

<オープンサイエンスを巡る世界の最新動向>

■ マテリアルサイエンス分野

国立研究開発法人物質・材料研究機構

統合型材料開発・情報基盤部門

情報統合型物質・材料研究拠点／材料データプラットフォームセンター

伊藤 聡 ITOH.Satoshi@nims.go.jp

2017年6月26日

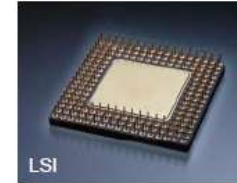
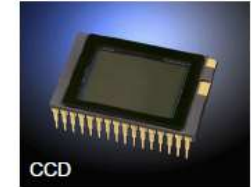
変革する物質・材料研究開発

これまでの
物質・材料科学
(理論・実験・計算)
演繹的手法

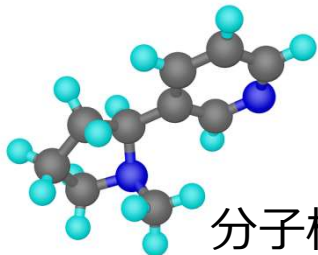
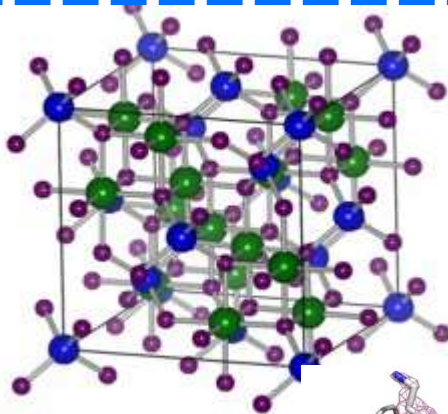


$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + w(\vec{r}) \right] \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r})$$

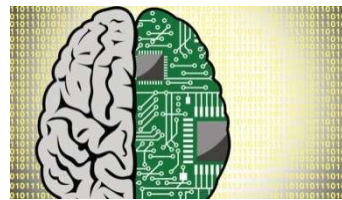
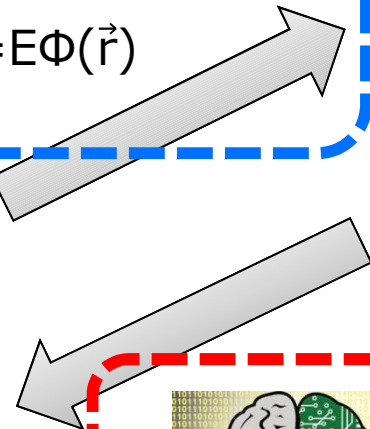
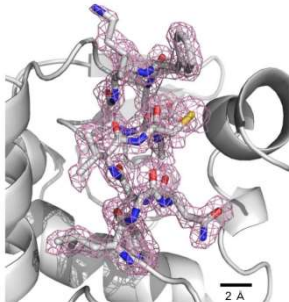
基礎科学の研究が生んだ現代の科学技術



