

データ駆動型材料設計技術 利用推進コンソーシアム



国立研究開発法人
産業技術総合研究所

代表挨拶

我が国の機能性材料の開発・製造を担う部材産業は、機能性化学分野を中心に高いシェアを確保しており、部材・素材においても我が国が中核的な地位を占めている状況にあります。今後も世界トップを走り続けていかなばなりません。

しかし、従来の機能性材料開発は、蓄積してきた多くの材料の実験・評価データを踏まえて、「経験と勘」に基づく仮説を立て、それを実験によって検証しながら、時間をかけて進められてきました。

NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(2016-2021年度)では、このような状況を打破すべく、「経験と勘」による非効率な開発プロセスを刷新し、高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術及び先端ナノ計測評価技術を駆使して、革新的な材料開発の基盤技術を構築するべく開発を進めてまいりました。

本コンソーシアムは、このプロジェクトにおける成果を広く利用していただくために設立いたしました。材料開発の飛躍的なスピードアップとともに、「経験と勘」に基づいた材料開発からデータに基づく材料開発への変革に貢献できればと考えています。



(国研)産業技術総合研究所 材料・化学領域 領域長
データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 会長

濱川 聡

材料開発の革新に向けた国内外の状況

内閣府：「戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)」の「革新的構造材料」(2014年～)では、「マテリアルズインテグレーション」領域で材料開発期間を一桁短縮する取り組みが行われている。

科学技術振興機構：「イノベーションハブ構築支援事業」の「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」(2015-2019年度)において、膨大なデータ蓄積と最先端情報科学を駆使した解析を組み合わせた開発基盤の構築が図られている。

米国：2011年のマテリアルズ・ゲノム・イニシアチブ (MGI)により、最先端素材の開発から市場導入までの時間半減を目標に掲げ、デジタルデータ活用による素材開発基盤の高度化を推進している。

欧州：「Horizon 2020」では「Novel Materials Discovery (NoMaD)」プロジェクトが推進され、第一原理計算による材料データ収集と、データベースとビッグデータ分析ツールの開発を推進している。

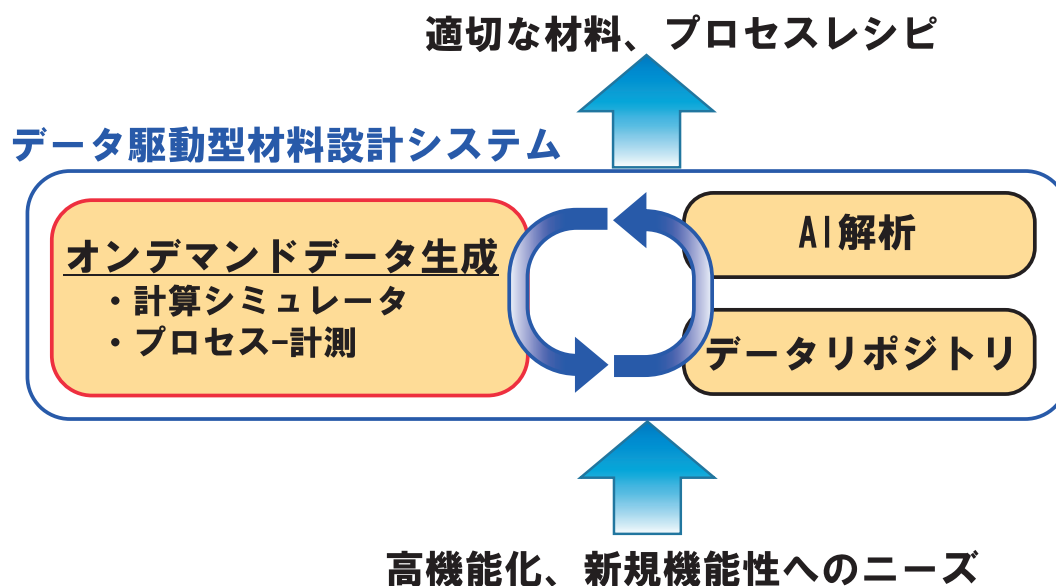
韓国：「第3次科学技術基本計画 (2013年)」で、材料技術を重点国家戦略技術に位置付け、ナノテク・材料分野の研究を推進し、「素材・部材」を含む課題を「未来産業エンジン」として支援している。

