

イノベーションハブ構築支援事業 ノウハウレポート

「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

伊藤 聡

2019 年(令和元年) 9 月

目次

はじめに

1. 情報統合型物質・材料開発イニシアティブの概要	1
1. 1 背景	1
1. 2 目的	2
1. 3 実施内容	3
2. COE 機能	5
2. 1 アカデミアの人材糾合（体制構築と研究成果）	5
2. 2 産業界の人材糾合（コミュニティ）	11
2. 3 課題	15
3. データプラットフォーム機能	18
3. 1 DPF システム	18
3. 2 運用	25
3. 3 課題	27
4. スクール機能	29
4. 1 一般向け～フォーラム	30
4. 2 専門家向け～チュートリアル・ハンズオン	31
4. 3 課題	35
5. JST の貢献	37
6. 展望	41
6. 1 事業終了後のハブ機能	41
6. 2 本事業・本分野の展開	42

別紙

別紙 1	2015 年度実施報告書 エグゼクティブサマリー
別紙 2	2016 年度実施報告書 エグゼクティブサマリー
別紙 3	2017 年度実施報告書 エグゼクティブサマリー
別紙 4	2018 年度実施報告書 エグゼクティブサマリー
別紙 5	2019 年度実施報告書 エグゼクティブサマリー（案）

はじめに

2015 年度 JST イノベーションハブ構築支援事業採択課題「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」は二つの意味でのハブ構築を目指すものである。第一は物質・材料研究機構 (NIMS) がマテリアルズインフォマティクス (MI) を基軸に日本の関連する研究者・技術者を集約して物質研究・材料開発のハブ拠点となることである。第二は、マテリアルズインフォマティクス (MI) という新興分野は物質科学と情報科学・データ科学を統合・融合したものであるので、学問としてのハブ機能を果たすことである。本レポートでは MI という研究分野を例にとり、新興分野開拓をどのように行うべきかを考察した。

分野融合的な COE (Center of Excellence) を行うためには専門性の異なる人材を糾合することが必須である。MI 推進にあっては、物質科学の専門家と情報科学の専門家の共同作業が求められる。本事業ではその双方から当該分野の第一人者が参画するだけでなく、関連する国内外の研究者ともネットワークを構築することで人材糾合をサイバー・フィジカルの両面から行った。また、研究体制においても具体的な物質・材料の設計・開発を対象とした研究グループと、横系的なデータ科学の研究グループを組み合わせるという研究遂行上の糾合を行った。こうした取り組みによって、従来のシミュレーションベースの物質探索・材料設計とは異なる形で物質・材料の最適設計が可能となり、プロジェクト後半では実験研究者との連携によって、実際に新物質・新材料を合成し、MI 的手法の有効性を示した。

MI 研究に必要なデータ基盤を整備することは重要かつ喫緊の課題である。従来より NIMS が運用してきた材料データベース MatNavi を高機能化させ、MI 研究基盤としてのデータプラットフォーム (DPF) を試用できる環境を整えた。DPF は材料分野に限らず、データ駆動科学全般における基盤インフラであり、現在、NIMS においては国策として戦略的な取り組みが開始されているが、本 DPF はそのプロトタイプとなるものである。

新興分野においてはこれを担える人材不足が常に指摘される。とくに MI は産業上の利用価値が高いこともあり、人材不足は深刻である。体系立てされた人材育成プログラムは有期限事業ではできないので、主に企業人に対して学びのきっかけとなる実践的講義などを中心に行った。あわせて、特に産業界でのコミュニティ形成に資する仕組みとして MI²I コンソーシアムを立ち上げた。短期間のうちに 80 社を超える企業の参加があり、これに MI²I 参画者 (公的機関の研究者) が関わることで、産官学のコミュニティ形成に貢献した。

MI²I 開始後、NIMS では理事長主導の下、国研として材料科学分野のハブ機能を果たすための事業が開始され、現在も進行している。MI²I に参画したポスドク研究者の採用やプロトタイプとして構築した DPF システムの次世代版開発など、マテリアルズインフォマティクス研究のハブ機関としてさらに活動を発展させていくシステム (研究エコシステム) が構築されつつあり、JST イノベーションハブ構築支援事業の目標は達成されたといえよう。

本プロジェクトの企画立案および実施においては産官学のシニア人材の果たした役割が決定的であった。目利き力は豊富な経験によって培われるものである所以、革新的なアイデアを持つ研究者・技術者のみならず、こうした人材の活用が新規分野開拓・融合分野新興には欠かせないことを指摘しておく。

1. 情報統合型物質・材料開発イニシアティブの概要

1. 1 背景

物質・材料研究機構（NIMS）が取り組んでいる物質研究・材料開発の分野において近年、新しい動きが始まっている。それはデータ駆動型科学による物質科学の革新である。JSTの研究開発戦略センター（CRDS）は2005年11月20日に「科学技術未来戦略ワークショップー新材料設計・探索ー」を開催し、その報告書において、今後、日本における研究開発投資が強く期待される領域として「マテリアル・インフォマティクス」を指摘している。その後、2011年6月に米国オバマ政権が発表した Materials Genome Initiative の動きもあり、日本においても研究コミュニティ、国研、文科省などの様々なレベルでマテリアルズインフォマティクス事業の企画・立ち上げが検討された。とくに CRDS が2013年8月に出した戦略プロポーザル「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）」では、マテリアルズインフォマティクスを我が国の戦略分野として設定することを提言している。

一方、2015年4月、国立研究開発法人が発足したことを契機に、国立研究開発法人が日本の研究力・人材力強化の中核的な拠点として必要な役割である「イノベーションハブ」の機能を果たすことが強く求められている。この機能強化を支援する目的で JST イノベーションハブ構築支援事業が設定された（図 1-1）。

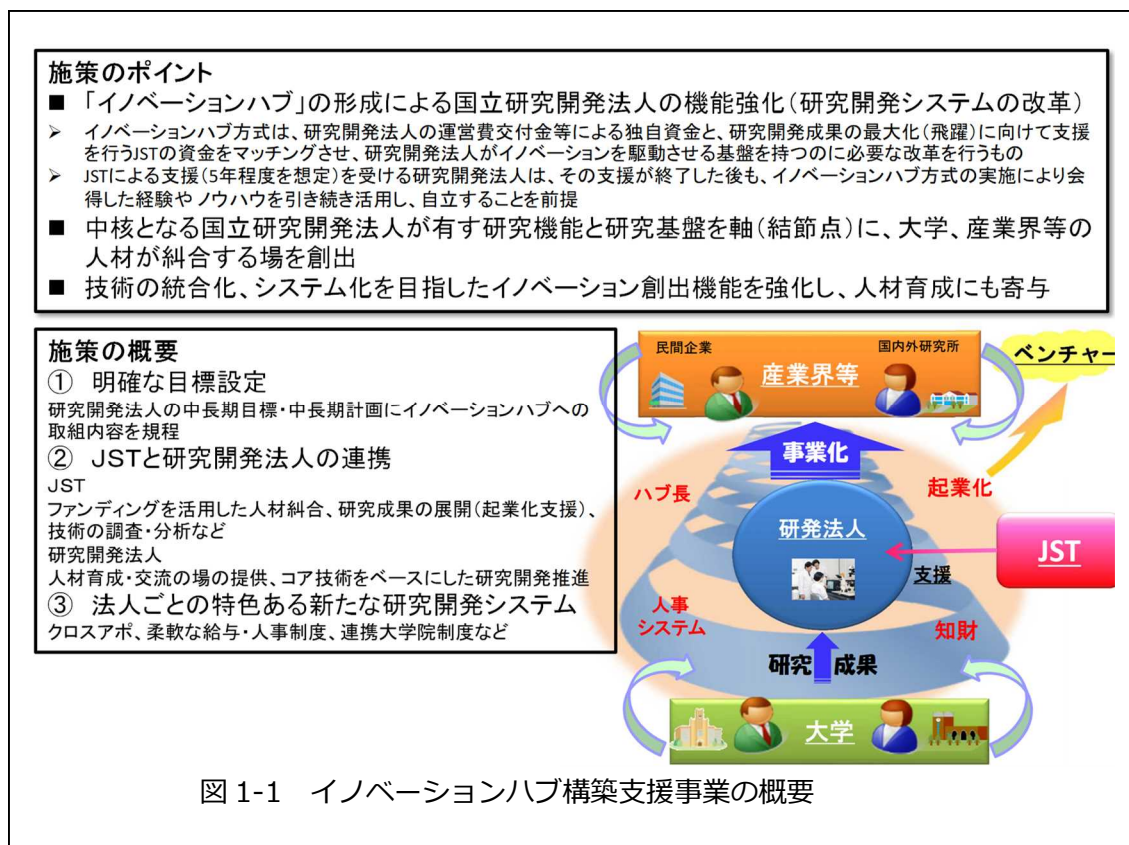


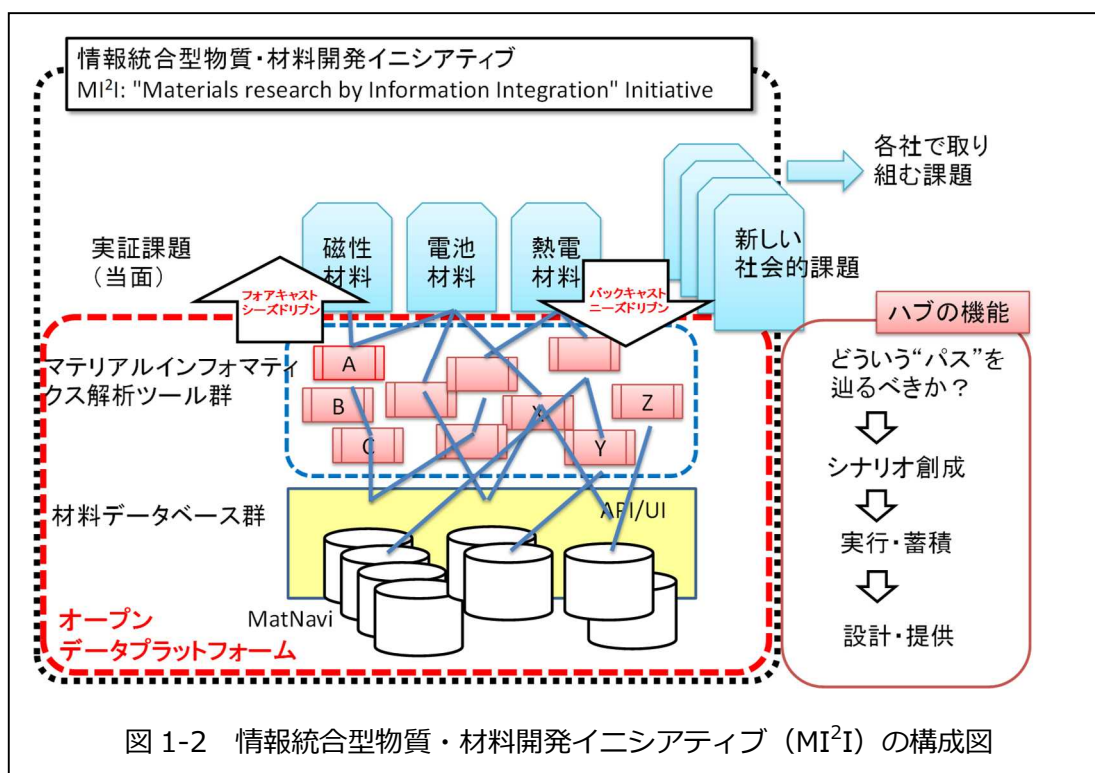
図 1-1 イノベーションハブ構築支援事業の概要

こうした背景の下、国研のシステム改革支援を目的とした JST イノベーションハブ構築支援事業に分野融合・人材糾合が必須であるマテリアルズインフォマティクスのハブ構築

事業を NIMS が提案し、採択され、2015 年 7 月 1 日より本プロジェクト（情報統合型物質・材料開発イニシアティブ：MI²I）を開始した。

1. 2 目的

マテリアルズインフォマティクスは物性科学の手法と機械学習・データ科学の手法を組み合わせた融合的な分野である。MI 研究に必要なそれぞれの要素技術は大学や企業等の研究開発機関で行われてきたが、これを組み合わせ、さらに MI 研究の基盤となる材料データの集約と活用を行うことは進んでおらず、とくにこれを遂行できる場が存在しなかった。そこで物質・材料研究の中核的機関である NIMS をハブ拠点として、産官学の人材を糾合し、データベースの整備、データ科学との融合を進展させ、マテリアルズインフォマティクスの学理の構築を進めると共に、企業の参画を促し、新手法の産業界への展開を加速し、その社会実装を目指すプロジェクトを開始した。この MI²I 活動を通して、物質探索・材料開発のレシピ／ノウハウが形式知として蓄積されることも想定した（図 1-2）。



この技術課題に対する目的は同時に国研のシステム改革を事業目的とする本事業の性格とも親和性がよい。マテリアルズインフォマティクスは融合技術であり、要素技術は大学等の研究機関で研究開発できるが、研究インフラとしてのマテリアルズインフォマティクス研究開発基盤の構築は国研でなければ行うことができない。そのためには従来のような切り売りの研究開発プロジェクトではなく、事業終了後の持続的な研究基盤活動につなげていくこと、すなわち本事業の実施機関である NIMS のシステム改革を進めていくことが必要である。

1. 3 実施内容

本事業においてハブ拠点の実現すべき機能を以下の3機能とした（図 1-3）。

機能1）情報統合型物質・材料開発の COE 機能

本手法による材料研究開発ソリューションを提供し、ハブ拠点を当該分野の COE（Center of Excellence）とする。

機能2）情報統合型物質・材料開発のデータプラットフォーム機能

本手法の基盤となるデータ・ツールと共に、データベースシステムと試行用計算サーバから構成されるデータプラットフォーム（DPF）を構築し、広く研究開発に提供する。

機能3）情報統合型物質・材料開発のスクール機能

当該分野の社会実装と普及促進のための人材育成に資する活動を通して、本手法を、とくに産業界を中心とした社会全体に広く普及させる。

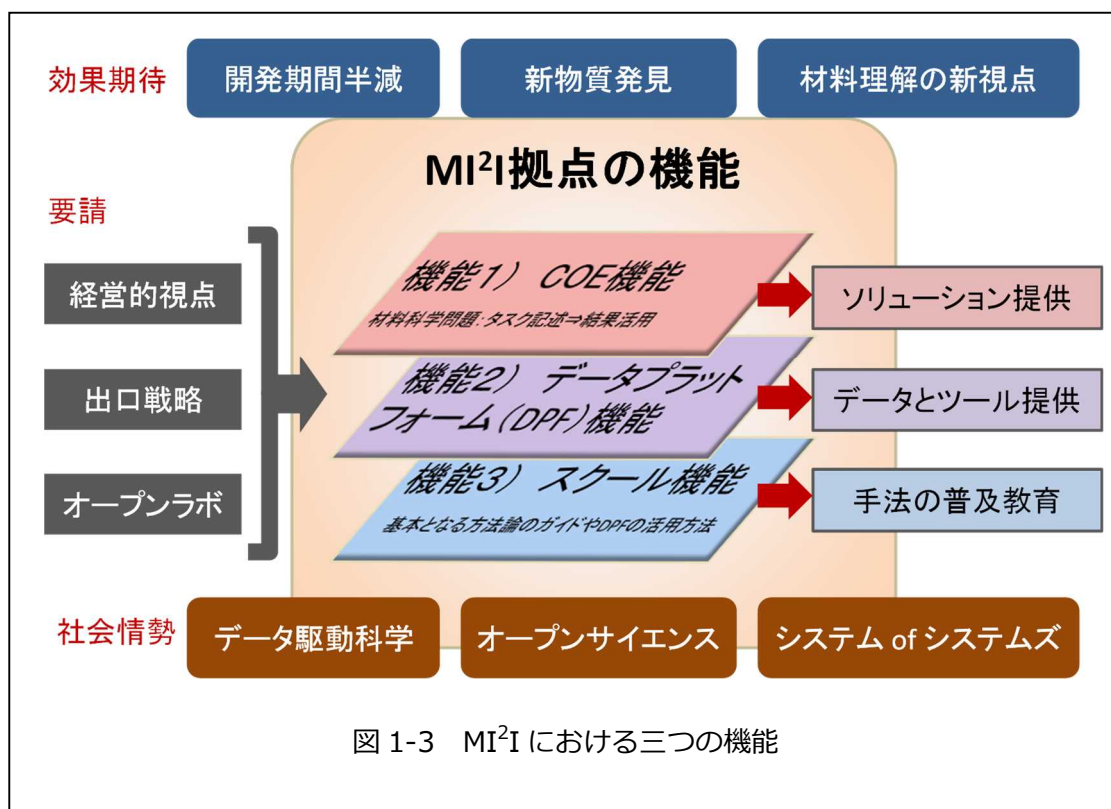


図 1-3 MI²I における三つの機能

以上の三つの機能を実施・運営する体制として、研究開発についてはグループリーダーがその研究グループを統括し、事業全体については運営室が担当する体制とした。（表 1-1）。

