

# Materials Informatics の現状と課題

本論文は、日本技術士会中国本部会報 No. 12 (平成 28 年 9 月) に寄稿した論文である。

本稿は平成 28 年度中国本部・機械部会・講演会(平成 28 年 6 月 25 日)で講演した内容に加筆修正を加え編集したものである。

## 1. はじめに

Materials Informatics (以下、MI と略記) を日本語に訳せば、「材料情報学」もしくは「材料情報科学」となるが、日本語訳からその内容を理解することは難しい。MI とは「材料ビッグデータと情報科学が融合した新しい材料開発システム<sup>1)</sup>」で、旧来の材料開発のあり方を根底から覆す画期的なシステムとなる可能性を秘めている。

本講演では、MI の定義・意味、日本における MI 動向、海外の MI 動向及び日本の MI システム構築の課題について解説する。

## 2. MI による材料開発の萌芽

図 1 に日本における MI 関連の動向を示す。MI の萌芽は 2004 年の箱根会議で生まれた日本オリジナルコンセプトの「元素戦略」にある<sup>2)</sup>が、MI を意識した元素研究でなかった。2010 年、中国・レアアースショック (希土類金属禁輸措置) をきっかけに、資源・材料問題に対する欧米諸国の政策がガラッと変わった。2011 年、米国が米国版元素戦略とも言える「Materials Genome Initiative (MGI)」の提唱<sup>3)</sup>をきっかけに、世界各国で同類の新しい材料開発への取組みが始まった。我が国では、2012 年、新元素戦略プロジェクト (研究拠点形成型)、さらに 2015 年、日本政府主導・産学官連携による統合型材料開発システム、具体的には「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」がスタートし<sup>4)</sup>、MI を意識した

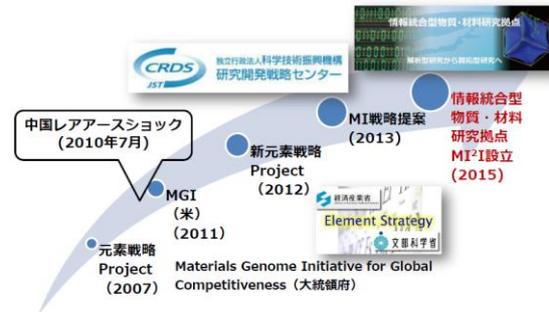
広島県 金属部門

氏名 川本 明人

所属 化学/繊維/金属部会 幹事



本格的活動が始まった。



## 3. 材料開発4つの手法

人類の文明は材料の歴史とその歩みを共にし、文明の礎には必ず材料がある。材料とは人間社会に有用な物質であり、金属、セラミックス、高分子及びそれらの複合材料に分類される。我々がほしいのは「材料」ではなく、材料のもつ「機能」である。材料の機能は、元素 (種類・量) と構造 (微細組織) に依存し、元素と構造との相互作用によって発現する。そのため、構造 (微細組織) 制御が必要な材料開発では、膨大な開発期間とコストを要する。

表 1 に示すように、材料開発は人間の経験と勘によるものとコンピュータ (AI : 人工頭脳) によるものに大別される。実験科学と理論科学は人の経験と勘、計算科学とデータ科学はコンピュータ (AI) に依存し、理論科学と計算科学は演繹的、実験科学とデータ科学は帰納的と、4つに分類される。データ科学とは複雑あるいは大量のデータから何らかの特徴的なパターンを発見し、有効な知識を得るための工学的手法であり、黎明期にある。このデータ科学が MI である。

表1 材料開発4つの手法

| 種類  | 人の経験と勘          | コンピュータ(AI)       |
|-----|-----------------|------------------|
| 演繹的 | 理論科学<br>(第2の科学) | 計算科学<br>(第3の科学)  |
| 帰納的 | 実験科学<br>(第1の科学) | データ科学<br>(第4の科学) |