中国：「国家中長期科学技術発展計画 (2006-2015年)」で重点分野として「素材 (新材料技術・ナノ研究)」を指定し、「第12次5ヵ年計画要綱 (2011-2015年)」では戦略的振興産業として「新素材」を指定して、新材料の研究開発と産業化を推進している。

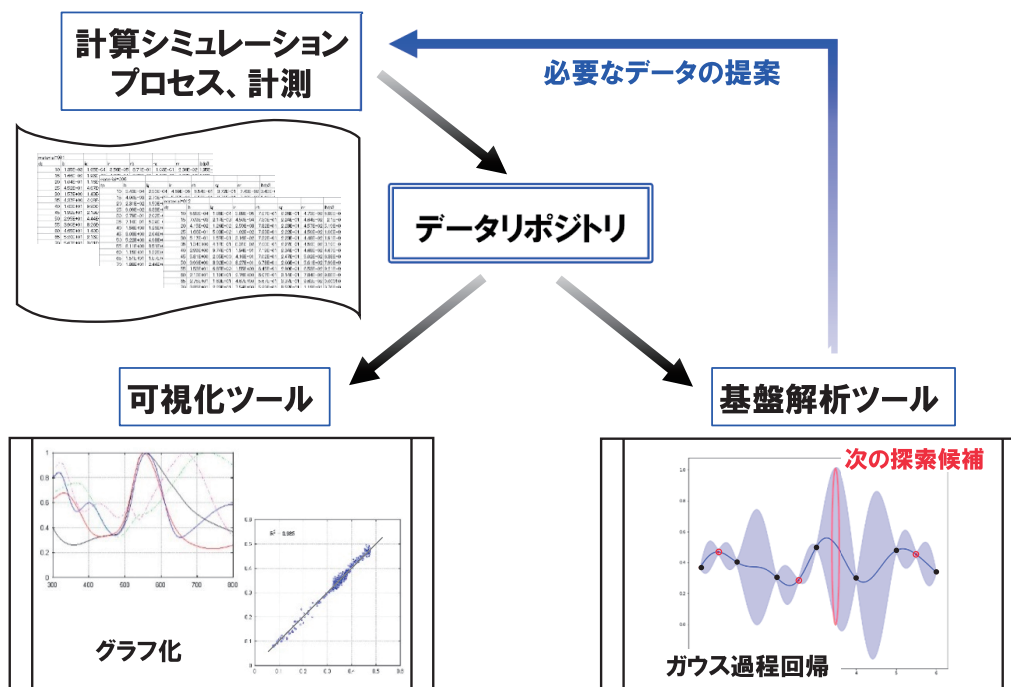
NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」基本計画より抜粋