表 1-1 本事業推進体制（PL、PM 他）

時期	トップマネジメント体制		
	PL	PM	他
2015/7 ～ 2017/3	寺倉清之 (NIMS 拠点長)	伊藤聡 (JST)	真鍋明 (NIMS 副 PL・副拠点長) 知京豊裕 (NIMS 副 PL)、拠点 MGR
2017/4 ～ 2019/3	伊藤聡 (NIMS 拠点長)	木原尚子 (JST)	知京豊裕 (NIMS 副 PL、副拠点長) 岡田真人 (NIMS/東大 副 PL) 真鍋明 (NIMS 副 PL)、拠点 MGR

※PL：プロジェクトリーダー、PM：プログラマナー、拠点 MGR：拠点マネージャー

—

2. COE 機能

2. 1 アカデミアの人材糾合（体制構築と研究成果）

① 国分寺方式、サテライト等

本事業ではハブ拠点に研究開発資源を糾合させることを目的としているが、その活動の持続可能性を担保するために、参画する各機関のうちのいくつかを、その地域での中心的な機関（地域センター）として位置づけることを当初から構想した。これは物性物理の分野では『国分寺方式』として知られているものであり、1987 年の日本学術会議「物性物理における基礎研究」ワーキンググループ（金森委員会）の答申にも

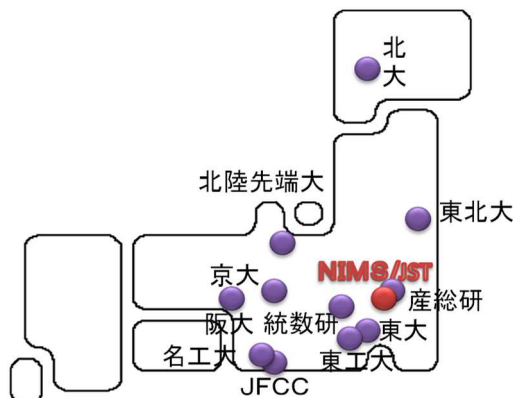


図 2-1 参画機関の分布

見られる。国分寺を構築していくための施策は後でも述べるが、関西地区（阪大）と中京地区（名工大）においては、大学の部屋を MI²I で借り上げ、ハブ拠点のサテライトとなる NIMS 居室を設置し、地元企業との連携やハンズオンセミナー開催等、首都圏に偏らない事業全体の活動活性化を積極的に進め、国分寺機能の早急な立上げを行った（図 2-1）。また、大型放射光施設 SPring-8 が設置されている兵庫県とは協定を締結し、放射光利用企業を中心とした関西地区での産学連携の場を用意した。

本国分寺構想は JST による本事業の当初の制度設計とはやや異なる考え方の仕組みであるが、議論を重ねた結果、合意が得られた。

② 本分野の一流研究者の人材糾合

本事業の公募開始直後に、プロジェクトリーダー候補（寺倉）を中心に、日本において新しい潮流である情報統合型（データ駆動型）物質・材料研究に着手していたあるいは関心を持っていた情報系・材料系研究者をリストアップし、直接出向いて本プロジェクトの趣旨説明と参加要請を行った。この中には物質科学の研究経験はないが、日本のデータ科学の第一人者も含まれている。この結果、声を掛けたすべての研究者が本事業に興味を示したので、NIMS で提案内容検討のための全体会合を開催した（2015 年 3 月 6 日）。ここで、寺倉からは当該分野の重要性と実施する研究概要、参加研究者の役割・機能、期待を説明した。事務的には、全体会議参加者を含む約 40 名の研究者を、課題採択時にプロジェクト参加者として登録し、一部の専従義務を持つ研究者を除き、全員を兼業扱いで NIMS と雇用契約を締結することとし、事業開始 1 か月後（2015.8.1～32 名）には、研究開発の核となる体制を垂直立上げし、実施体制を確立した。

本事業では人材糾合を進めるためにクロスアポイントメント制度の活用が謳われていたので、当初、NIMS 外部から参加する研究者が所属する主な大学・研究機関に NIMS 関係者（総務部門・人材部門・企画部門）が訪問し、NIMS 側のフレキシブルなクロスアポイント

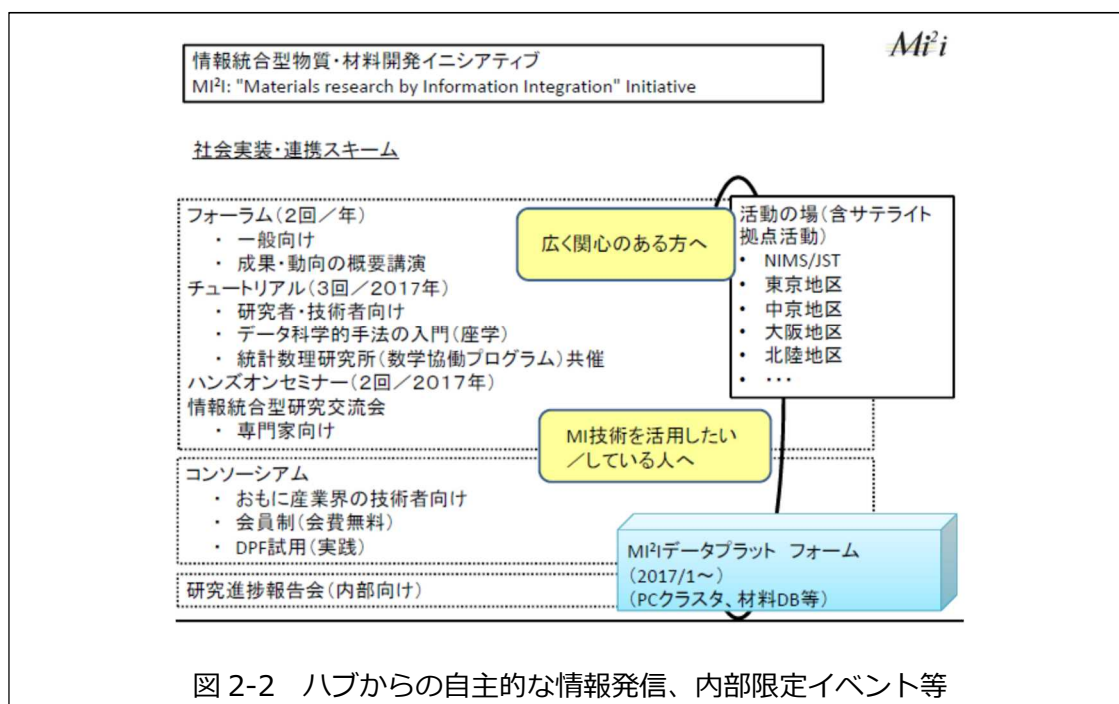
メント制度の説明、相手側のクロスアポイントメント制度導入状況の調査を行ったが、機関間で調整すべき点が多く、また事業の垂直立上げを優先するために既存の兼業制度を活用する方向で調整を行った。この為、事業開始後も本制度導入を検討したが、各年度 10 名未満への適用にとどまった。クロスアポイントメント制度を本格的に導入する事業であれば、当初から例外なくそれを行うべきであったが、一度導入した兼業制度からの切り替えの調整はさらに難しいことになった。クロスアポイントメント制度は次代の人材活用制度として活用すべき制度であるが、本格導入には国としての環境整備・ガイドライン導入が必要であろう。

本事業ではプロジェクトリーダー（PL）とプログラスマネージャ（PM）がプロジェクト推進の責任を持つことになっているが、MI²I では PL が研究面での責任を、PM が研究面以外の部分、とくに社会実装の面での責任を持つ体制とした。この為、PM は産業界出身者を選定し、さらに所属を JST とした。これは本事業が JST の従来のファンド提供型事業ではなく、JST と採択機関との共同プロジェクトであるという事業の性格を実施体制の上でも明確にするために実施した。

③学協会および他機関等との連携による人材糾合

MI²I 立上げ早々に、人工知能（AI）・機械学習等を駆使した情報統合型（データ駆動型）の物質・材料開発の機運を醸成するため、集中的に関連する学協会との連携策を進め、日本の各地で学協会のセッションの新設やワークショップの開催等を企画・実施した。その結果、プロジェクト後半では、各学協会主導で様々なイベントが多数開催されるようになり、さらには MI 研究に関する定常的な仕組み（学会でのセッション新設など）が作られるに至っている。

一方、ハブとしての事業では、聴衆のレベルに合わせた多様な情報発信の場を設定し、定期的に事例紹介などを行った（図 2-2）。具体的には MI²I フォーラム（一般向け）、チュー



トリアルセミナー（主に産業界の初心者向け）、ハンズオンセミナー（実務者向け、入門・初級・中級・上級）である。広報活動においては受け手のレベルを合わせ、それに適したコンテンツにすることが聴衆・受講者の満足度を上げるには必要である。社会実装のスキーム構築においては産業界出身の副 PL（真鍋）による産業界の実情に即したプランニングが効果的であった。

専門家向けの情報統合型研究交流会では、海外から講師を招聘するとともに、欧米・中国との組織的な連携関係の構築を行った。その一環として PL（寺倉）はヨーロッパにおける MI プロジェクトの先駆けであるドイツの NOMAD プロジェクトの外部諮問委員を務め、国際的なプロジェクト間連携にも尽力した。また、2017 年 10 月には計算物質科学の著名な国際会議である CPMD ワークショップ（Car-Parrinello Molecular Dynamics workshop in 2017）をアジアで初めて開催（共催）し、欧米研究者との連携を図った。2020 年 3 月には材料データのアジア地域での国際会議である AMDS2020（Asian Materials Data Symposium 2020）を主催する（図 2-3）。それ以外にも日本で開催される MI 関連の国際会議の共催や、JST さきがけの「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進

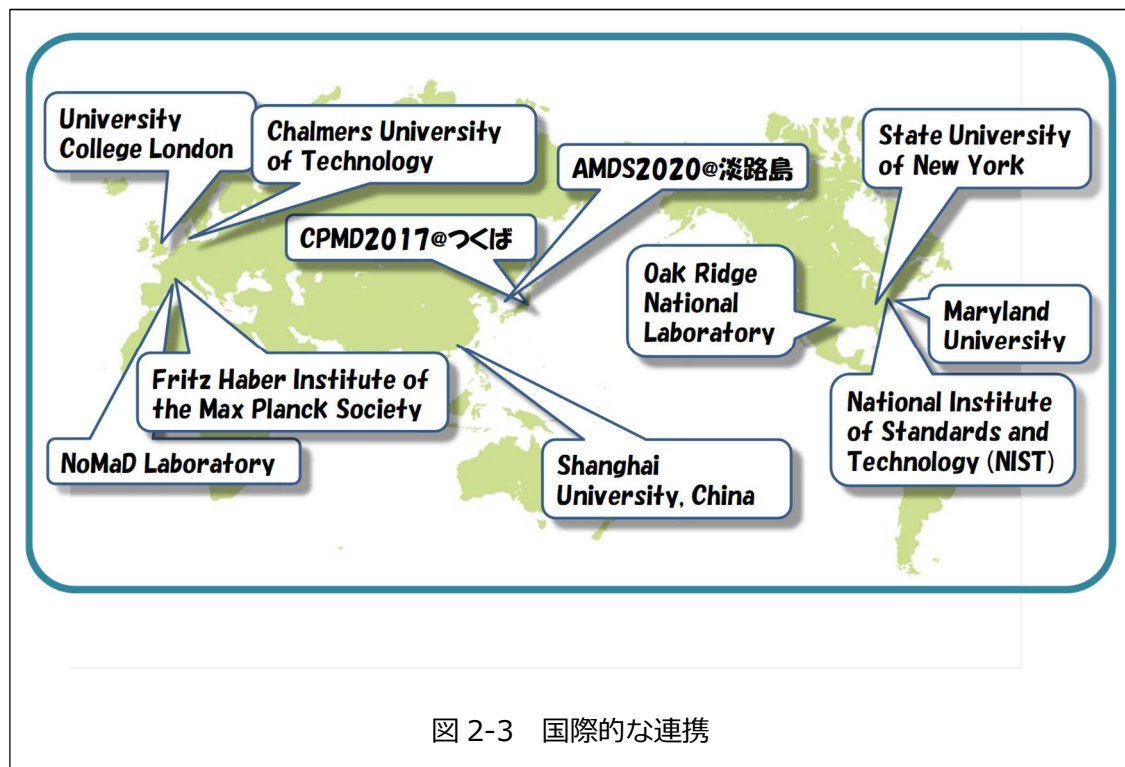


図 2-3 国際的な連携

的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」（研究総括：常行真司）との連携などを通して分野振興と人材糾合に努めた。

産官学連携プロジェクトでは通常、知的財産権を扱う組織（知財委員会）を設置することが多いが、MI²I では新物質発見、新材料創出に関してはハブ機関および各参画機関が有する知財部門で出願対応することとし、MI²I としての知財委員会を置くことは避けたが、その一方で MI 分野における知的財産権はどうあるべきかという課題に対して、専門家の指導を受けるために、工業所有権情報・研修館（INPIT）から高田正日出知財プロデューサーの派遣を依頼した。INPIT 事業の目的は国のプロジェクト遂行における知財権利化支援であ

るが、従前の権利化支援（出願支援）に加えて、機械学習モデルの知財権利化といった MI 特有の課題について支援を受けた。この支援結果は MI²I に参加した機関やあるいはコンソーシアム参加企業にも情報提供しており、今後の MI 分野での知財権利化戦略に寄与することが期待される。

④人材糾合が生み出した研究成果

最初の 2 カ年の成果は、データ科学を物質・材料の研究開発に適用するための手法開発やデータベースの整備が主となった。その際、データ科学の中心的な研究者らはいたずらに手法を増やすのではなく、集中的にベイズ最適化手法を、様々な課題に適用することを物性研究者と連携して行い、具体的な材料設計の事例を積み上げた。またそれに必要な汎用ライブラリを開発し、プロジェクト内で広く活用した。データベース (DB) に関しては、NIMS が保有・運用する大規模材料データベース MatNavi のデータ補充を行うとともに、ソフトウェアからの呼び出しを可能とする仕組み (API) を設計・開発して、MI 研究に利用可能な仕組みを構築した。

3 年度目以降は、MI 固有の手法開発や DB の開発および整備も進めつつ、それらを活用した出口課題に直結する新物質・新材料の探索・設計とその実験的実証においても、複数の事例を創出することに注力した。この結果、特徴のある手法に基づくソフトウェアや記述子ライブラリ・事前学習済みモデルライブラリ開発といった基盤的な成果を得るとともに、これらによっていくつもの新材料を実際に合成・開発した。世界的には電池材料や鉄鋼材料といった分野・領域に限った MI 研究拠点による成果創出はみられるが、これほど幅広い分野・領域にわたって成果が得られているプロジェクトはほかには見られず、これは当初のプロジェクト立ち上げ時の人材糾合（人選）の成果であるとともに、事業折り返し点での体制見直し（次節参照）によるものである。

MI²I が研究開発の面で示したもっとも重要なことは各論的な成果もさることながら、MI 手法が物質研究・材料開発において有効かつ優位であることを具体的に示した点である。その過程で実験研究者の果たした役割は本質的である。研究成果のハイライトについては別紙の各年度のエグゼクティブサマリーを参照されたい。