結晶構造



分子構造

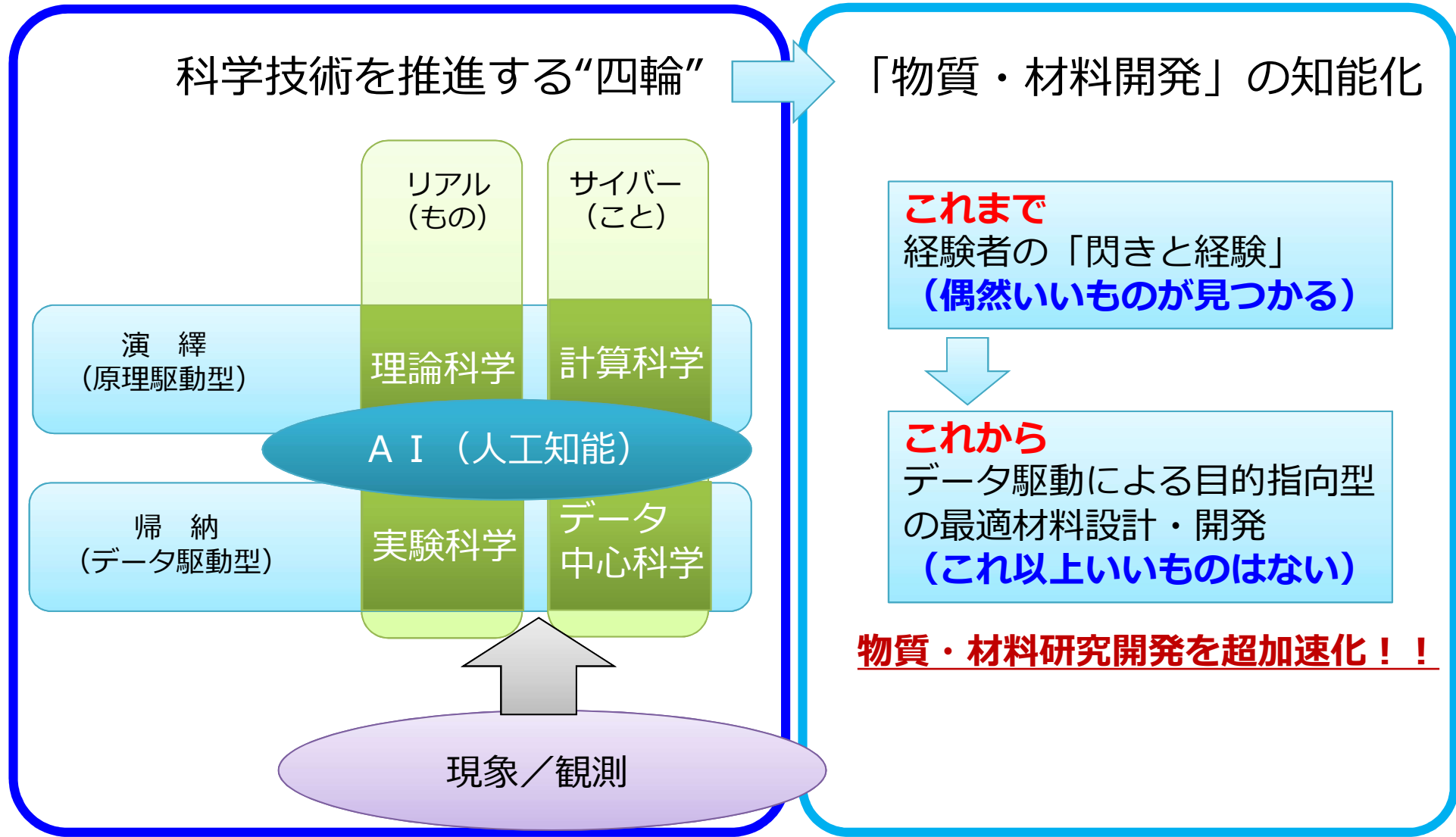


帰納的手法
機能的手法

マテリアルズ・イン
フォマティクス
(材料情報を駆使)



変革する物質・材料研究開発



変革する物質・材料研究開発

Home • About the Materials Genome Initiative

2011年6月



Materials Genome Initiative

[About](#) | [Goals](#) | [Examples](#) | [News & Announcements](#) | [Federal Programs](#) | [External Stakeholder Activities](#) | [Contact Us](#)

To help businesses discover, develop, and deploy new materials twice as fast, we're launching what we call the Materials Genome Initiative. The invention of silicon circuits and lithium-ion batteries made computers and iPods and iPads possible -- but it took years to get those technologies from the drawing board to the marketplace. We can do it faster.