新しい材料開発の潮流

- ◇ 材料開発の飛躍的なスピードアップ
- ◇ “経験と勘” に基づいた材料開発文化からの変革



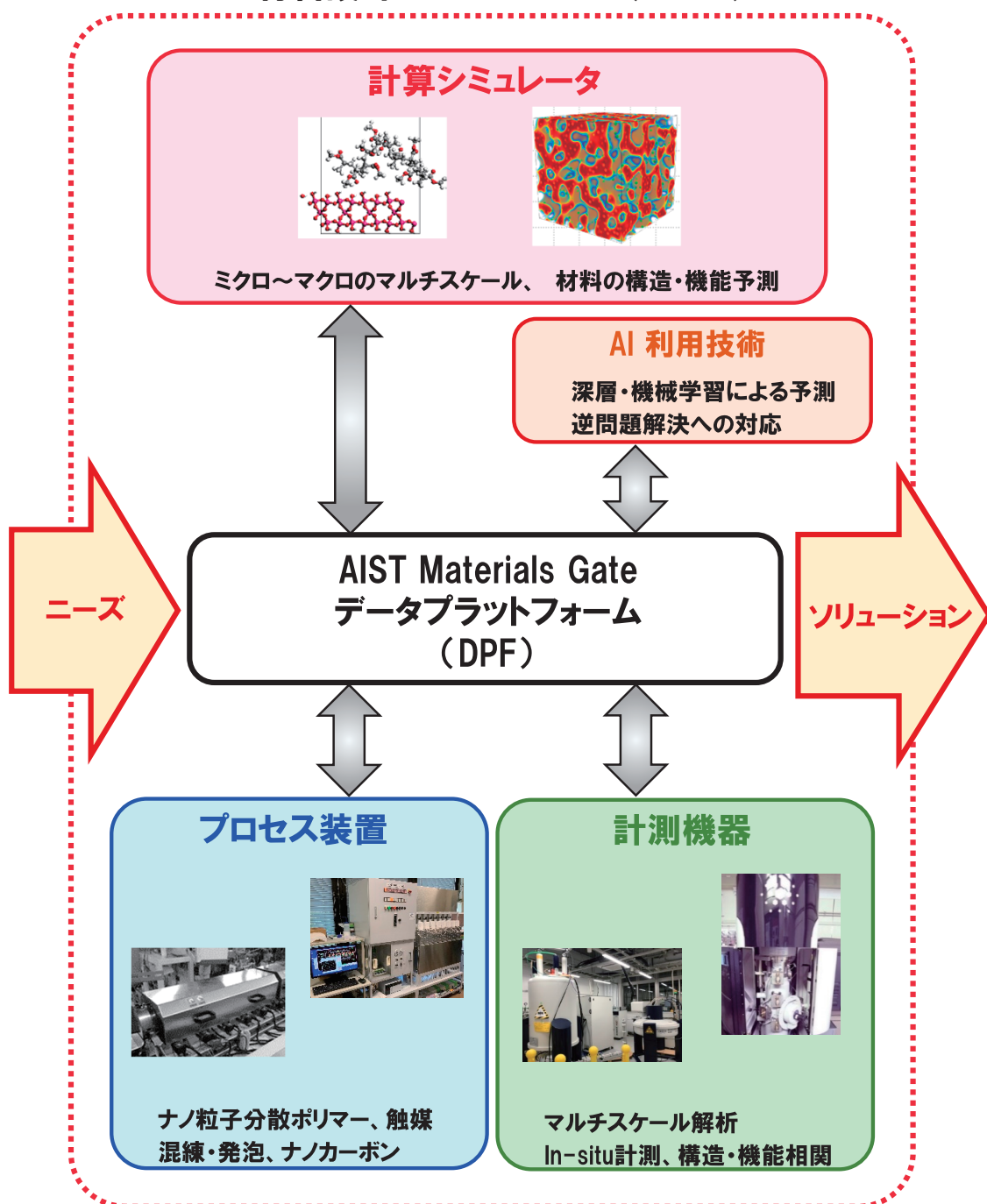
本コンソーシアムを利用した材料設計の例



材料設計プラットフォーム（MDPF）を利用した材料開発の加速

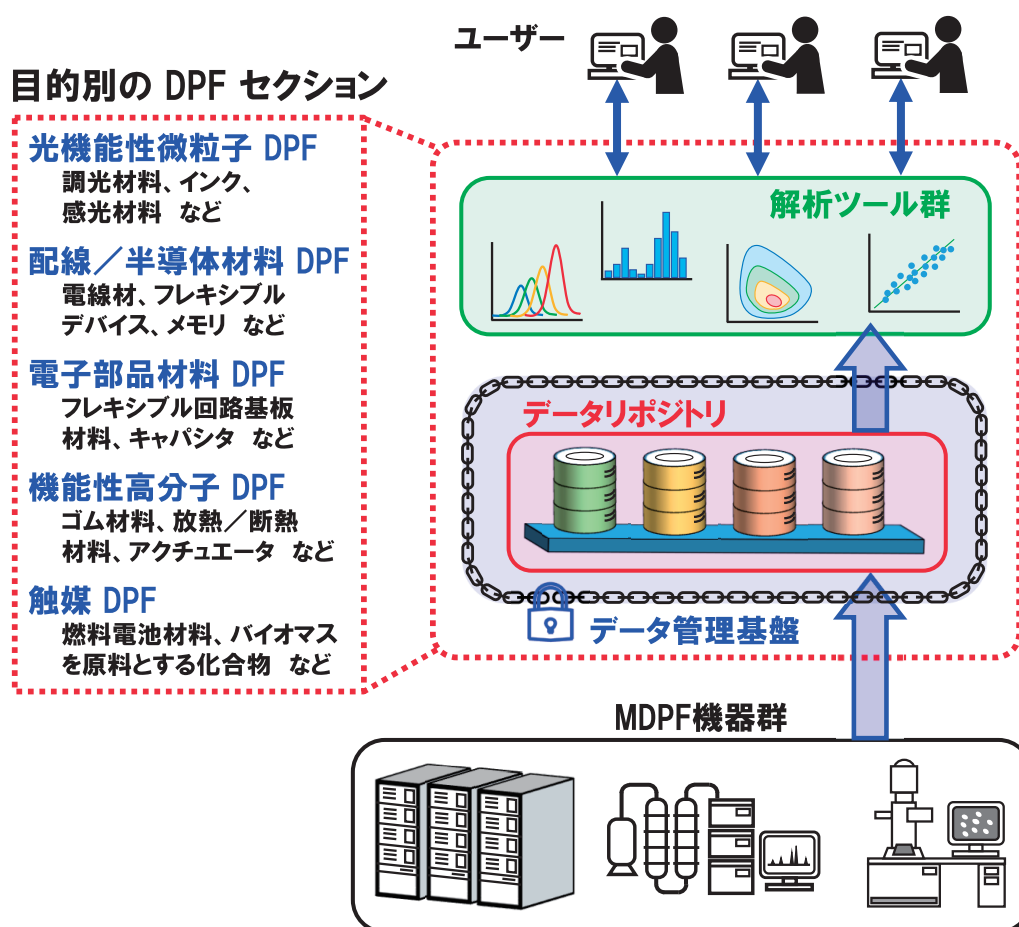
- ◇ 計算シミュレータ、プロセス・計測装置群からの **オンデマンドデータ** を利用して、材料開発レシピの提供を加速

材料設計プラットフォーム（MDPF）



AIST Materials Gate データプラットフォーム (DPF)

- ◇ DPF を利用し易くするために目的別に整備
- ◇ データに対するセキュリティを最重要視
- ◇ 解析ツールによるデータ可視化と有用情報の抽出



解析ツールの特長

- ☆ 学習用データから特徴量を抽出
- ☆ 未知の材料に対する予測モデルの構築
- ☆ 予測モデルを用いた逆予測
- ☆ 構築した予測モデルを別の機能予測に転用（転移学習）

会員種別とサービス内容

種別	一般 A 会員	一般 B 会員	特別会員 [※]
サービス 内容	① セミナー、技術交流会への参加 ② 個別課題に対応した技術コンサル・共同研究の窓口		
	③ DPF の利用 ④ 外部データベース のワンストップ利用		③ DPF の利用 ④ 外部データベース のワンストップ利用
年会費	¥ 1,000,000	¥ 300,000	¥ 0

[※] 大学や公的機関等の個人、団体

|| サービスの詳細 ||

① セミナー、技術交流会による最新情報の提供 **全会員**

- データ駆動型材料開発に関する最新の研究動向、成果などの情報提供
- 目的・対象者でレベル分けし、ニーズに応じたセミナー等を主催
 <例> ● シミュレータの機能や事例、プロセス・計測装置の活用事例の紹介
 ● DPF 利用説明会（ハンズオン含む） など