⑤ プロジェクト後半の体制見直し

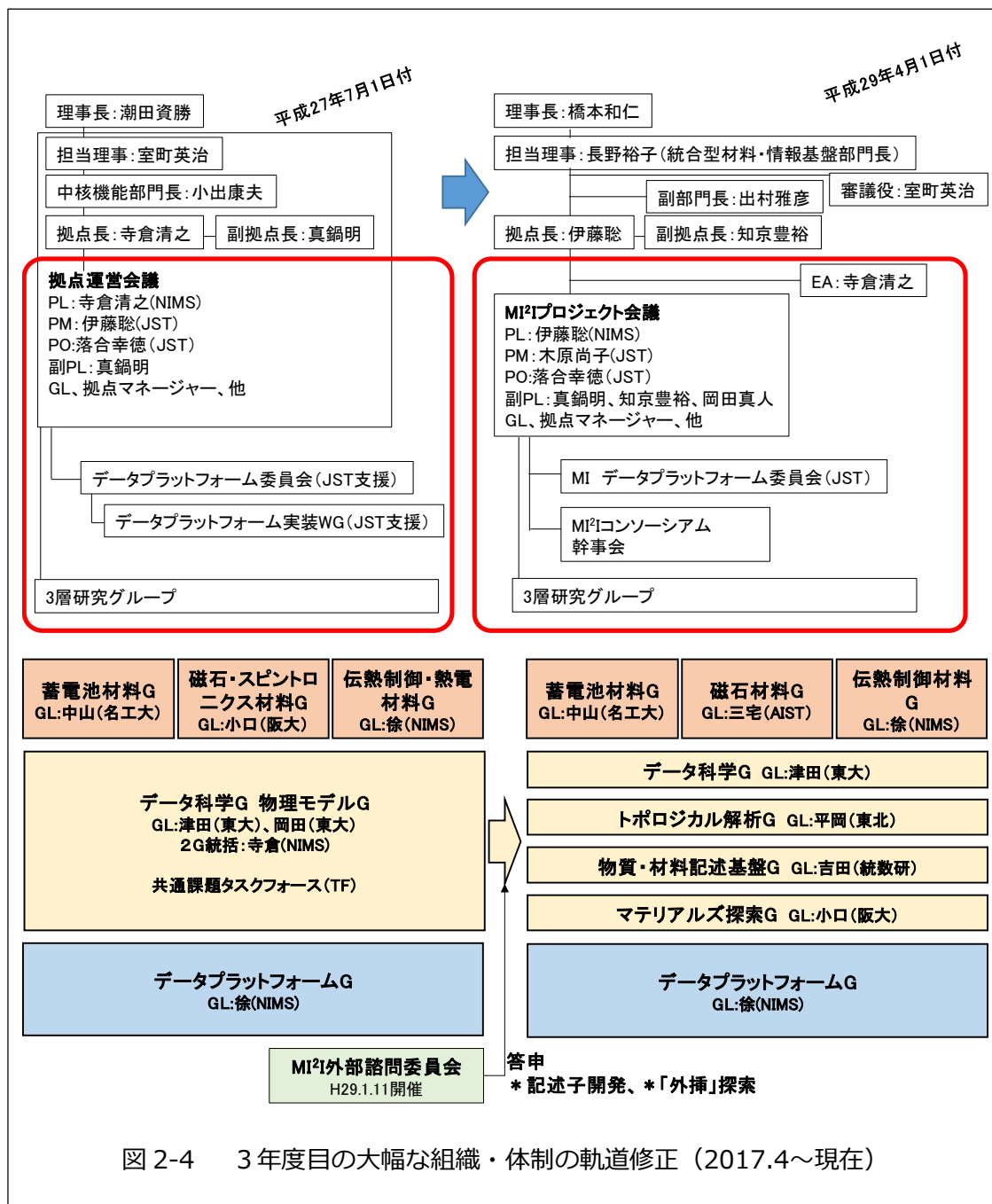
2 年度目後半の 2017 年 1 月 11 日に、自主的に MI²I 外の情報科学および物質科学の日本の第一人者によるピアレビューを実施した（主査：情報・システム研究機構北川源四郎機構長）。ここでの指摘事項を十分に踏まえて、3 年度目には、実施体制を大幅に変更した（図 2-4）。

当初は出口課題を磁石・スピントロニクス材料、蓄電池材料、伝熱制御・熱電材料の三つに設定した。これはエネルギー問題が物質科学における重要な社会的課題であること、ハブ機関である NIMS に研究実績があることから設定したが、前半 2 年間の実施状況を踏まえ、研究テーマの選択と集中を行った。磁石材料とスピントロニクス材料はどちらも磁性に関わる材料であるが、それぞれ、性格の異なる材料系を相手にすることから、後半では永久

磁石材料に注力することとした。伝熱制御（熱伝導物性）と熱電材料はともに熱が関係する特性ではあるが、物理としてはかなり異なる現象なので、伝熱制御材料に集中する体制とした。しかしながら、スピントロニクス材料研究、熱電材料研究あるいは明示的にはグループにはないが、超伝導材料なども含め、材料として重要であるものについては、実質的な研究は継続して行った。この結果、後半期には機械学習を用いた熱電材料の組成最適化による特性向上や圧力誘起超伝導材料の発見・実験的検証などの成果を得ている。横串的なデータ科学 G、物理モデル G は手法的に異なるものを無理にまとめた感があったので、より具体的に四つのグループに再編して、機動的なグループ運営が図れる体制とした。特徴的な手法であるトポロジカル解析は明示的にグループ化した。材料研究の基礎となるものは結晶構造であるが、結晶構造探索手法開発を主な目的としたマテリアルズ探索グループと、機械学習に必要な記述子を網羅的に設計・収集し、プレ機械学習モデルライブラリを整備することを主な目的とする物質・材料記述基盤グループを新たに設置した。データ科学グループは PJ 前半に集中的に研究を行ったベイズ最適化以外にも、モンテカルロ木探索などの様々な手法の研究を実施できる体制とした。

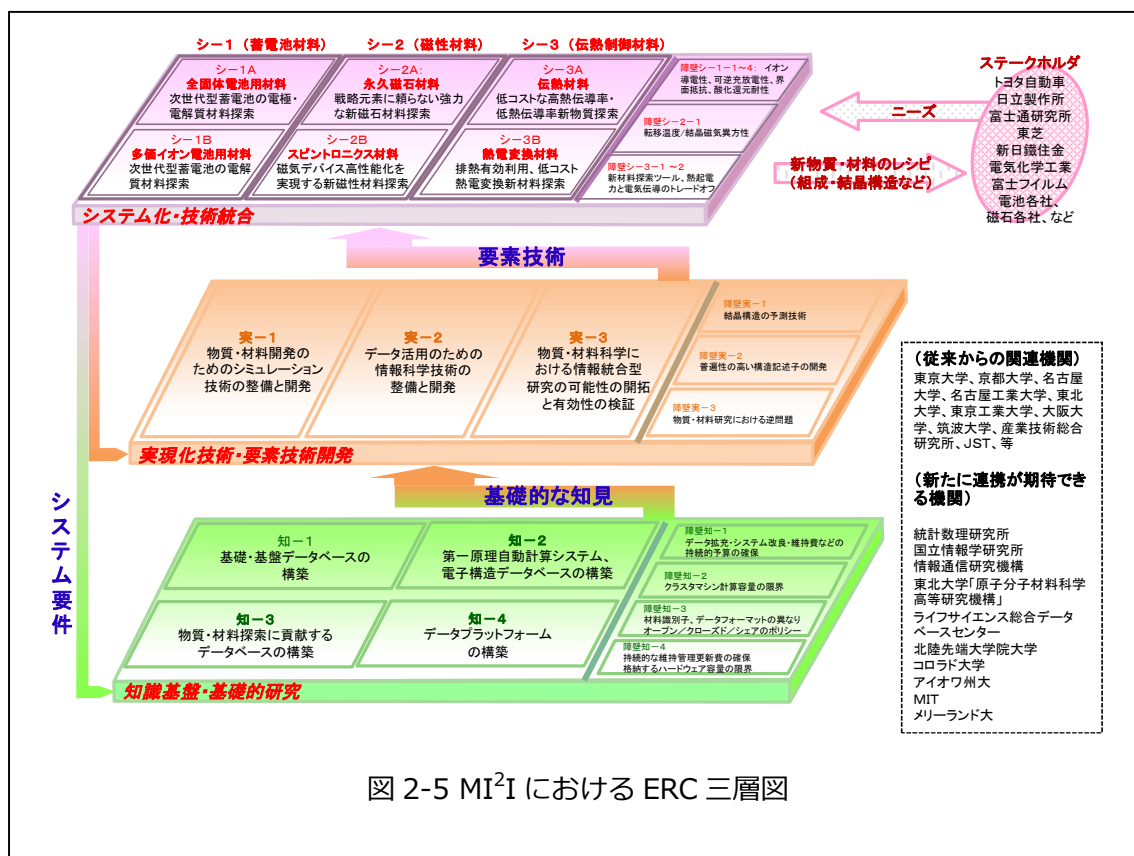
さらにプロジェクト全体の運営体制を見直し、研究内容を俯瞰する立場から指導するエグゼクティブアドバイザーを新たに設置するとともに、産業界出身の副 PL、データ科学・機械学習を専門とする副 PL、実験研究・材料合成を専門とする副 PL を配した。実験研究者とも積極的な連携を行うことで実際の材料合成を行うことも推奨した。

このような外部評価と組織見直しを毎年行う事業運営もありうるが、本事業ではこれを期中に一度だけ行い、その結果を最大限に実施内容に反映させることとした。これは5年間という短期間の事業であることを考慮し、評価疲れを起こさず、かつ事業運営の抜本的な改善・適正化を行うことを意図したためである。



本事業では米国 NSF の Engineering Research Centers (ERC) プログラムに準拠したプログラムマネジメント手法の導入を推奨しており、プロジェクトの三層図(Three-level strategic planning diagram)を作成し、管理・運用を行うことになっている。MI²I での三層図は以下の通りである(図 2-5)。マテリアルズインフォマティクス研究は要素技術を融合化・統合化して当該分野のシステム構築するものであるため、研究開発活動そのものがこのような考え方と整合する。そもそも MI²I は米国の ERC プロジェクト日本版を進めているともいえる(JST-CRDS 平成 26 年調査報告書「米国の Engineering Research Center—融合型研究センターの Federal Flagship Scheme—」を参照のこと)。こうしたプロジェクトマネジメントツールはプロジェクトの企画立案段階では非常に有効であるが、進捗

管理はあまり適していないことも留意すべきである。MI²I ではプロジェクト立案の最初の段階で三層図を実施内容・体制の俯瞰作業に活用した。



2. 2 産業界の人材糾合（コミュニティ）

2. 2. 1 産業界からのプロジェクト参画方法の多様化

本プロジェクトでは国研を中核にした当該分野の研究成果の社会実装が重要な課題である。社会実装の主な担い手は産業界であるので、プロジェクト開始時から図 2-6 に示すような仕組みを構築し、産業界との関係構築を進めた。産業界との関係構築においては、各社の事情を考慮し、産業界からのプロジェクトへの参画方式を画一化せず、各社の事情に見合うものを選択できる仕組みとした。すなわち、①MI²I 事業主体への参加、②MI に興味をもち、かつ実際の活用に興味をもつ企業を対象にしたコンソーシアム参加、③個別課題に対する共同研究である。産業界からの MI²I への直接参加は企業の視点を入れた運営をするためにマネージメント経験を有する人が主に参加し、MI²I の事業運営を担った。コンソーシアムに関しては次節で述べる。個別共同研究は対 NIMS だけでなく、参画した機関と企業が直接行っているものも複数ある。

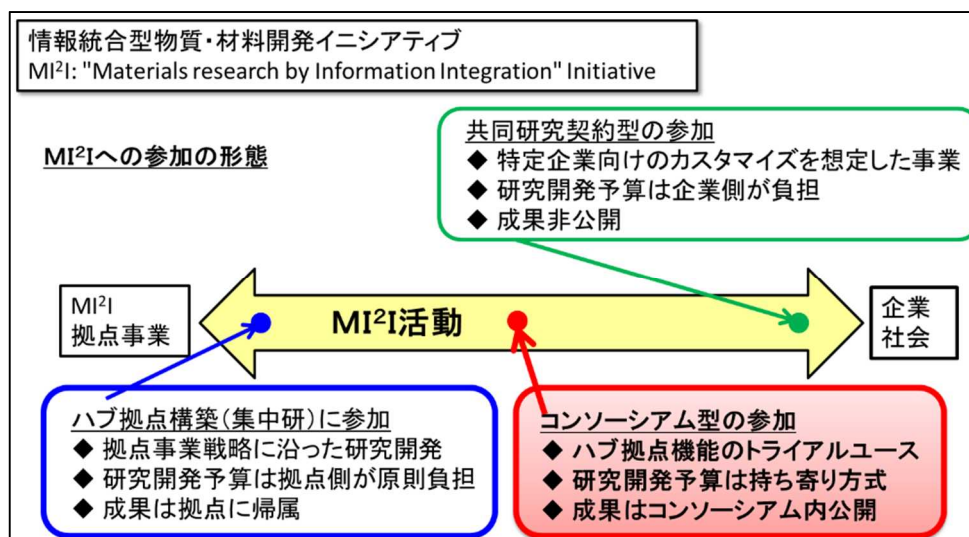


図 2-6 MI²I への参加の形態

情報発信・普及促進活動においても、多様な聴衆に対応した仕組みを整備した。MIに興味のある一般の方を対象にした公開のフォーラム（年2回）、MIの活用に興味のある企業向けに会員制コンソーシアムでの情報提供、MI専門家を対象とした研究交流会である。並行して多様なスクール活動を企画・実施した。一般公開のフォーラムなど、産業界からの参加者が多い会合では必ずアンケートを実施し、社会実装への制度設計・関心MI研究分野などの解析に活用してきた。2019年度まで一般公開のフォーラムは8回開催し、アンケートは毎回実施し、MIへの産業界の関心・期待度推移、MI取り組みの状況の定点観測手段として活用した。

次節で記載するコンソーシアムはコミュニティ構築を主眼としたものであるが、特定のテーマでの社会実装を行う仕組みとして、放射光施設 SPring-8 が設置されている兵庫県と協定を締結し、県ビームラインのパワーユーザーグループを中心とした研究会を兵庫県が立上げ、共同して運営した。放射光計測データという具体的な物理量に対して、インフォマティクス解析でなにができるかという議論を具体的に進めることで、MIの効用を知る仕組みとした。これは大型研究施設を拠点化する国分寺構想のプロトタイプでもある。

2. 2. 2 産業界の人材糾合・社会実装としてのコンソーシアム設立

当初の提案書および実施計画書には産業界メンバーによるコンソーシアム設立の構想はなかったが、新興分野においてはコミュニティ形成が必須なため、企業人を対象としたコンソーシアムを MI²I 主導で設立した。以下、コンソーシアム組織を設立・準備期、成長・拡大期に分けて述べる。

■ 設立・準備期

① 会則整備

- NIMS 内制度の調査：『構造材料つくばオーブンプラザ（TOPAS）』等 NIMS の既存類似組織の会則を参考に会則素案を作成した。
- 知的財産権の扱い：会員の多くは産業界からの参画であるため『知財の扱い』を明確に定めておく必要があったが、知財の取り扱い規定策定に関しては、多くの場合、各社知財部門との調整が難航する。そこで今回は事実上、知財に関する扱いは棚上げすることとした。すなわち知財の問題が発生しそうな段階が生じたら、それ以上の作業はコンソーシアム外で実施するという運用上行うこととした。この為、知財の取り扱いについては会則とは別に規定を作成した。
- 会員資格：日本企業の産業競争力強化および輸出管理の観点から日本に法人登録されている機関に限定して募集した。なお、大学等のアカデミアからは個人での会員登録を認めた。
- 意見聴取：会則案が出来たところで、企業も出席する MI²I フォーラムのアンケートでコメントを求めた。コンソーシアムに参加することが想定される産業界側の意見と、実務を扱う拠点双方からの意見を集めて最終案を作成した。

② コンソーシアム組織の整備

本コンソーシアムは MI²I の活動の一環であるので、NIMS 内の一組織として位置づけた。その一方でコンソーシアムは自立的に活動するべきでもあるので、本分野の有識者からなる幹事会を設置した。

■ 成長・拡大期

2016 年 4 月に NIMS 内の組織としてコンソーシアムは発足し、6 月にキックオフとして第 1 回コンソーシアムイベントを開催。発足時の法人、アカデミア参加者数は、27 法人、アカデミア 2 名であったが、2019 年 8 月時点で 88 法人、アカデミア 10 名の規模になった。図 2-7 にコンソーシアム会員数の変遷を示す。コンソーシアム運営の要点を以下に記す。

① 行事の定期的な実施

コンソーシアムのキックオフの後、年 4 回、コンソーシアムイベントを実施している。各イベントでは MI²I 側、会員側からの発信を含むプログラムを企画し、相互協業の下でコンソーシアムという気風の醸成に努めた。コンソーシアム発足時には会員側にも MI²I 研究者と距離感があり、また、DPF 構築状況やプロジェクトでの研究情報が不足していたので、2016 年度のイベント企画は、MI²I 側からの情報提供を主体とし、2017 年度は会員からの情報発信（講演）もプログラムに織り込むようにした。