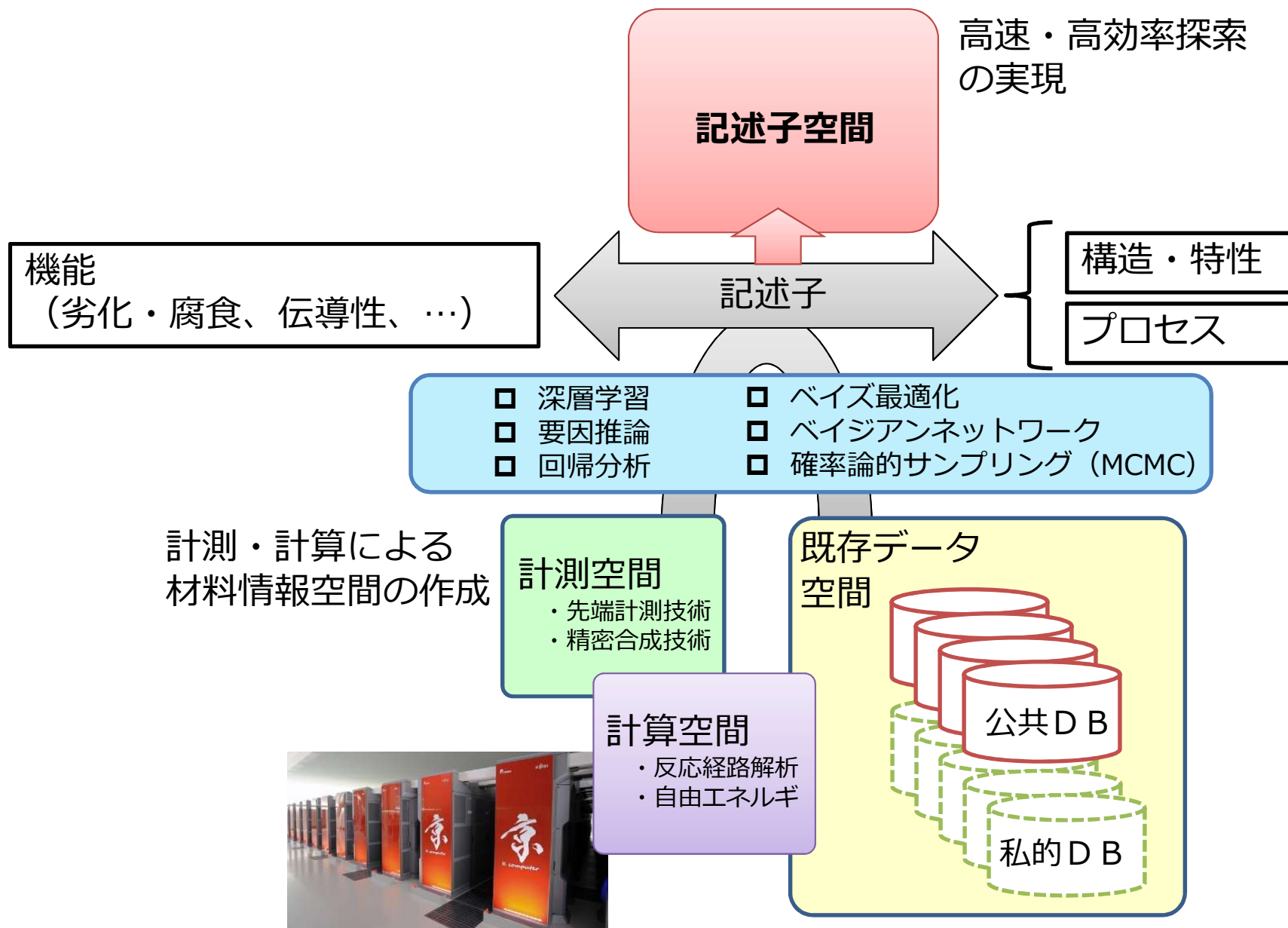
— President Obama, June 2011 at Carnegie Mellon University