② 技術コンサルティングの窓口、および共同研究のマッチング **全会員**

- 会員から持ち込まれた個別課題に対して、技術コンサルや共同研究により解決へ

③ データプラットフォーム（DPF）利用と、チュートリアルによる 実習・人材育成 **一般 A 会員・特別会員**

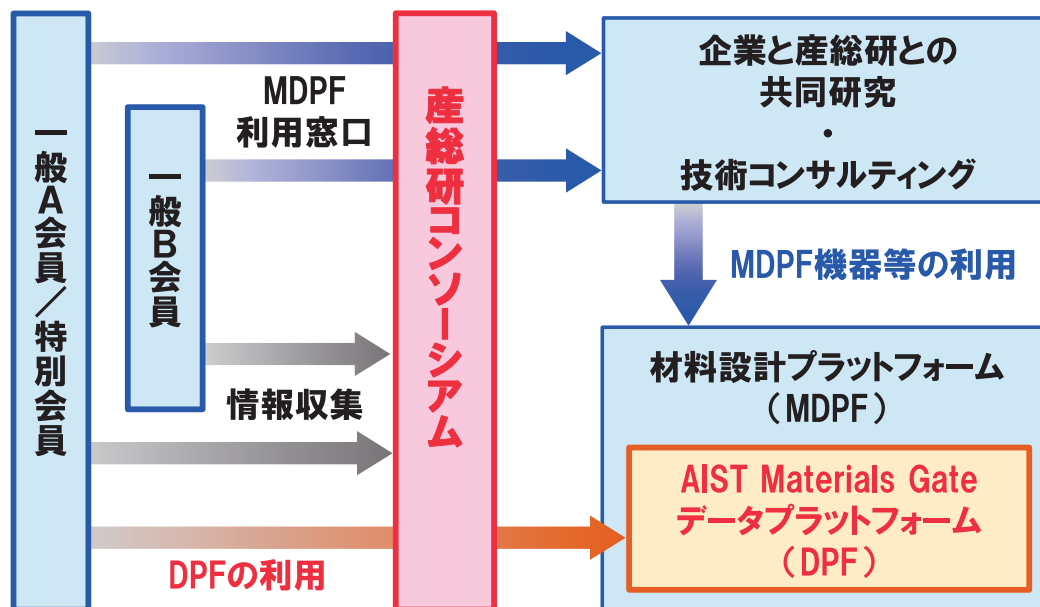
- 5 つの目的別 DPF が利用可能
- 基礎的な利用方法についてのチュートリアル提供

④ 外部データベースのワンストップ利用 **一般 A 会員・特別会員**

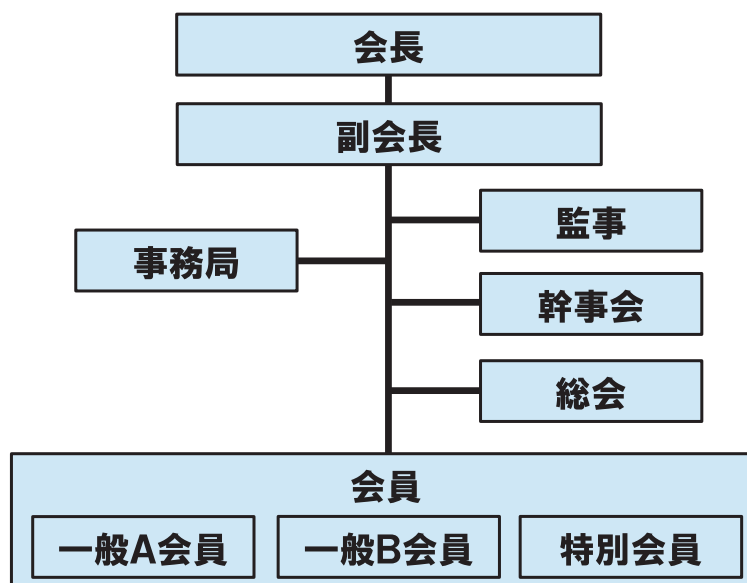
- 材料研究に関わる産総研内外のデータベースへのインターフェース提供

産総研コンソーシアムを通じた MDPF、DPF の利用スキーム

- ◇ MDPF の利用窓口としてのコンソーシアム
- ◇ マテリアルズインフォマティクス (MI) に関する最新情報の収集



コンソーシアム運営体制





国立研究開発法人

産業技術総合研究所

データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第2

国立研究開発法人産業技術総合研究所

材料・化学領域 機能材料コンピューティショナルデザイン研究センター

データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 事務局

E-mail: M-cdmd-office-ml@aist.go.jp