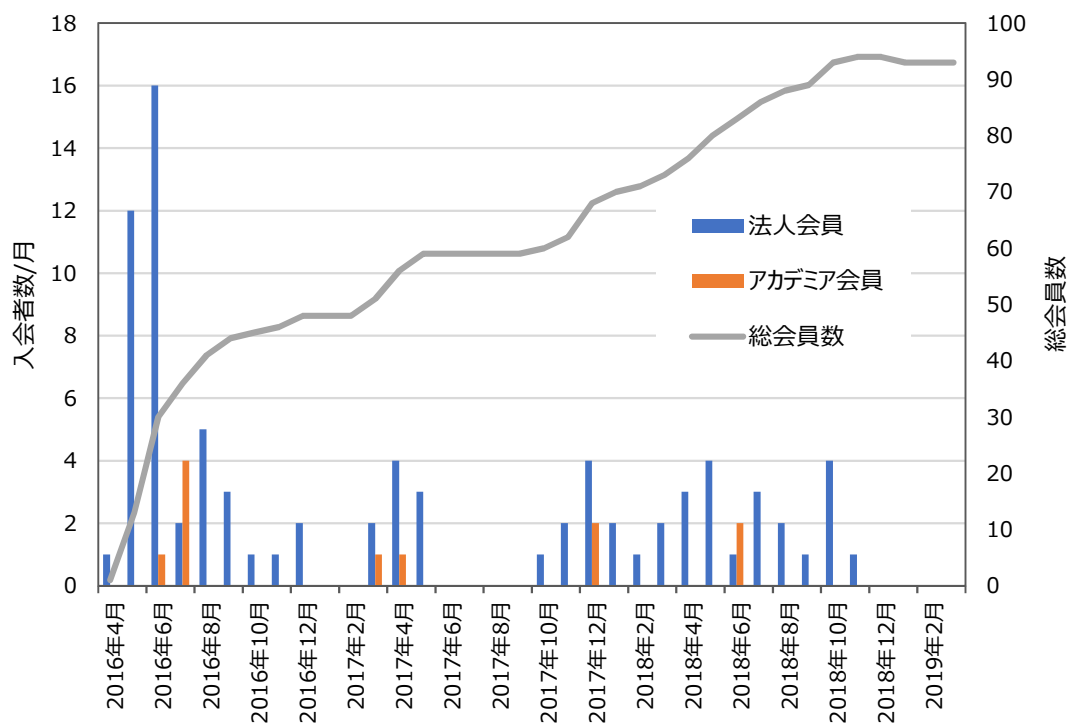


図 2-7 MI²I コンソーシアム入会会員数推移

② DPF 試用

MI²I のデータプラットフォーム (DPF) は 2017 年 1 月より試用開始となった。この DPF 試用では、NIMS の MatNavi の主要データベースが API 経由で使用可、PJ で開発したツールが使用可であり、これをコンソーシアム会員に提供している。利用開始から 2 年を経て試用者はワーキング活動等を通して増えつつある (図 2-8)。

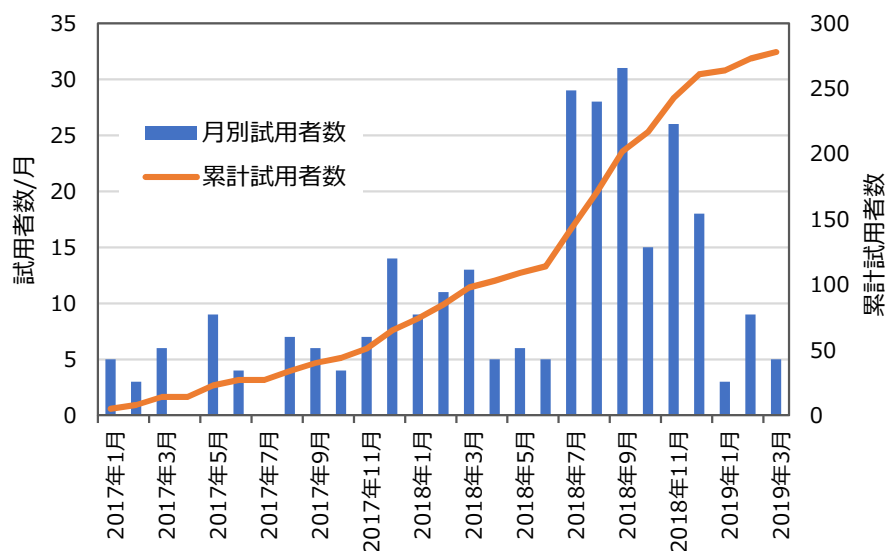


図 2-8 DPF 試用者数の実績 (利用者講習会受講での使用者もカウント)

2.2.3 ワーキング活動

2016年度の幹事会からワーキンググループ（WG）設立提案があった。これを受け、DPFのトライアルユースメンバーを中心に、2017年8月に数名で発足した。2018年度終盤において、有機材料を扱うグループと、無機材料を扱うグループの二つに分かれるほど拡大し、自主的かつ積極的なMI討論・研修の場となっている（図2-9）。

ワーキンググループではMI研究を行うための標準的な手続き、とくにデータベースから必要なデータをクレンジングしてデータセットを作成し、MIツールで解析する一連のワークフローを行ってみることを活動目標とした（ワークフローWG（WWG）と呼ぶ）。WWGでは対象として無機材料と有機材料に分けたが、手法としてはスモールデータの問題に適用可能な転移学習を共通テーマとして取り組んだ。

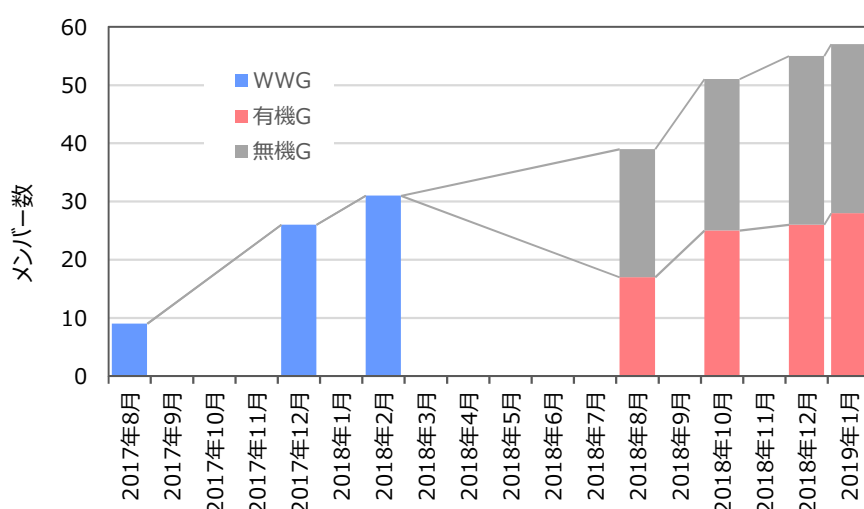


図2-9 WWGメンバー数推移

2.3 課題

2.3.1 アカデミアの人材糾合に関する課題

本事業の主眼は国研における人材糾合などによって日本の基礎研究成果を社会実装するシステムを構築することである。

シーズ創出にあたる研究開発の面では多様な人材を集約・融合することによって、産業界に対してMI技術の実証を行うと同時に、情報統合型物質科学の学理構築を行った。ここにおいて一番の課題は人材糾合に努めたとはいえ、現状では、物質科学・材料工学に興味をもつ情報工学・データ科学の研究者が限られている点である。主要な研究者は他のプロジェクトとの兼務とならざるを得ず、特定の研究者の負担が増える結果となった。

絶対数の少ない人材の糾合施策としてクロスアポイントメントの活用が考えられる。本事業公募要領でも積極的に活用することが記載されているが、これを実際に運用するには機関間の調整が非常に困難であるだけでなく、現在、兼業が認められている状況でのクロスアポイントメント制度の導入は待遇面でも困難である。兼業認可は産業界にも広がりつつあるとはいっても、人材糾合策としては魅力に乏しいのが実体である。

国研がハブ機能を発揮して、アカデミアでの研究成果を社会実装することを目的とする本事業では当初、集中研的な運用を求められた。たしかに under the one roof は事務的な運営だけでなく、プロジェクト推進にあたっての一体感醸成にも大きく寄与する。しかしながら、急速な進展がみられるデータ科学の関連分野で、かつ、永続的・持続的な活動へつなげていくためには、むしろ各地域あるいは各分野において特色のある活動を自己充足的に行う拠点（サテライト）を構築していくことのほうが適切と判断し、こうした国分寺方式を実現するような予算処置を含めた施策をとった。効率の運用の面からは一か所がハブとなることが望ましいであろうが、事業終了後の持続的活動への接続とこの分野のコミュニティ発展の面からは国分寺的な活動も行っていく必要がある。

産官学にとって魅力的なハブ拠点となるために先端的な MI 研究を推進したが、これを行う上では技術的な課題もあった。それは MI 研究を行うためには材料データが（世界最大級の材料データベースを持つ NIMS が参画しているにも関わらず）不足していることである。しかし、このことは逆に機械学習／データ科学の新しい研究テーマとして成り立つこともある。MI²I ではスーパーコンピュータ「京」を用いた物性シミュレーションによるデータ補強や転移学習によるスモールデータ問題対応などの研究を進めたが、MI に利用可能なデータの集約をシステムティックに行うことは重要な問題である。同時に、現在、データの価値が様々な場で議論されているが、材料データは他のデータとは異なる特質があることを踏まえた議論をする必要がある。一方で、こうした議論が結論を得るまでは、データに関する扱いが保護的・保守的になることが懸念される。MI²I 実施中においても同時並行的に世の中で進行するにデータマネジメントの在り方に対応せざるを得ない事態もあったが、リスクテイクも含めた対応が喫緊の課題である。

2. 3. 2 産業界の人材糾合に関する課題

社会実装を進める上では多様な産業界での実情を踏まえた仕組みが必要とともに、産業界が中心となった産学コミュニティが必要である。MI²I は短期間でこれを行うために個別共同研究の推進とともに、MI²I コンソーシアムを立ち上げ、コミュニティを構築するとともに、実践的な技術習得として、WG 活動を進めた。その中からいくつかの個別共同研究も生まれている。コンソーシアム活動によるコミュニティ形成は新興分野で産官学研究推進体制を短期間で構築するには適当な方法であったと認識しているが、いくつかの課題も顕在化している。その一つは間口を広げたことによる「多義性」である。コンソーシアムの諸活動は相互扶助の精神の下、情報を共有し、DPF も成果公開の試用という性格付けであったが、実際には各社の解釈に任せたところがある。ともかくも早期の立ち上げを行うために、まずは広く参加者を募り、自由闊達にやることを優先した。しかし、研究成果の取り扱いのような問題が発生する状況になってきたプロジェクト終盤では参画企業の意識の差が開きつつあることが、運営を難しくしている。必然的に次のフェーズに移るべき時機であろう。

本コンソーシアム活動は MI²I 活動の一環であり、組織的にはハブ機関 NIMS に属する組織である。しかし、コミュニティは永続的・持続的なものであるべきであるので、プロジェクト終了後の受け皿・体制構築が課題である。方向性としては二つある。一つはハブ拠点で

ある NIMS が産学連携システムとして発展させていくもの、もう一つは産官学の研究者・技術者によるコミュニティ活動である。また、現在、プロジェクト関係者のみが使っている DPF システムは今後も活用されるべきであるが、運用経費の捻出が課題である。これは MI²I に限ったことではなく、設備を導入した際にはかならず起きる問題である。より大きな枠組みで検討されるべきことを期待する。

3. データプラットフォーム機能

データプラットフォームは、ビッグデータ概念に基づいて、マテリアルズインフォマティクスに必要な材料データ、計算や解析などのツール、クラスターやクラウドなどの計算環境を提供するものである(図 3-1)。MI²I で開発した機能は、データプラットフォーム(DPF)機能と有償版無機材料データベース AtomWork-Adv の二つである。

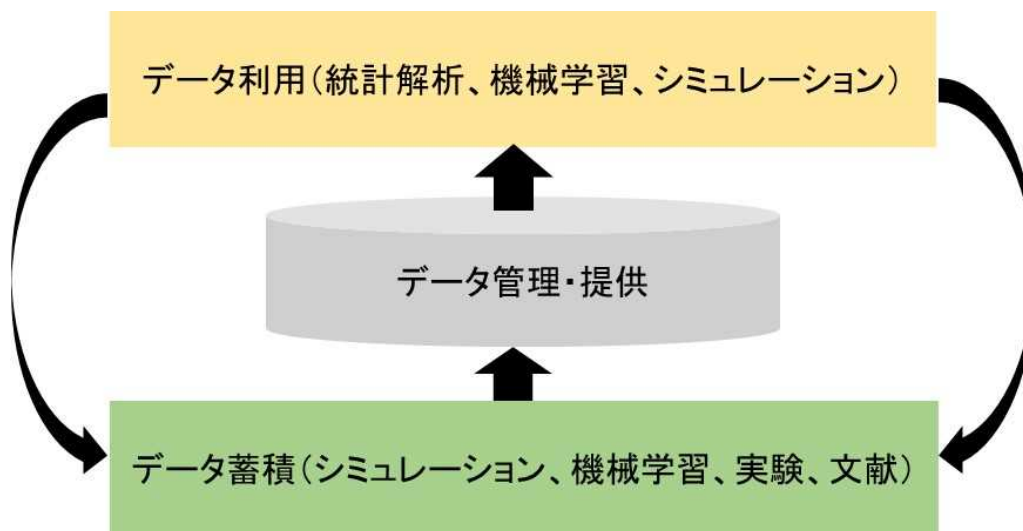


図 3-1 データプラットフォームの役割

3. 1 DPF システム

本データプラットフォームのシステム構成を図 3-2 に示す。システムは、NIMS イン트라ネットに構築され、システムを利用するためには、NIMS 内部から、或いは外部から VPN を経由して接続する必要がある。



図 3-2 データプラットフォームのシステム構成

本システムで提供しているサービスは、下記の通りである：

3. 1. 1 計算環境

本データプラットフォームでは、クラスターとクラウドの二種類の計算環境を提供している。計算クラスターは、48 台 1152 コアのサーバから構成され、ハイパフォーマンスな計算を実行できる。一方、クラウドシステムは、12 台の物理サーバから構成され、最大 286 台のバーチャルマシンを構築できる。処理速度には制限があるが、自由度、且つプライバシーが高いのは、メリットである。クラスターとクラウドの比較を表 3-1 に示す。また、クラスターとクラウドの共有データ保管スペースとして、200TB のストレージを用意している。

表 3-1 クラスターとクラウド計算環境の比較

	クラスター	クラウド
計算資源	共用	独占
処理能力	高	中
ユーザ権限	普通ユーザ	管理者
環境設定 (OS、ソフトウェアインストール、アプリケーションツールなど)	DPF 管理者（ユーザは各自の home directory のみにインストール可）	各ユーザにインストールとカスタマイズの権限あり
ジョブ実行管理	ジョブ管理システム	自由

3. 1. 2 NIMS データベースへのアクセス

NIMS は 2003 年から、物質・材料データベース MatNavi という無料インターネットサービスを提供している。MatNavi は、Web インターフェースを利用して、データの検索やオンライン閲覧はできるが、Web スクレイピングなどによる大量のデータダウンロードは、利用規約により禁止されている。DPF システムは、MatNavi の主要なデータベースのデータをダウンロードするための Application Programming Interface (API)を用意していて、それを利用して、テキスト形式のデータを無制限に DPF 上にダウンロードし、機械学習や計算に利用できる。現在、API を提供しているデータベースを表 3-2 に示す。

表 3-2 API を提供しているデータベースおよびダウンロード可能なデータ件数
(2019 年 3 月現在)

データベース	データ件数
有償版無機材料データベース (AtomWork-Adv)	結晶構造 30.3 万件、状態図 4.4 万件、 特性 36.5 万件
電子構造計算データベース (CompES-X)	電子構造 4.2 万件
高分子データベース (PoLyInfo)	ポリマ 2.1 万件、特性 27.8 万件
拡散データベース (Kakusan)	拡散係数 1.5 万件
超電導材料データベース (SuperCon)	酸化物・金属 3.1 万件、有機物 531 件
CCT 線図データベース (CCTD)	CCT 線図 214 件

API は、Rest スタイルの Web API で、原則 JSON (JavaScript object Notation) 形式でデータを返す。各データベースのデータを取得するための Python2 系および 3 系で動作可能なサンプルコードも提供している。更に、Orange ツールキットを用いて、グラフィカルユーザーインターフェイス MatNavi by Orange も提供している。それを利用して、ユーザが用意されているウィジェットを選択し、繋げることによって、一連の API リクエストを自動的に生成し、データを取得することができる。プログラミングは一切不要である。図 3-3 は、MatNavi by Orange の画面一例である。