JST-CRDS 科学技術未来戦略ワークショップ～新材料設計・探索～報告書
/CRDS-FY2006-WR-01
『マテリアル・インフォマティクスの構築』を提言

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I) (2015年7月～)

物質から材料へ ～ データ空間の創出 ～



物質から材料へ ～ データ空間の創出 ～

計算データ空間の拡大動向（国内外プロジェクト）

AFLOW: Automatic FLOW for Materials Discovery

<http://www.aflowlib.org/>

The Materials Project

<https://materialsproject.org/>

NoMAD: The Novel Materials Discovery

<https://www.nomad-coe.eu/>

MARVEL: Materials' Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials

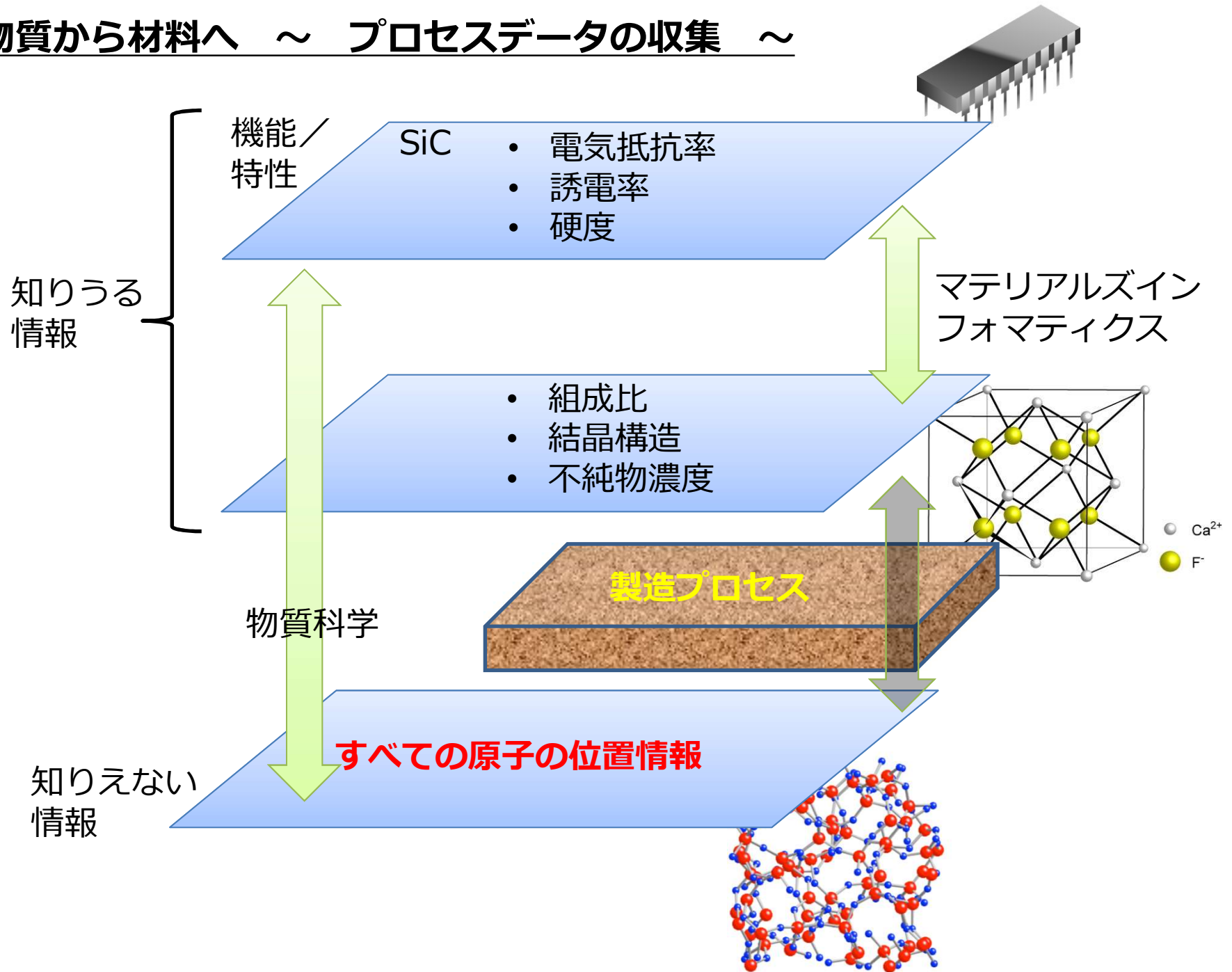
<http://nccr-marvel.ch/>

MatNavi:

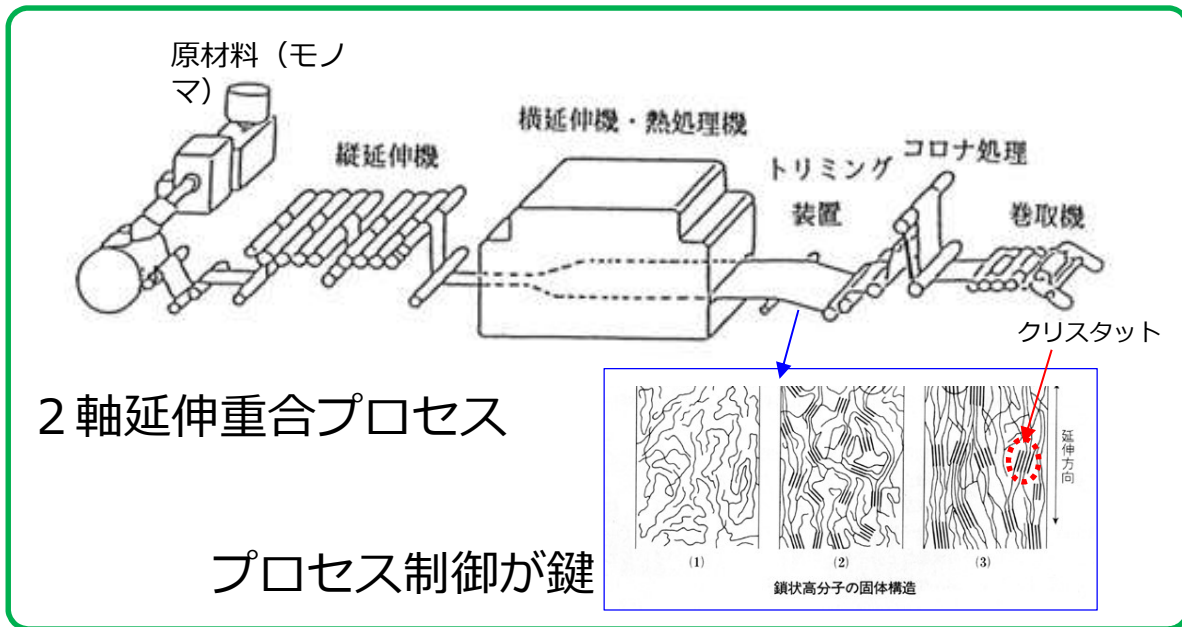
<http://mits.nims.go.jp/>

- 電子構造計算データベース (CompES-X)
- 計算状態図データベース (CPDDB)

物質から材料へ ～ プロセスデータの収集 ～



物質から材料へ ～ プロセスデータの収集 ～



同一組成でもプロセスが異なれば得られる特性は異なる



プロセスデータの収集が必要



“電子カルテ”方式（実験機器データログシステム／研究者向け電子実験ノート）

データの階層 (NISTの整理)

