前知見を一切必要としない超高効率な材料シーズ創出を実現し、研究開発現場の生産性・創造性を革新する。

研究概要：

- 高難度な材料開発に迅速さが要求される現在、研究開発の現場では、既知に囚われず材料シーズを発見するための系統的な方法論と基盤技術を欠いている。
- 本研究開発では、広大な材料空間から前知見無しで材料シーズを効率的に発見するための材料イノベーション創出システムを構築し、材料シーズの発見をもってこれを実証する。また、システムの社会普及と人材育成を担う事業体を構想し、その土台となるコンソーシアムを設立する。
- 研究開発の生産性・創造性を革新し、素材・材料産業における競争力を飛躍的に高める。研究者は、単調な類型作業から来る疲弊や停滞から解放され、ワークライフバランスを維持したまま、創造的な頭脳労働に、リソースを割くことができるようになる。

材料イノベーション創出システム：

広大な材料空間から前知見無しで材料シーズを効率的に発見



サンプリング

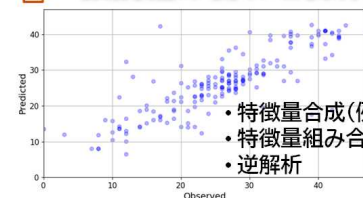
- ①データ取得:ランダム
- ②データ補強:最遠点
- ③シーズ創出:推薦システム



ハイスループット実験



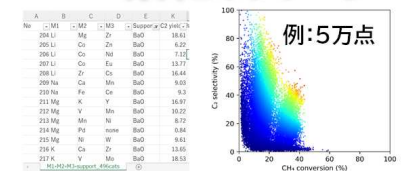
仮説組み合わせ探索



- 特徴量合成(例: 10^6 特徴量)
- 特徴量組み合わせ探索
- 逆解析



バイアスを含まない材料ビッグデータ



Realization of common platform technologies, facilities and equipment that create innovative knowledge and products

System for materials innovation creation exploring vast materials space

Project Leader : Toshiaki TANIIKE

Professor, Graduate School of Advanced Science and Technology,
Japan Advanced Institute of Science and Technology

R&D Team : Hokkaido University, The Japan Research Institute, Limited



Summary :

Linking high-throughput experimentation and data science technologies, we develop a system for materials innovation creation. The system realizes efficient discovery of material seeds without requiring any prior knowledge, thereby innovating the productivity and creativity of R&D sites.

While speed is required for advanced material design, R&D sites lack systematic methodologies and fundamental technologies necessary to discover material seeds. In this project, we will develop a system for innovative materials creation aimed to efficiently discover material seeds from a vast materials space without requiring prior knowledge. We will also establish a consortium as a platform for social implementation and for human resource development. Such developments will revolutionize the productivity and creativity of the R&D sites. Researchers will be freed from menial labor, and able to devote their resources to creative works.

System for materials innovation creation: Efficient discovery of material seeds without prior knowledge



1. **Data curation :** Random
2. **Data enhancement :**
Farthest point sampling
3. **Material seeds :** Recommender