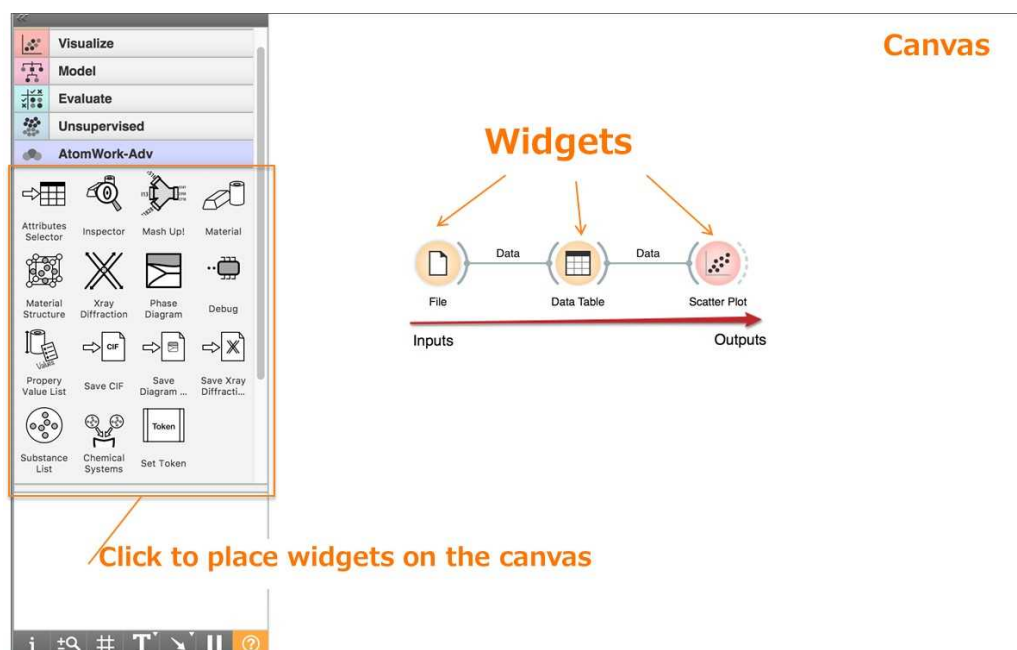


図 3-3 MatNavi by Orange の画面例

3. 1. 3 計算・解析ツール

DPF システムでは、本プロジェクトメンバーが開発したデータ処理・解析ツール、例えば、TOAST（自動電子構造計算スクリプト）、COMBO（汎用ベイズ最適化ライブラリ）、XenonPy（記述子ライブラリ）、CrySPY（結晶構造探索システム）など、およびマテリアルズインフォマティクスでよく使われているオープンソースのパッケージやライブラリ（Pymatgen、Python ライブラリ等）などを、多数インストールしていて、ユーザがすぐ利用できる状態になっている。

更に、Jupyter Cloud を利用して、ユーザが Web ブラウザから利用できる Python プログラミングのテスト環境も提供している。Jupyter Cloud では、API でデータ取得や、データプロット・解析など多数のサンプルコードとデータセットも提供している。図 3-4 は、Jupyter Cloud の利用画面一例を示す。

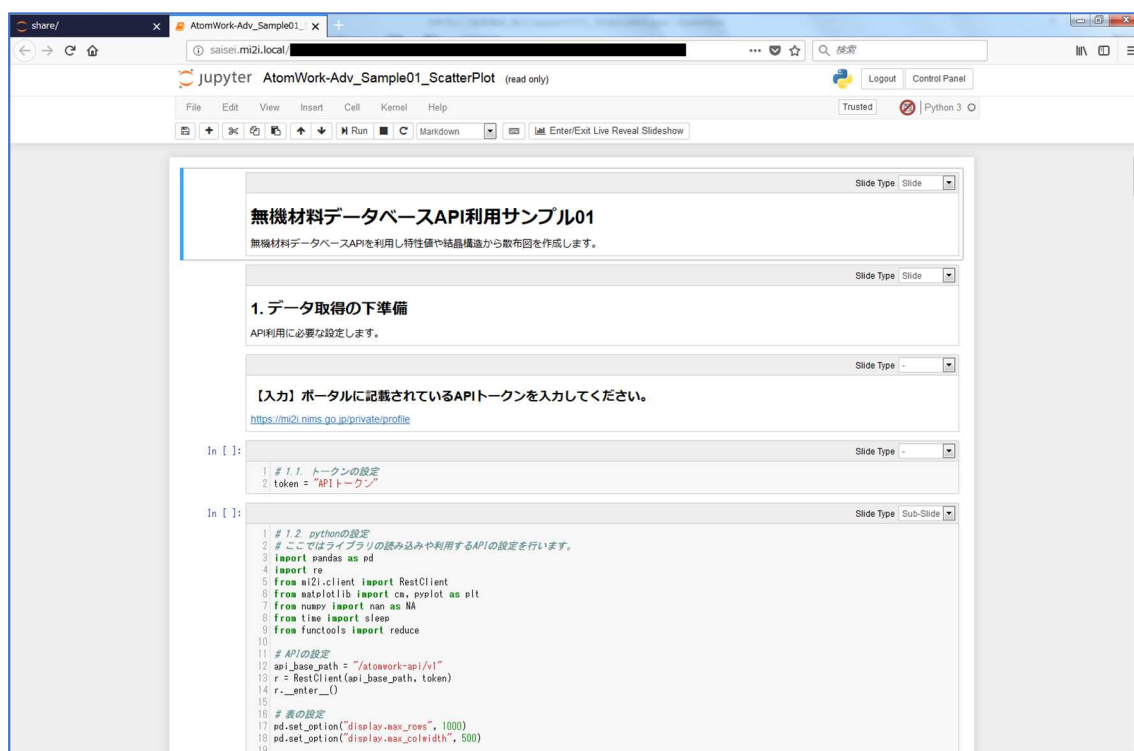


図 3-4 Jupyter Cloud の利用画面例

3. 1. 4 ポータルと Web アプリケーション

DPF の情報を発信するために、図 3-5 に示すように、ポータルサイト (<https://MI²I.nims.go.jp/top.html>) を構築した。ポータルサイトは 3 層構造となり、第一層は、誰でも閲覧、利用できるページである。DPF サービス紹介や、プロジェクトメンバーが開発したツールのダウンロード、利用案内、Web アプリケーションなどをここで公開している。第二層は、NIMS 構内、或いは DPF からしかアクセスできないサイトである。クラスターや、バーチャルマシン、API など各サービスの利用マニュアルとサンプルコード

はここで閲覧できる。第三層は、DPF の利用ユーザの個人ページである。ユーザ認証を通した後、自分のパスワード変更や、API トークン、API コール回数の確認などができる。

一般ユーザも手軽に利用できるサービスとして、プロジェクトの一部成果を Web アプリケーションの形式で提供している。2018 年度末の時点では、伝熱制御材料グループと協力し、二つの Web アプリケーションを開発・提供している。一つ目は、化合物形成予測システムである。本システムは、化合物が形成できる二～四元系の 8393 化学システムと、化合物形成できない 7026 化学システムに基づいて、ランダムフォレストの機械学習手法を利用して、ユーザが入力した化学システムに対して、化合物形成の確率を計算する。その利用画面を図 3-6 に示す。二つ目の Web アプリケーションは、比熱とデバイ温度の予測システムである。本システムは、伝熱制御材料グループで収集、編集した 500 種類以上の化合物の比熱—温度曲線を利用して、機械学習の手法を用いて新化合物の比熱を予測するものである。更に、比熱—温度曲線からデバイ温度をフィッティングし、デバイモデルで算出した比熱曲線と比較することもできる。図 3-7 は、このシステムの利用画面の例を示す。



図 3-5 DPF ポータルサイト

Compound Formation Prediction

☒ Keyboard input

Input compound elements (at most 4 chemical elements)

☐ Data file input [Template CSV file](#)

Upload prediction data file (*.csv, *.txt only) ファイルが選択されていません。

Chemical System	Compound Formation	Probability	Error Message
Si-Fe-B-O	Yes	98.86	

図 3-6 化合物形成予測システムの画面例

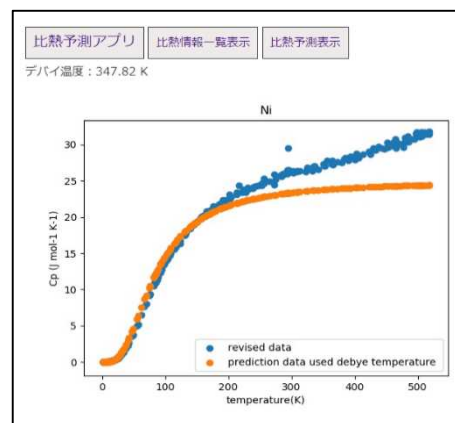
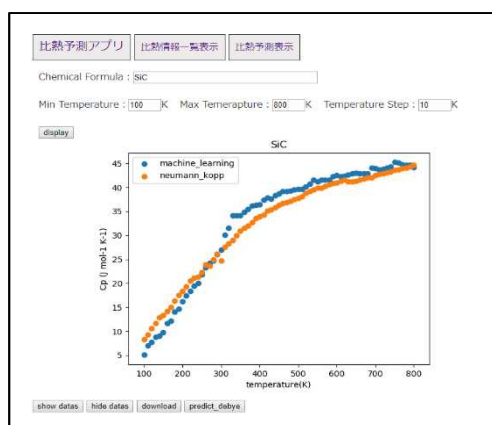


図 3-7 比熱とデバイ温度予測システムの画面例

3. 1. 5 有償版無機材料データベース AtomWork-Adv

NIMS は 2010 年から無料版無機材料データベース AtomWork をインターネット上で公開している。AtomWork には、2002 年までに収集された無機材料の状態図、結晶構造、特性データが含まれている。本プロジェクトでは、最新データを含む無機材料データベース AtomWork-Adv を新しく構築し、2018 年 5 月より有償サービスを開始した (<https://atomwork-adv.nims.go.jp/>)。2018 年 3 月時点での AtomWork-Adv のデータ件数と従来の AtomWork の比較を表 3-3 に示す。今後、毎年データ更新を行う予定である。

表 3-3 AtomWork と AtomWork-Adv のデータ件数

データ種類	AtomWork	AtomWork-Adv
状態図	15,000	42,406
結晶構造	82,000	303,885
特性	55,000	365,517

データ数の増加だけではなく、AtomWork-Adv は、従来のデータベースの検索、表示機能に加えて、データを俯瞰するためのマッピング機能や、特性間の相関性を探索するためのプロット機能も提供している。図 3-8 と図 3-9 にそれぞれの一例を示す。

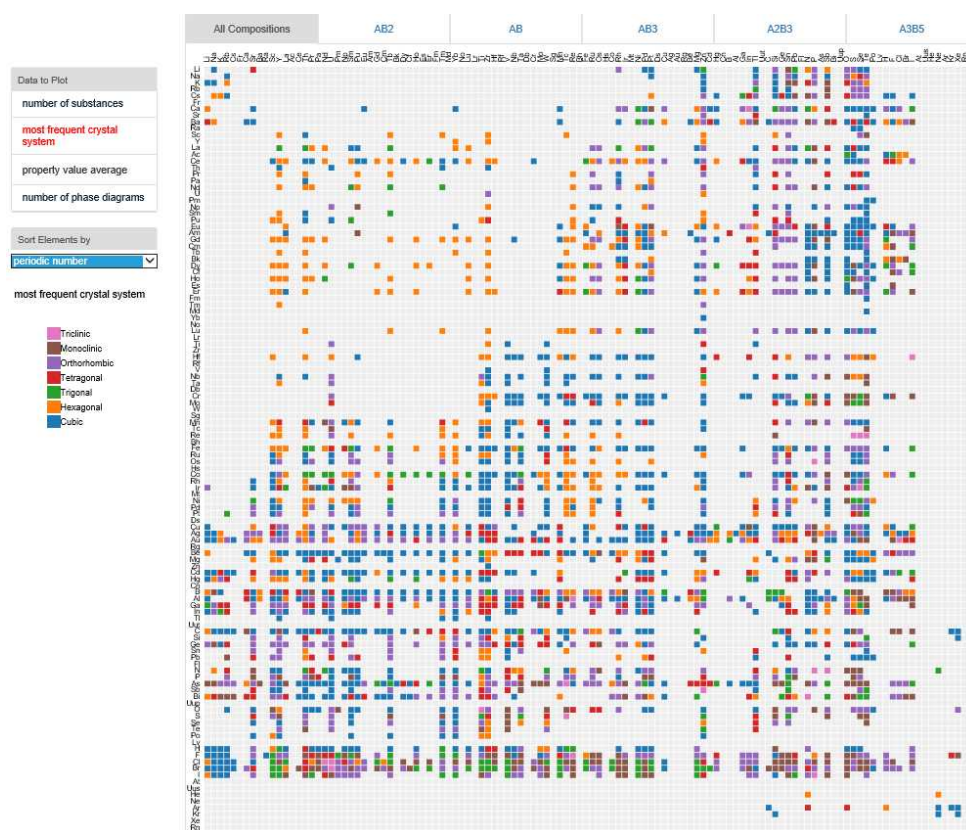


図 3-8 AtomWork-Adv のマッピング機能の例
(2 元系化合物の出現頻度最高の結晶系マップ)

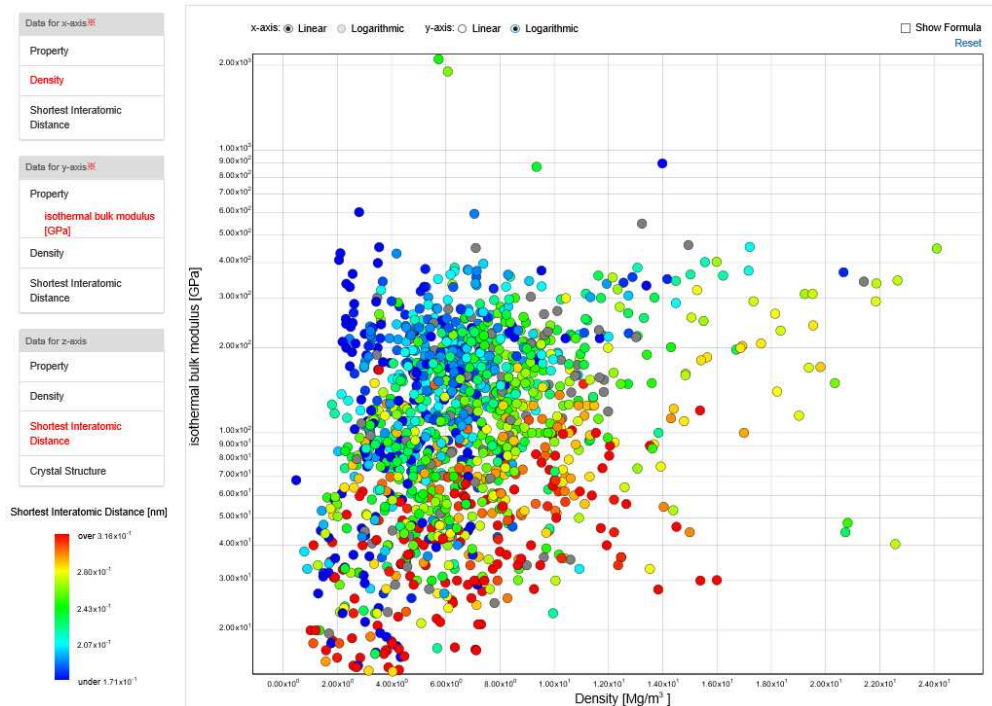


図 3-9 AtomWork-Adv の特性プロット機能の例
(横軸は密度、縦軸はバルク弾性率、色は原子間最短距離を示す)

3. 2 運用

DPF システムは、2017 年 2 月から正式サービスを開始した。2019 年 3 月現在の登録ユーザは、プロジェクトと NIMS 研究者 28 名、コンソーシアムアカデミック会員 4 名、コンソーシアム企業活動員 119 名、計 151 名である。クラスターシステムの CPU の稼働率は最大 30%、クラウドのバーチャルマシン占有率は約 60%、ストレージの利用率は約 54%である。クラスター管理ノードへのログイン情報から算定した月別の利用者数を図 3-10 に示す。

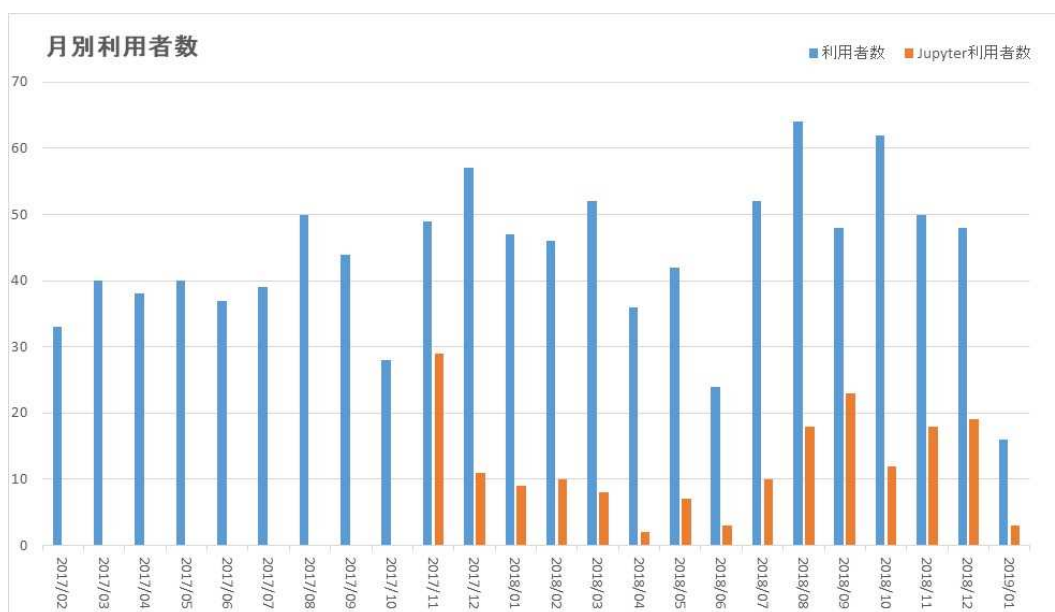


図 3-10 DPF システムの月別利用者数。

(システム管理者、ユーザーサポート、開発委託業者は除外。同じアカウントで1日に複数回ログインした場合は、その日の利用者数=1で算定)