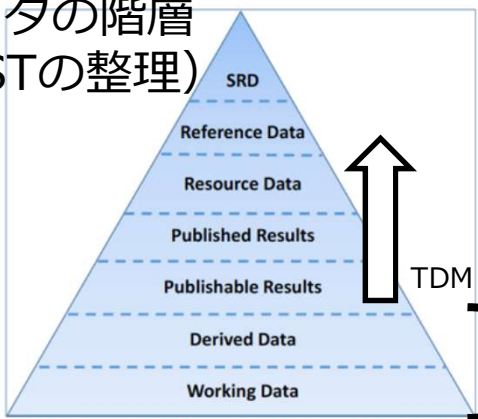
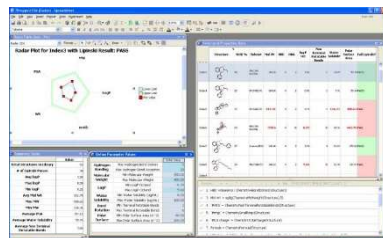
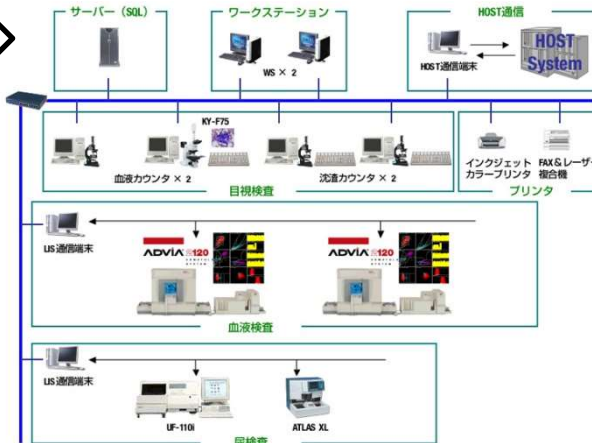


Figure 1. Data pyramid describing the categories of NIST data, ranging from “Working Data” to “Standard Reference Data (SRD)”



“材料電子カルテ”システム

順天堂浦安病院様向け ADMS-H&U 検査システム 構成図



IoT計測機器

テキストデータマイニング技術

物質から材料へ ～ プロセスデータの収集 ～

実験装置・計測機器からのデータ収集

計測機器からの直接吸い上げ (データIoT)

データの高付加価値化
ビジネスモデル
(研究、評価)



文献からのデータ収集



人手でDB化

ハイスループット・ハイク
オリティーキュレーション

テキストマイニング

大学等の成果からのデータ収集

実験



計算



レポジトリシステム
(電子図書館)

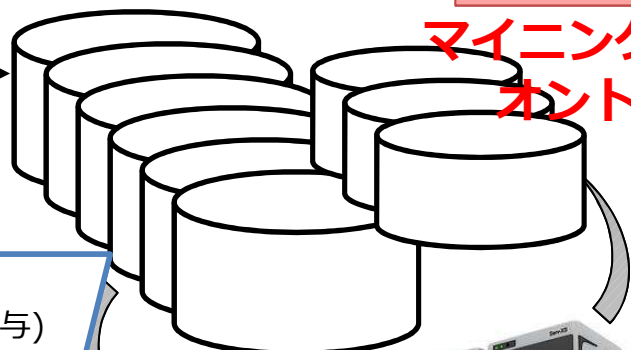
アカデミックデータ収集
(信頼できる標準データ)

高機能物質・材料
データベース

材料情報統合
データプラッ
トフォーム

マイニング技術
オントロジー

JaLC
(DOI付与)