#### 4. MI とは何か

JST/CRDSによる定義<sup>1)</sup>によれば、MIとは「計算機科学（データ科学、計算科学）と物質・材料の物理的・化学的性質に関する多様で膨大なデータとを駆使して、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」と記述されている。もう少し簡単に言えば、「膨大な材料ビックデータから、情報科学の力を利用して、新しい機能材料を短期間・低コストで開発できる材料開発手法」となる。例えば、「花咲じいさん」のシロの役割で、「ここ掘れワンワン」で支援する探索型材料設計手法と言えるだろう。

MIは計算科学同様、コンピュータを利用するが、その利用方法が異なる。計算科学の場合、理論や物理モデルに基づき、例えばある境界条件下で微分方程式を数値解析的に解くと言ったものである。他方、MI（データ科学）の場合、膨大な材料ビックデータから、データマイニングで解析し、ある機能をもつ候補材料を抽出するもので、そこには数学モデルはあるが、理論・物理モデルはない。簡単に言えば、課題（機能）に対する目的（候補材料あるいは機能発現因子）の相関性の有無を抽出するだけで、その相関性が物理的意味をもつか否かは実験科学、理論科学そして計算科学で検証する必要がある。このように、MIだけで合理的・効率的な材料開発が可能になる訳ではなく、MIは材料開発の一つの手法であり、機能と候補材料あるいは機能とその発現因子の相関性の有無や機能の発現機構を考察するヒントが得られ、材料開発の初期段階における期間短縮になる。

#### 5. 日本の MI 動向

表2に官発行資料におけるMI関連内容を示す。第5期科学技術基本計画概要によれば、超スマート社会の実現（Society5.0）の施策の一つとして統合型材料開発システムの構築を掲げており、その概要が平成28年度版科学技術白書にまとめられている。

表2 官発行資料におけるMI関連内容

| 官発行資料                      | MI関連内容  |
|----------------------------|---|
| 第5期科学技術基本計画概要【内閣府】         | 【第2章】世界に先駆け「超スマート社会の実現」(Society5.0) 統合型材料開発システムの構築  |
| 科学技術イノベーション総合戦略2016概要【内閣府】 | 【第2章】統合型材料開発システム(高信頼性材料データベースの構築、データベースを活用した材料開発技術の確立、高速で高効率な材料試作・計測・評価技術の確立)                                   |
| 平成28年版科学技術白書概要版【文部科学省】     | 【第一部 第2章】科学研究におけるパラダイムシフト ビッグデータ解析やAI等を活用し、他の研究者が生み出した膨大な学術情報等を効果的に活用するなど研究手法に変革                                |
| 革新的構造材料パンフレット【内閣府】         | 材料科学の成果や経験知の活用と共に、データベース・実験・シミュレーション解析・ビックデータなどの最先端の情報科学・科学技術を融合し、材料開発を工学的な視点に立って支援する総合的なシステム。「マテリアルズインテグレーション」 |

【参考資料】

- 第5期科学技術基本計画概要  
(<http://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/index5.html>)
- 平成28年版科学技術白書概要版  
([http://www.mext.go.jp/b\\_menu/hakusho/html/hpaa201601/1362981.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/hakusho/html/hpaa201601/1362981.htm))
- 科学技術イノベーション総合戦略2016概要  
(<http://www8.cao.go.jp/cstp/sogosenryaku/2016.html>)
- 革新的構造材料パンフレット  
(<http://www.jst.go.jp/sip/k03.html>)

2015年、日本政府主導・産学官連携による「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI<sup>2</sup>I)」がスタートした<sup>4)</sup>。この国家プロジェクトは、文部科学省・物質・材料研究機構(NIMS)を研究拠点とした統合型材料開発システムの構築である。実験科学・理論科学・計算科学の従来手法に、データ科学の手法を取り込むことで、機能材料の開発を加速し、産業イノベーションの創出につなげることを目的としている。出口戦略(課題)は、社会的に波及効果の高い材料開発、具体的には蓄電池材料、磁性材料、伝熱制御・熱電材料の