データベース API の利用者数と API コール回数を表 3-4 と 3-5 に示す。データベースの中で、最も利用されているのは、AtomWork-Adv で、その次は PoLyInfo である。

表 3-4 月別の API 利用者数

	利用者数					
	AtomWork-Adv.	CompES-X	PoLyInfo	Kakusan	SuperCon	CCTD
2017/02	-	-	-	0	1	0
2017/03	1	0	-	0	0	0
2017/04	8	0	-	0	0	0
2017/05	3	2	-	0	0	0
2017/06	2	0	0	0	0	0
2017/07	3	0	3	0	0	0
2017/08	5	1	0	0	0	0
2017/09	2	0	1	0	0	0
2017/10	21	0	2	0	0	0
2017/11	9	0	2	0	0	0
2017/12	9	0	2	0	0	0
2018/01	10	0	4	0	0	0
2018/02	11	0	5	3	1	0
2018/03	2	0	2	0	0	0
2018/04	2	0	2	0	0	0
2018/05	5	0	2	0	0	0
2018/06	3	0	0	0	0	0
2018/07	10	0	0	0	0	0
2018/08	14	0	7	0	1	0
2018/09	17	0	8	0	0	0
2018/10	8	0	0	0	1	0
2018/11	7	0	3	0	0	0
2018/12	11	0	2	0	0	0
2019/01	0	0	0	0	0	0
計	163	3	45	3	3	0

表 3-5 月別の API コール回数

	APIコール数					
	AtomWork-Adv.	CompES-X	PoLyInfo	Kakusan	SuperCon	CCTD
2017/02	-	-	-	0	2	0
2017/03	1	0	-	0	0	0
2017/04	156	0	-	0	0	0
2017/05	9,434	37	-	0	0	0
2017/06	407	0	0	0	0	0
2017/07	100	0	163	0	0	0
2017/08	1,635	9	0	0	0	0
2017/09	169	0	17	0	0	0
2017/10	19,261	0	1,058	0	0	0
2017/11	9,052	0	1,696	0	0	0
2017/12	5,936	0	19,073	0	0	0
2018/01	10,722	0	41,849	0	0	0
2018/02	10,221	37	1,409	119	2	0
2018/03	798	0	44,041	0	0	0
2018/04	798	0	44,041	0	0	0
2018/05	171,922	0	4,017	0	0	0
2018/06	42,049	0	0	0	0	0
2018/07	8,307	0	0	0	0	0
2018/08	17,620	0	2,445	0	4	0
2018/09	64,858	0	9,707	0	0	0
2018/10	720,831	0	0	0	2	0
2018/11	852,709	0	4,959	0	0	0
2018/12	846,416	0	221	0	0	0
2019/01	0	0	0	0	0	0
計	2,793,402	83	174,696	119	8	0

3. 3 課題

DPF を MI²I 内で運用した結果、下記の諸課題が顕在化した。今後の DPF システムの運用に生かしていく。

(1) コンソーシアム企業活動員の VPN 接続

当初、資産および設備を管理するハブ拠点の方針に従い、コンソーシアムの企業活動員は、NIMS にある端末室からしか DPF を利用できない運用とした。人材糾合の面では効果があったかもしれないが、利便性が著しく損なわれたので、セキュリティ対策および運用規則を見直し、VPN 接続によるリモート利用を進めるようにした。セキュリティを確保しつつ、利便性を向上させていくことは今後の大きな課題である。

(2) データの持出し

DPF システムは、データベースからダウンロードしたデータを DPF 上のみで利用可能と規定しているが、ユーザからは、データを持ち出したいとの要望が多かった。その理由は、DPF の計算能力や、ソフトウェアライセンスの制限などにより、DPF の環境で実行できない処理も多数あるからである。運用規則等の整備が必要である。

(3) 材料データの評価

NIMS データベースは、専門家の編集者によるデータの収集や編集などにより、品質管理を行っているが、異なる論文や実験で得られた特性データのばらつきは存在している。機械学習でデータセットを作成する時に、どのデータを利用すべきか悩んでいるユーザが多い。各分野の専門家によりデータのばらつきを理解し、汎用性の高いデータセットの作成が期待されている。

(4) プロジェクト終了後のサービス継続

DPF のユーザからは、プロジェクト終了後も何らかの形でサービスを続けてほしいとの要望が多数ある。その時のサービスポリシーや、ビジネスモデル、必要な費用、人員体制の維持などについてはハブ拠点としての在り方を踏まえた制度設計と実施計画が必要である。

4. スクール機能

<スクール機能とは何か>

マテリアルズインフォマティクス (MI) の目指すことは、一言でいえば材料研究プロセス (探索・解析・最適化など) の自動化であり、特に知識集約的な研究作業の自動化と言うこともできる。材料変更を伴う新商品の実現に至るまでの長い開発プロセスの効率化、迅速化、精緻化を実現する新たなパラダイムとして、特に産業界から期待され、世界的な潮流となっている。本ハブ拠点事業は、これら MI 活動の加速・推進を目的として設置された。MI はデータ科学・計算科学・材料科学の総合科学であり、異なる領域の研究者間のネットワーク形成がその第一歩となる。今後、研究者ネットワークによる MI 手法の研究活動の結果として、機械学習に適したデータベースや機械学習ツール等のプロダクトを提供していくことになる。しかしこれらのプロダクトはそれだけでは利用できず、それらを活用するための新たなデータ科学的統合手法の獲得が必要となる。データ科学手法を理解できる技術者は、多くの企業においては存在しないか不足しており、材料におけるデータ科学的統合手法の内容や必要性に関し、啓蒙・普及活動を地道に行っていかなければ何も始まらない現実もあった。その発信機能をスクール機能と呼んでいる。

<スクール機能に関連する多様なニーズ>

材料に関連する研究対象 (問題) は、物質としての無機から有機、形態としての薄膜からバルク、結晶から非晶質、さらには関連する製造プロセスや使用時の環境劣化等多岐にわたる。また問題とする材料特性は、機能特性、機械的特性等の基本的なものから製品レベルの応答特性までこれも非常に多岐にわたる。これらの材料諸問題をデータ科学的手法により解決しようとする試みが MI である。関連する学術領域は材料科学、計算科学、データ科学等の複合領域となるため、広範な知識統合が必要となる。例えばデータ科学についても利用する手法、原理は様々で、また急速な発展・進化の途上にある。代表的なアルゴリズムだけでも、商用レベルのものから研究者レベルの最新のものまで、おそらく数千種を超えるものと思われる。スクール機能としてこれを網羅することはもちろん不可能だが、数種の手法でさえ十分な対応はできない。例えばベイズ推論関連の手法だけでも数十時間単位の学習・訓練が必要となる。この状況を鑑み、MI²I の立場は「学習のきっかけづくり」に徹することとした。その上で対象と想定される各層に対し、効率的・効果的な情報発信を試みることにある。

<各対象層に対する発信情報>

アウトリーチ活動の基本は、情報の受け手を明確にし、その受け手に必要十分な情報を提供することである。そのため、MI²I では様々な受け手を想定して、それに見合う情報提供を行った。

広く一般向けの情報発信であるフォーラムと主に専門家向けのチュートリアルセミナー等のイベントを企画した。フォーラム、チュートリアルについては、特に参加条件制約を設けず、希望する方はどなたでも参加が可能なイベントとして企画した。ただし、会場の容量

制約があるので先着順を基本として募集し、定員に達すると募集を終了した。この他に会員限定の情報交換の場であるコンソーシアムがあるがこれについては別章で説明する。

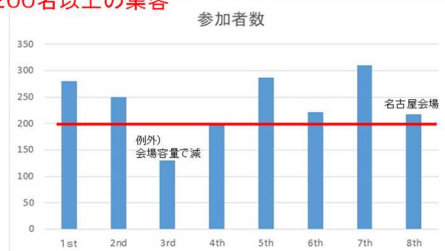
4. 1 一般向け～フォーラム

一般向けにプロジェクト運営方針と進展状況の定期的な情報発信の場として設定した。東京地区の一橋講堂を基本として定例化した。これまでの実施状況を表 4-1 に示す。2018 年度までに年 2 回ペースで 8 回実施した。2 回以降はプログラム構成がほぼ定まり、プロジェクト成果である研究ポスター展示や MI 導入に関する個別相談会も定着した。毎回提供する定例コンテンツとその回特有のトピックを組み合わせたプログラム構成とした。集客は、ほぼ毎回 200 名以上を超えた（図 4-1）。

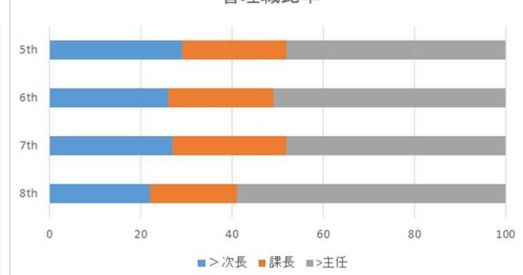
	時期	会場	トピック	理事 PL	研究ポスタ	企業事例	個別相談会
第1回	2015.09	一橋講堂	官学民(4企業)よりMI期待の講演	○	^	○	^
第2回	2016.01	一橋講堂	ベイズ最適化の概要、コンソーシアム設置の提案	○	○	○	○
第3回	2016.09	JST東京	機械学習とは何か、チュートリアル計画紹介	○	○	○	○
第4回	2017.02	一橋講堂	研究グループ毎の成果報告開始	○	○	○	○
第5回	2017.09	一橋講堂	計測インフォマティクスの提言	○	○	○	○
第6回	2018.02	一橋講堂	プロジェクト中間点振り返り	○	○	○	○
第7回	2018.09	一橋講堂	新トレンド 深層学習の事例紹介	○	○	○	○
第8回	2019.02	名古屋	中部地区研究者を中心に	○	○	○	○

表 4-1 MI²I フォーラム実施状況

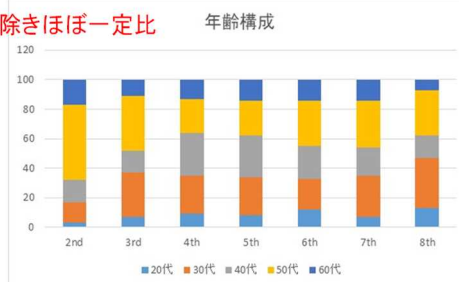
毎回200名以上の集客



管理職比率



初期を除きほぼ一定比



民間企業からの参加がほとんど

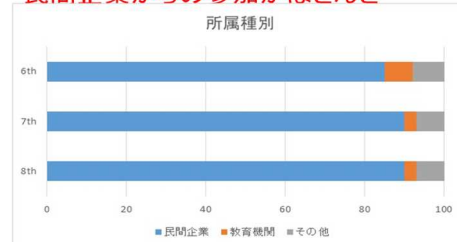
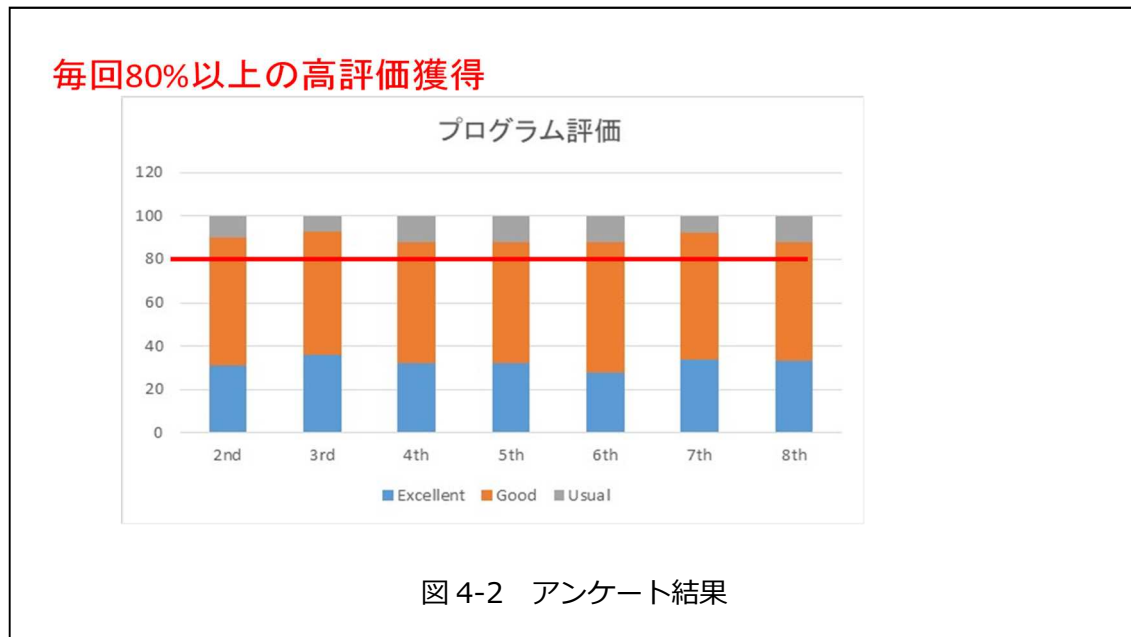


図 4-1 参加者分析

毎回、ほぼ同じ設問のアンケートを実施し、参加者の意識の変化を把握して、プログラム企画やあるいはMI²I運営全体の参考にもした。全体的なプログラム構成に関する満足度推移を図4-2示す。



4. 2 専門家向け～チュートリアル・ハンズオン

専門家向けのチュートリアルについては表4-2に示す3階層のプログラムで対応した。

	対象	概要	工夫
MI²iチュートリアルセミナー	企業の研究マネージャー ～100名規模	機械学習に必要な各要素をシリーズで解説 わかりやすいことを最優先 2018 2回	講師資料は 印刷配布 数式は基本使わない DVD化
ハンズオンセミナー基礎コース	企業技1術担当 MI入門者 ～数10名規模	機械学習の基本的な考え方を学びPythonサンプルコードで材料事例で実習 2018 6回	講義教材をipynb形式 UL DLより自習を可能に ポリコム利用で多点配信
ハンズオンセミナー実践コース	企業MI専門家 MI実践者 ～数名規模	プロジェクトで開発した解析ツールの使い方を実習する 2018 4回	開発者から説明 アシスタントケア PC環境設定対策

表 4-2 技術者・研究者向けセミナー

＜チュートリアルセミナー＞

MI の技術的な概要を理解するための講義形式のチュートリアル。頻度は年 2 回程度とした。受講者としては材料関連企業の研究部門の管理職、マネージャークラスを想定し、難解な数式等を極力用いず、MI の技術の構成要素を基礎面、応用面から紹介するものとした。講師は、主に MI²I のグループリーダー、場合によっては、MI²I 外の大学、研究機関の専門家に依頼した。

表 4-3 に過去実施したチュートリアルセミナーの実施状況をまとめた。午後半日のコースで各回特定のテーマについて概ね 2 名の講師による座学形式の内容で実施した。前半は基本事項を、後半は応用面を主体に講演するよう依頼し、半日という短時間で一通りの理解ができるように配慮した。

トピックスの決定には、産業界での経験が豊富な副 PL（真鍋）を中心に、毎回の参加者アンケートで希望の多いトピックスを踏まえ、複数のアカデミアの専門家の助言も参考とし、かつ全体としての網羅性も意識しつつ企画・決定した。前半は主に最新のアルゴリズムなど比較的基本となる内容を、第 6 回以降の後半は、それらが活用される研究での応用例を主体に構成した。

	日程	会場	トピックス	講師数	ソフトデモ
第 1 回	2016 03	JST 東京	最先端のデータ科学事例紹介	3	
第 2 回	2016 07	JST 別館	次元削減回帰アルゴリズム	2	
第 3 回	2016 10	全日通労	最適化アルゴリズム	1	○
第 4 回	2017 01	全日通労	位相データ解析	2	○
第 5 回	2017 07	全日通労	逆問題や深層学習の可能性	1	
第 6 回	2017 11	JST 別館	計測インフォマティクス	3	
第 7 回	2018 01	JST 別館	データ生成(触媒と蓄電池)	2	
第 8 回	2019-09	JST 別館	第一原理計算によるデータ生成	2	
第 9 回	2019 12	JST 別館	記述子生成と転移学習	2	○

表 4-3 チュートリアルセミナー実施状況

毎回、会場最大容量に近い 80～100 名の集客実績となった（図 4-3）。満足度は、取り扱うテーマの関心度に上下があり変動しているが、ほぼ 80%の満足度を確保してきた。年齢構成も扱うテーマにより多少変動しているが、40 歳代を中心として 30 歳代から 50 歳代で大半を占めている。またほとんどが民間企業からの参加となっており、年齢構成とともにフォーラムの観客属性に近いと思われる。