高速サーバー

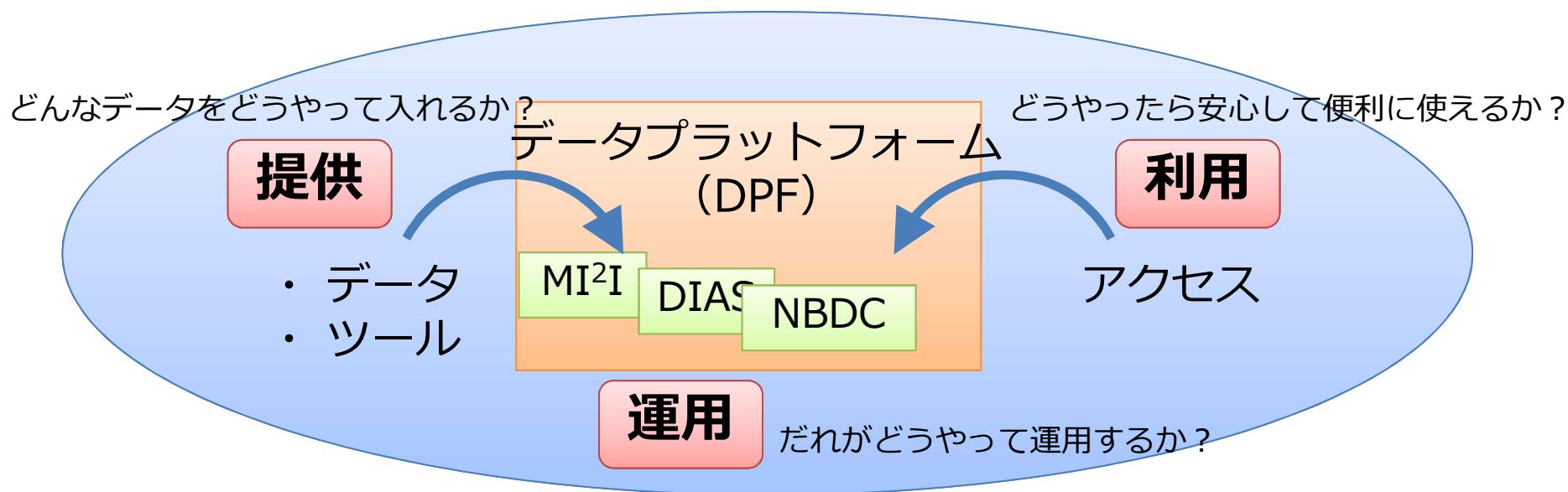
解析ツール/シナリオ
ジェネレータ

SINET 5 /
Internet



高セキュリティ利用環境

課題の整理 (3つの立場)



提供

- データの収集方法
- 収集するデータの種類・標準化
- 提供者へのインセンティブ
- 提供者との権利合意

運用

- 運用ポリシー
- 財源・予算
- 管理者・運用主体
- 人材
- ハードウェア更新
- 法的課題

利用

- アクセス制限の範囲
- 利便性
- サービスデザイン
- 利用負担

海外の動向 (参考)

国	概要
	<ul style="list-style-type: none">■ Material Genome Initiativeを2011年に立上げ。材料開発の短期化・低コスト化に向け、従来の実験、計算に加え、データの重要性に着目。2014年6月に初となる“Strategic Plan”を公表。■ NIST,NSF,DOE,DoDなどで関連プロジェクトを実施
	<ul style="list-style-type: none">■ ESF(European Science Foundation)は2009年に“Materials Science and Engineering Expert Committee (MatSEEC)”を組織し、欧州各国において物質材料科学分野に集中的な支援を行う中で第4部会として“Computational Techniques, Methods and Materials Design”が選定されている。■ E Uの枠組みでNOMADプロジェクトが、スイスは独自にMARVELプロジェクトを実施。
	<ul style="list-style-type: none">■ 中国版Materials Genome Initiativeを中国科学院・中国工学院が連携して着手。100億円規模との情報も。■ 2015年、上海大学にMaterials Genome Instituteを設立。北京マテリアルズ・ゲノム・エンジニアリング・イノベーション連盟(中国科学院物理研究所・北京科学技術大学による共同設立)や上海交通大学にもアジア・マテリアルゲノムセンターが設立される。
	<ul style="list-style-type: none">■ 2015年から“Creative Materials Discovery Project”を10年計画で立上げ。■ 2016年、韓国科学技術研究所 (KIST) において、“Materials Informatics Database for Advanced Search (MIDAS)”が設置された。

ご清聴ありがとうございました