開発にある。

## 6. 各国の MI 動向<sup>5, 6)</sup>

表3に海外のMI動向を示す。米国ではMaterials Genome Initiative (MGI) を立ち上げ、製造業の国際競争力強化を目的に、政府主導で様々なプロジェクトを統合し、データ科学の強みを活かした施策を展開中である。欧州ではMaterials Science and Engineering Expert Committee (MatSEEC) を組織して、マルチスケール計算材料学の確立に注力している。中国や韓国の施策は米国MGIのモノ真似である。

表3 海外のMI動向

| 国  | 概要   |
|----|--|
| 米国 | Materials Genome Initiative・MGI(2011)、製造業の国際競争力強化(材料研究の重点化)、材料開発-商品化の期間を半分に短縮、米国政府がMGI関連プロジェクトを統合、データ科学が強み |
| 欧州 | Computational Materials Engineering、マルチスケール計算材料学の確立、シミュレーションに特化(デファクト標準化、ソフトウェア産業で優位)                      |
| 中国 | China MGI(2011)、米国MGIのモノ真似(米国との連携強化、米国大学から教授を招聘)<br>中国科学院・中国工学院が連携・着手                                      |
| 韓国 | Creative Materials Discovery Project(2015-2024、韓国科学技術院)、「フォローからリーダーへ」が目的                                   |
| 日本 | MI <sup>1</sup> 研究開発拠点(NIMS,2015)、データベースに強み(NIMS,MatNavi)、SIP 革新的構造材料と連携、鉄鋼インフォマティクス研究会(2014~2017)         |

## 7. MIシステム構築の課題(日本)<sup>5, 6)</sup>

表4に日本におけるMIシステム構築の課題を示す。課題は①材料データプラットフォームの構築、②MIシステム運用の制度・ルールの構築、③MIシステムの標準化、④MI有用性の検証、⑤サイバーセキュリティ、⑥人材育成である。日本は海外に比べ、システムの標準化(デファクト標準化、国際標準化)及びデータ科学者の育成が遅れている。

表4 MIシステム構築の課題(日本)

| 課題               | 概要  |
|------------------|---|
| 材料データプラットフォームの構築 | データベース形式の標準化、データベースの充実、材料ビックデータの検索・分析・解析・可視化ツール(ソフト)の開発 |
| MI運用の制度・ルールの構築   | データの公開・非公開ポリシー(組織の知的財産保護)、MIシステム利活用ポリシー                 |

|            |  |
|------------|--|
| MIシステムの標準化 | デファクト標準化、国際標準化                                     |
| MI有用性の検証   | 研究開発成功例・失敗例の蓄積とその要因分析                              |
| サイバーセキュリティ | 超スマート社会サービスプラットフォームの基盤技術の開発・構築                     |
| 人材育成       | データサイエンティスト、材料サイエンティスト(材料科学+情報学、探索型研究センス・セレンディピティ) |

## 8. 結言

日本のMaterials Informatics構築の取組は緒についたばかりである。海外に比べ、材料データベース(NIMS/MatNavi)では一歩リードしているものの、MIシステムの標準化やデータ科学者の育成などでは後れをとっている。産官学連携によるオールジャパン体制でのMIシステムの早期実用化は、日本の材料開発力向上だけでなく、製造業全体の国際競争力発展に貢献するものと期待される。

### 【参考文献】

- 1) JST/CRDS 作成、戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進(マテリアルズ・インフォマティクス)」(2013.8月)  
<http://www.jst.go.jp/crds>
- 2) 「Newton」2014年11月号「現代の錬金術-新材料をつくりだせ!世界をリードする元素戦略で脱レアメタルへ」  
<http://www.newtonpress.co.jp/>
- 3) Materials Genome Initiative (MGI)  
<https://www.whitehouse.gov/>
- 4) 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ  
<http://www.nims.go.jp/MII-I/>
- 5) 広報誌「NIMS NOW」, Vol. 16, No. 2 (2016)  
<http://www.nims.go.jp/publicity/nimsnow/>
- 6) 大楠恵美著、「マテリアルズ・インフォマティクスが変える材料開発」, 三井物産戦略研究所レポート(2015年12月)  
[http://mitsui.mgssi.com/issues/report/list\\_report15.php](http://mitsui.mgssi.com/issues/report/list_report15.php)