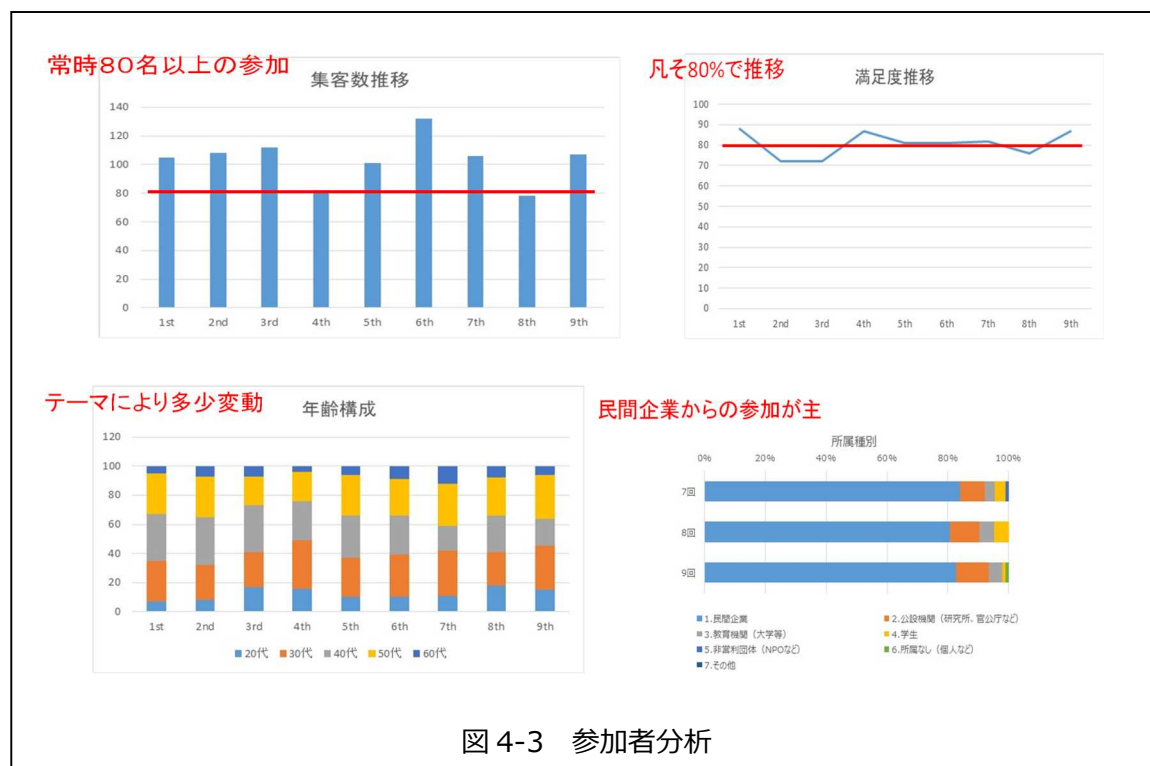


図 4-3 参加者分析

＜ハンズオンセミナー＞

座学のチュートリアルと並行して、実習を伴うハンズオンセミナーを企画・実施した。材料シミュレーションでも物性物理を理解し、計算手法を学んでも、すぐに固体の電子構造計算ができる訳ではなく、ソフトウェアの使い方を事例で学ぶ必要がある。MI の場合はデータ前処理、解析、結果の解釈などさまざまな勘所がある。そのため、入門編から上級編までを企画した。ただし、機械学習全般を網羅することは目的とはせず、材料データを対象に具体的にどうするか的事例を示し、体得できるセミナーとした。実施状況について表 4-4 にまとめた。

	日程	場所	人員枠	内容	ポリコム多点
中級	2017.07	FOCUS	20	分類 python ライブラリー	
中級	2017.09	FOCUS	20	回帰 python ライブラリー	
中級	2018.01	FOCUS	20	最適化 python ライブラリー	
入門	2018.07	JST別館	40	Orange	2
初級	2018.06	JST別館	40	分類 python ライブラリー	2
初級	2018.10	JST別館	40	回帰 python ライブラリー	2
初級	2019.02	JST別館	40	最適化 python ライブラリー	2
中級	2018.11	JST別館	40	Scikit-Learn python ライブラリー	2
上級	2019.01	JST別館	40	ベイズ他 python ライブラリー	2
実践	2018.08	名工大	10	論文事例のワークフロー	
実践	2018.12	名工大	10	論文事例のワークフロー	
実践	2018.11	FOUCS	20	開発コード 第一原理計算	1
実践	2019.02	統数研	5	開発コード データベース利用	

表 4-4 ハンズオンセミナー実施状況

材料データを対象とした機械学習の入門とは別に、MI²I で開発したアプリケーションやデータライブラリーを使った実習セミナー（実践コース）も企画・実施した。それぞれの実施内容については表 4-5 にある通りである。

	概要	PC環境	工夫
蓄電池探索論文 1日コース	論文データセット 記述子生成 VESTA NAP等 「解析のながれの理解」	インストール済み端末	リアルなデータ 研究室サーバーから 市販ソフトで解析 アシスタント配備
結晶構造探索 1日コース	結晶構造探索 CrySPY 第一原理計算と連動 「第一原理に触る」	スパコンリモート 固定端末からアクセス	専用実習室利用 ライセンス回避 QE 遠隔地アクセスもトライ アシスタント配備
記述子統合解析1 日コース	XenonPy OpenDatabase 記述子生成 転移学習など 「まず体験」	コンテナ型仮想化技術 各自PCにインストール	環境設定 Docker オープンデータ アシスタント配備
その他のライブラ リー	HomCloud NAP 等	インストール済み端末	各研究拠点で実施 アシスタント配備

表 4-5 ハンズオンセミナー 実践コース

昨今、機械学習のセミナーは民間企業や大学等で数多く企画・実施されている。その中にあって、単に参加者数を増やすだけでなく、参加者の満足度を上げるために、イベント企画・開催にあたっては毎回のアンケートを実施し、その結果を踏まえて企画を立てた。また、年度の早い段階で年間スケジュールを示す配慮も行った。

数理科学の文科省プロジェクト（数学協働プログラムおよび数学イノベーションプラットフォーム）の支援も一部受けて、チュートリアルに関しては講演を録画し DVD を作成して、参加できなかった PJ メンバーやコンソーシアム会員には希望に応じて配布することを行った。

セミナーはメイン会場を東京としたが、協力機関である阪大産研および東北大金研（計算物質科学人材育成コンソーシアム：PCoMS 代表機関）にはテキストを事前配布した上で、テレビ会議システムによって講義配信を行った。セミナーにおいて使用するソフトウェアはなるべくオープンソースのものを採用した。これは受講後に自社・自宅ですらに作業を発展させることが出来るようにするためである。

こうしたきめ細かい対応もあって、受講者にはおおむね好評であり、将来にわたっての継続的な実施を希望する声強い。

4. 3 課題

MI²I のハブ拠点である NIMS は国研であるので、MI²I の三つの機能、COE 機能、DPF 機能、スクール機能の内、前 2 者はナショナルセンターとして発展させていくことになるが、NIMS においては MI²I のスクール機能的な人材育成はあまり取り組み事例がないので、本節ではスクール機能の MI²I 終了後の維持発展についてのみ以下の 3 点から今後の課題を整理する。

- ・ 啓蒙的な内容の情報発信
- ・ 入門的な手法の教育訓練
- ・ 専門的なアルゴリズム・手法の利用普及促進

<啓蒙的な内容の情報発信>

プロジェクト開始時点に比べ、多くの機関（民間企業を含む）からデータ科学一般に関する啓蒙的な内容の情報発信（セミナー、講演会）が比較的高頻度で発信されるようになった。問題は材料特有の問題への対処に関する情報が十分かという点にあるが、この点についても提供されつつあるようになってきている。その意味ではハブとしてのこのスクール機能は使命を果たし終えたともいえるが、体系的に整理した書籍は、いまだにない。これは MI という学問の体系化が遅れているということを意味する。学問としての体系化はこの分野全体の課題であるが、この動向を踏まえた啓蒙活動は今後必要である。

<入門的な手法の教育訓練>

チュートリアルセミナーについてはその講演の動画を DVD 化した。コンソーシアム会員ならびに、配布希望者に対しては教育的利用に限り利用する旨の誓約書をもって配布している。累計で全 10 巻の DVD が完成している。これは材料のデータ科学に関する様々な観点について、国内一流の講師による、総計 35 時間に及ぶ教材ライブラリである。またハンズオンセミナー基礎コースについても回を重ねつつ、テキストの品質を改善した。Notebook 形式の教材となっているので、社内教育におけるプレゼンテーション資料としてもプログラム実行サンプルとしても利用可能である。こうした MI²I で得られた教材等は今後も当該分野の入門において活用していくことが望まれる。

<専門的なアルゴリズム・手法の利用普及促進>

これらは日々進化していく内容となるので、開発した研究機関が主体となって普及促進を図るべきものである。ハブ拠点構築事業により、複数のサテライトが設置できており、それぞれのサテライトでは専門的なツールが開発されている。これらのツールの普及活動は各サテライトの自立的運営の要素である。その際、前述の入門的な手法教材との併用により入門レベルから上級レベルの広い社会要請への対応が容易となる。ネットワークを形成するサテライト自身も自立できる状態を「国分寺方式」と呼んでいるが、この国分寺方式の定着に向け、各拠点主体のスクールイベントの実施を行っていく必要がある。

MI²I では主に企業人を対象としたスクール機能活動への道筋をつけることを行ったが、こうした活動は持続的であることが必要であり、かつ、ハブ機関だけで行うものでもない。現在、大学等の教育機関においてデータ科学人材の教育・養成事業が行われ、また、厚生労働省などの事業として産業界におけるデータ活用人材育成プログラムなども行われているが、MI に絞ったスクール機能はあまり行われていないこともあるので、今後は各「国分寺」等が中心となってスクール機能を継続的に行うことが望まれる。

5. JST の貢献

本章は JST 落合推進プログラムオフィサー、大図主任調査員にご執筆いただいた（伊藤記）

イノベーションハブ構築支援事業は、受託機関が自ら設計した構想・計画の下にプロジェクトを推進することに加えて、JST が多様な支援を行いプロジェクトの目的である国立研究開発法人の機能強化を効果的に推進することとしている。具体的には JST 雇用されたプログラムマネージャー（PM）の派遣、JST が有する調査・研究活動の情報提供・支援、プロジェクト推進ノウハウの提供などである。

MI²I における JST の貢献については、PM の派遣とデータプラットフォーム（DPF）に関する外部有識者委員会の運営が挙げられる。PM は第 2 章に記載の通り、主に MI の社会実装の推進を図った。具体的にはコンソーシアム活動を推進し企業と MI²I との連携促進と MI の普及・促進を図り、さらに具体的な MI 手法をチュートリアル、セミナーを開催して企業に普及させた。本章では、DPF に関する外部有識者委員会の運営について説明する。

<JST を事務局とした DPF 委員会の運営と活動経緯>

DPF はアカデミアの研究者のみならず多くの産業分野の企業研究者など多様なユーザに利用されてはじめて日本の産業競争力の向上に貢献できる。また材料データは NIMS だけで収集できるものではなくユーザの多様な開発目的に呼応して多くの大学、研究機関、企業の協力を得ることで利用価値のあるデータが収集できると思われる。そのために MI²I では、外部の有識者から構成される「マテリアルズ・インフォマティクスデータプラットフォーム委員会（以下、DPF 委員会）」を、DPF の構想、運用、方針を議論する場としてプロジェクトの開始と同時に 2015 年に設立した。この委員会が第三者委員会として機能するよう、事務局を JST が担当することがプロジェクト提案時から計画されていたが、初年度（2015 年度）は JST 側の体制整備が間に合わず MI²I（NIMS）が事務局となり 2 回開催された。初年度は主に MI²I-DPF の基本的なシステム構成、基本計画が議論され、DPF の運用が開始された。

二年度目（2016 年度）からは、事務局を JST に移して運営され DPF のあるべき姿（グランドデザイン）を MI の現状、将来像を踏まえて俯瞰的な立場から議論するとともに、民間企業などユーザの利便性の向上を重要な論点として議論を進めている。事務局を JST が担うことにより、国研である NIMS が構築する材料 DPF の公共性、汎用性、可用性、データ秘匿性などについて幅広い見地から助言をいただくことができ、国研である NIMS の材料 DPF の構築に貢献できたと考えている。

委員会は現在 15 名で構成され、研究開発法人、大学、民間企業より計算科学、オープンサイエンス、材料メーカなどの専門家を委員としている。

委員会の議事は報告、発表、審議で構成した。報告は NIMS の伊藤委員長、徐委員より、MI²I で構築している DPF の計画、進捗、運用状況について報告していただいた。発表は、各回の議題に適した内容の当委員会の委員を含む外部の専門家に依頼して 2 名程度発表し

て頂いた。審議内容は、DPF の構築ならびに運用状況に応じて審議内容(議題)を事務局で設定した。これまでに開催した 6 回の議事を表 5-1 にまとめた。

各回の進行に関して、第 1 回の委員会では東洋大の芦野先生から DPF の現状、課題に関する全般的な動向をお話しいただいた。第 2 回目以降の各回では主要な課題に着目した話題提供に基づき議論を深めた。第 2 回はデータ収集に関して NIMS 知京氏、KEK 大友氏より装置から大量に発生するデータを効率的に収集する方法について報告を頂いた。第 3 回はリポジトリとしてのシステム設計を特にセキュリティ保持の観点から NII 山地氏よりお話しをいただいた。第 4 回はデータの利活用に関する制度面、運用面の取り扱いに関して AIST 小島氏より報告いただいた。また、第 5 回にはアカデミアから MI の最新の成果事例、大学研究室における MI 事情に関して東工大大場氏よりお話しを頂き、第 6 回には NIMS で新たな DPF の構築を進めているデータプラットフォームセンター(DPFC)のデータ収集の新しい取り組みに関して NIMS 吉川氏より報告をいただいた。更に、第 3 回目以降は材料開発・製造の当事者であり MI²I-DPF の想定ユーザである民間企業から、旭化成 河野氏(第 3 回)、日立製作所 宮崎氏(第 4 回)、新日鐵住金 濱荻氏(第 5 回)、村田製作所 檜貝氏(第 6 回)の各氏より MI 及び DPF に対する企業および業界としての期待と要望についてお話しをいただいた。事務局のとりまとめで、第 2 回にグランドデザイン(案)の提案、第 5 回以降に論点整理のリストを作成し委員会の議論内容についてとりまとめを進めている。第 7 回(2019 年 11 月 11 日開催予定)の委員会を最終として本委員会の取りまとめを行い、次世代の DPF への引継ぎを含めた DPF の進むべき方向性について提案を行う。

表 5-1 DPF 委員会開催経緯

委員会 回数	開催日	講演・報告 者	報告者・ 所属	タイトル
第 1 回	2016.7.1	テーマ	DPF の課題抽出	
		ご挨拶	内閣府 横田毅、文科省 西條正明	
		伊藤委員長	NIMS	MI ² I の体制と本 DPF 委員会の位置づけ
		芦野俊宏	東洋大	ビッグデータとオープンサイエンスの時代のデータプラットフォームの現状と課題について
		徐委員	NIMS	構築中のデータプラットフォームの概要と課題について
第 2 回	2016.11.28	テーマ	データ収集・グランドデザイン	
		伊藤委員長	NIMS	前回の整理、最新進捗報告
		知京豊裕	NIMS	小型無線チップをつかった材料データ収集システム

		大友季哉	KEK	J-PARC における物質・生命科学研究のためのデータ収集システム
		徐委員	NIMS	材料データベースの最新の国際情勢と将来動向
		伊藤委員長	NIMS	DPF グランドデザインについて
		ご意見	内閣府 夏目穰、文科省 田村泰嗣	
第3回	2017.7.5	テーマ	DB 基盤のセキュリティ・企業報告 旭化成	
		伊藤委員長	NIMS	前回の整理、NIMS の新体制について、コンソーシアム活動について
		徐委員	NIMS	DPF の運用状況
		河野禎市郎	旭化成	DPF への化学系企業からの期待
		山地一禎	NII	SINET5 上に構築する研究データ基盤からの情報共有ーセキュリティとサービスモデルの側面からー
		ご意見	内閣府 夏目穰、文科省 田村泰嗣	
第4回	2017.12.14	テーマ	研究データ取り扱いの動向・企業報告 日立製作所	
		伊藤委員長	NIMS	全体情勢について（DPFC、MOP-MI との関係）
		木原委員	JST	コンソーシアム活動について（前回の整理を踏まえて）
		徐委員	NIMS	DPF の運用状況
		宮崎克雅	日立製作所	日立におけるマテリアルズ・インフォマティクスの活用例と DPF への期待
		小島功	AIST	研究データの取り扱い等に対する経産省及び産総研における最近の動向について
		ご意見	内閣府 夏目穰、文科省 田村泰嗣	
第5回	2018.7.18	テーマ	MI の最新成果（中間報告）・企業報告 新日鐵住金	
		伊藤委員長	NIMS	DPF-C 実装に向けた MI ² I-DPF および DB の基本構想及び戦略
		徐委員	NIMS	MI 研究における DB の使用例と DPF の今後の課題
		濱萩健司	新日鐵住金	製造系企業の研究開発の将来に向けた DPF に対する期待

第6回	2019.1.24	大場史康	東工大	MI に基づいた電子材料探索における DB の利用例及び課題
		ご意見	内閣府 柳田真利、文科省 村上望	
		テーマ	DPF 課題の論点整理・企業報告 村田製作所	
		伊藤委員長	NIMS	DPF-C 実装に向けた MI ² I-DPF およ び DB の基本構想及び戦略
		徐委員	NIMS	材料データベースの連係：物質辞書 およびデータフォーマットの提案
		檜貝信一	村田製作 所	将来を見据えた、企業への MI の導入 促進策と MI 関連プロジェクトに対す る期待
		吉川英樹	NIMS	材料 DPF センターにおけるデータ収 集の施策と適用事例
		落合 推進 PO	JST	論点整理
		ご意見	内閣府 登内敏夫、文科省 高橋功	

6. 展望

6. 1 事業終了後のハブ機能

本事業は国立研究開発法人が国家機関としての機能・使命を踏まえ、ハブ機関としての活動を加速・支援を行う事業である。一方で、NIMS においては橋本和仁理事長のイニシアティブの下、2016 年から革新的材料開発力強化プログラム（M-cube）が開始された。これは国研等の基礎研究力・成果を産業界につなげる橋渡し機能を強化する目的で行われているものであり、MI に限らず、材料全般を対象とするものである（図 6-1）。



MI²I を開始した 2015 年時点では NIMS 内には MI²I を担当する研究拠点のみがあったが、NIMS には少ないながらもデータ駆動型科学を遂行でき、かつそれを志向する研究者も存在したので、その後、これを一つの部門に集めることを行った。現在の統合型材料開発・情報基盤部門である。この部門の中に MI²I 推進母体である情報統合型物質・材料研究拠点と、内閣府 SIP 事業を担当するラボ、データ駆動型研究開発の基盤となるデータプラットフォームを構築・運用するセンターが設置され、かつ、現在では三つの研究グループが設置されている。これらの組織には MI²I 参画から異動（採用）した人も含まれている。MI²I で実施した研究開発要素はこの部門を中心にさらに発展させられていくと共に、M-cube 事業で行われている産学連携の仕組みの中でも生かしていくことになる。組織として MI²I 活動がビルトインされていくといえよう（図 6-2）。

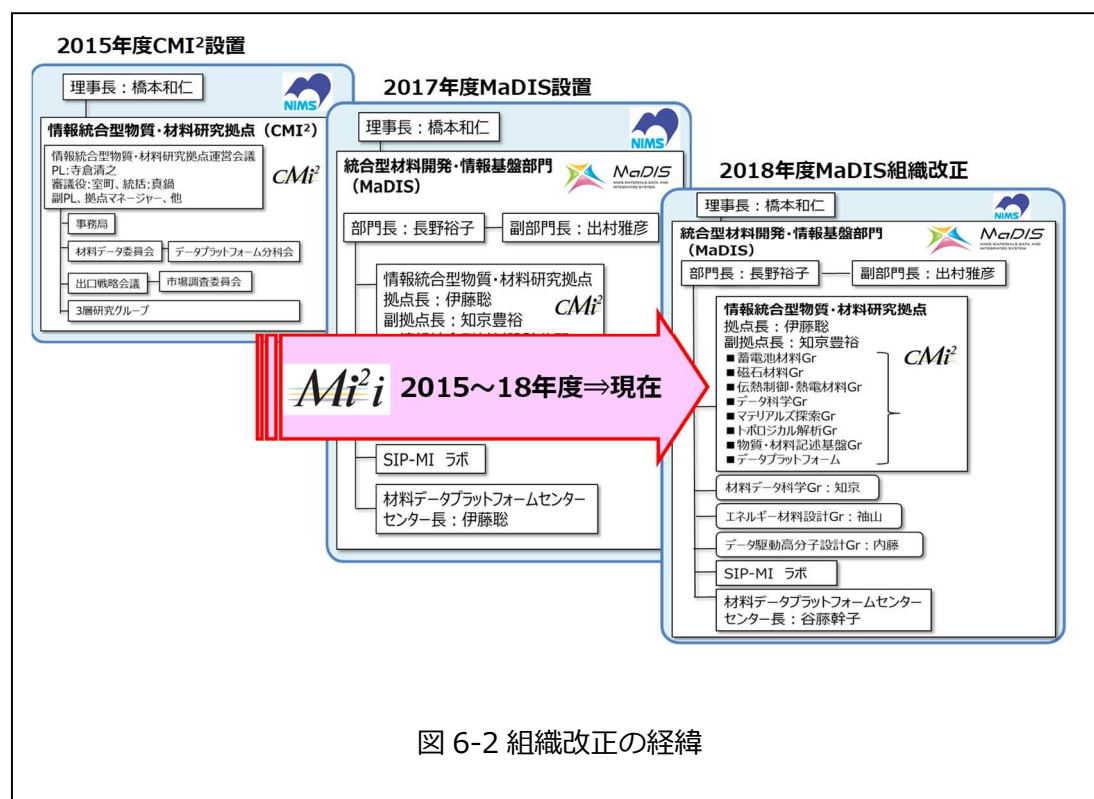


図 6-2 組織改正の経緯

MI²I で開発したデータプラットフォーム (DPF) は既存データベース (MatNavi) を拡充改善し、MI ツールを整備したものであるが、材料データの国家基幹システムとしての DPF 開発整備が M-cube の一環として NIMS で進められている。MI²I の DPF はそのプロトタイプとして位置づけられるが、M-cube での DPF は MI²I では全く行っていないデータ収集スキームとリポジトリシステムとしての機能をもつ、先進的なシステムとなっている。

MI²I コンソーシアム活動を通して構築した産業界とのネットワークは、より共創の場として効果的に機能する制度を事業終了後に NIMS の活動として開始することで、発展させる予定である。とくに MI²I で産学がともに技術の面でも制度の面でも試行した活動を踏まえて、データ駆動型材料開発を産学あるいは学学共同研究体制の下、強力に推進していく。

MI は実験研究との強い連携も必要であって、そのためには学協会での MI 分野振興施策が有効である。現在、いくつかの学協会での振興施策が進行しているが、この企画・実施にあっては実験研究に豊富な経験をもつ副 PL (知京) の貢献が大きい。

6. 2 本事業・本分野の展開

本事業はイノベーションハブ構築に向けた国研のシステム改革という、これまでにない国の事業として位置づけられたものであるが、MI²I ではその枠組みを生かして、学問の意味でも糾合が必要な新規融合領域であるマテリアルズインフォマティクスの開拓と振興を行った。MI のハブ拠点構築はもとより、ハブ拠点を総本山とした国分寺が構築されつつある。MI²I では大学等の研究機関との連携強化を進めたが、MI は材料データを基盤とすることから、大規模データ創出機関を国分寺化していく必要もある。大規模データ創出機関とは具体的には SPring-8 などの放射光施設であり、理研横浜研究所などの NMR 施設であり、

大学計算センターのスパコン施設である。それぞれの分野にあっては独自のコミュニティが存在しているので、そのコミュニティに適合した仕組みが必要である。その意味で地域の国分寺だけではなく分野としての国分寺が必要で、これらの国分寺と総本山の間でデータ・情報がやり取りされることが物質・材料も含めたデータ駆動型科学技術推進のエコシステムであろうと期待する（図 6-3）。MI²I はその実現に向けた第一歩である。

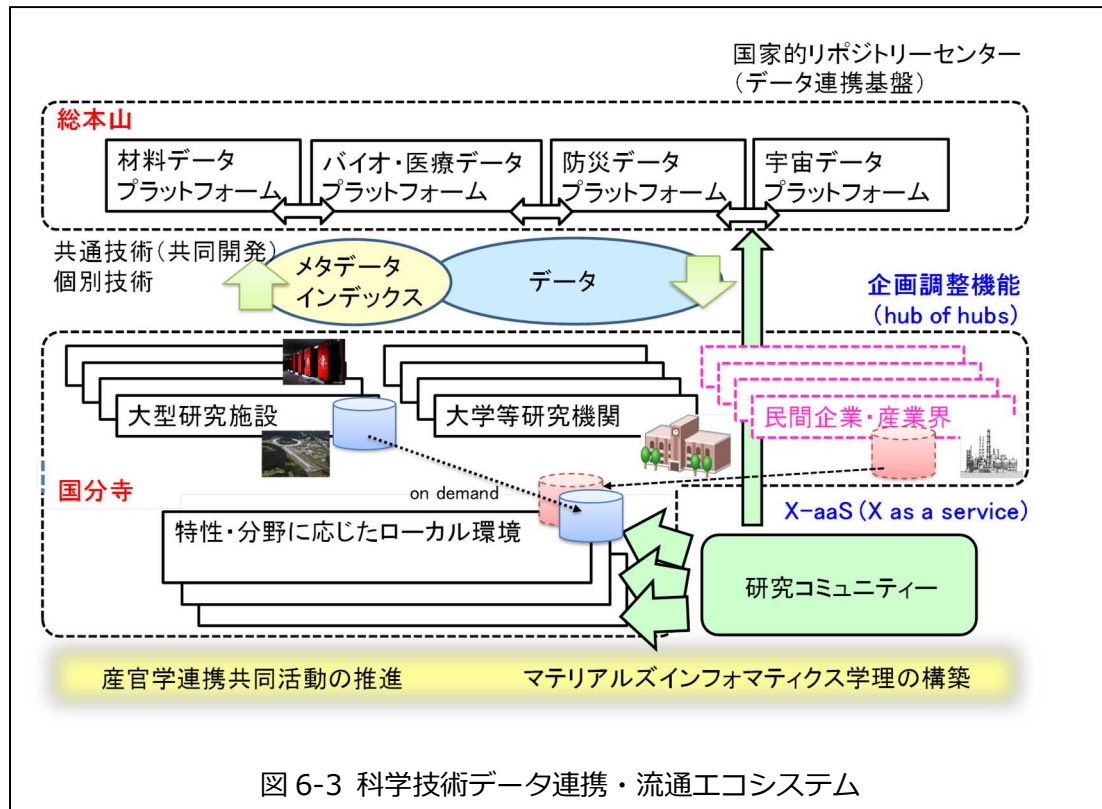


図 6-3 科学技術データ連携・流通エコシステム

今後の事業設計において、参考になることを期待して、以下に今後検討すべき課題を提起しておく。

① 変化し続ける仕組み

システム改革は一過性のものであってはならず、常に改善し続ける必要がある。研究にあっては科研費等の競争的予算獲得によって新しい研究に展開していくことができるが、システム改革を対象とするそうしたものがなく、とくにイノベーションハブ構築という最終的に達成すべきものを最初にテーマ設定をしてしまうと、これをさらに発展させる後継事業そのものを設定・整備しにくくなる。終了後に実施機関で自立して実施していくことも、予算等の課題もあり、現実的には困難である。しかしながらこうした「システム改革」は産業界にあっては『カイゼン運動』に他ならない。『カイゼン運動』は製造業の現場の中から生まれたリーンマネジメントの一つであるので、これをそのまま国の研究機関に適用することは適切ではないだろう。今後、予算措置も含め『公的研究機関におけるカイゼン運動』という新しい仕組み・制度が必要であるように思われる。

② 弾力的な事業実施運用

本事業では雇用されている研究者が他の競争的資金を獲得してもエフォート管理の上では定年制職員同様であるなど、本事業の運用は非常に弾力的であった。これをさらに進め、抜本的な変更、さらには実施期間の変更（延長や打ち切り）も検討されてしかるべきである。これは当初の計画立案が未熟であったということや実施状況が不適切であったということではなく、特にデータ科学のような分野は進展が急速であり、かつ事業開始時点で将来を見通し切ることが難しいからである。また、技術面だけでなくデータマネジメントに関する諸制度の動きにも対応する必要があるが、これも見通し切れるものではない。しかし、だからと言って細かいステージゲートを設けることは実施主体者を疲弊させるだけであるので適当ではないことも強調しておきたい。実施状況に合わせて計画を改善するローリングプランニング方式を導入することを検討するべきであろう。

③ コミュニティへの貢献

新興・融合分野において持続性をもって活動が続けるにはそれに相応しいコミュニティの形成・構築が欠かせない。それは研究会を主導するようなアカデミアのコミュニティや業界団体的な産業界のコミュニティ、その両方が関係する産学協調コミュニティである。このようなボトムアップ的活動を支援し、コミュニティ活動への貢献を副次的な目的・評価対象とする国の事業が切に望まれる。コミュニティ活動こそが当該分野の科学技術エコシステムの基盤である。

以上

別紙一覧（目次）

別紙 1：2015 年度報告書、エグゼクティブサマリー

別紙 2：2016 年度報告書、エグゼクティブサマリー

別紙 3：2017 年度報告書、エグゼクティブサマリー

別紙 4：2018 年度報告書、エグゼクティブサマリー

別紙 5：2019 年度報告書、エグゼクティブサマリー（案）

2015 年度報告書 エグゼクティブサマリー

<主な活動>

ハブ構築・運営：「情報統合型物質・材料研究拠点（CMI²）」を新設、情報・数理分野の研究者を含め 100 名を超えるハブ拠点を構築した。（外部：39 名の招聘研究員、8 名のオープンラボ研究者） MI²I フォーラム開催（2 回）を通じ、産業界からの期待・要請等を取入れ、コンソーシアム会則案、趣意書を公開し、コンソーシアム会員の募集を開始。運営室体制、会議体を整備し、活発な拠点事業を推進した。

研究開発：蓄電池材料、磁石・スピントロニクス材料、伝熱制御・熱電材料の各グループは、それぞれの分野において、データベース構築、第一原理に基づく物性計算、界面など構造のモデル化など、データ駆動に必要な情報収集、あるいは必要技術の開発を強力に進めた。一方、データ科学、物理モデルグループは、データ駆動のためのツール群を精力的に開発した。それらは、目的材料の高速スクリーニング法、有用な記述子の選択、物性予測法、構造情報の定量化法など広範にわたる。（本文 P-4、及び P-44～68 参照）これらの成果は、9 件の学術論文（解説記事を含む）、82 件の口頭発表（外部機関による招待講演 20 件を含む）として公表された。

<特筆すべき成果>

ハブ構築・運営：産学官の材料科学・計算科学と情報・数理科学との人材・情報交流の場を設け、20 回を超える交流会・勉強会・公開講座の開催を通じ、相互理解と連携研究の加速を飛躍的に進展できた。

研究開発：蓄電池材料グループの中山教授（NIMS 招聘研究員、名古屋工業大学）は、無機材料結晶構造データベースから抽出したリチウム酸化物のイオン導電性を、高速評価（約 5,000 データ）することに成功し、最適電池材料の迅速な決定に道を開いた。今後、機械学習に基づく高精度古典力場の開発により、全固体電池開発に必要な物性データを、高精度かつ効率的に、産学界に提供できるようになると見込まれる。

データ科学グループの津田教授（NIMS 招聘研究員、東京大学）は、物性の予測や、結晶構造の最適化などを高速に行えるソフトウェアパッケージ COMBO（COMMON Bayesian Optimization Package）の開発に成功した。このソフトウェアの高速性・有用性は、結晶粒界の構造最適化等の具体例において明確に示され、データ駆動型の材料開発研究における汎用ツールとして、今後の活用が期待される。

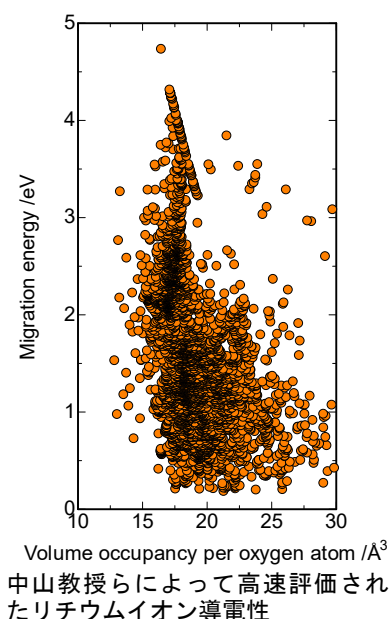
データプラットフォームグループの徐一斌（NIMS）らは、企業等アンケート結果やデータプラットフォーム委員会の提言を受け、本拠点のデータプラットフォーム（※）として最適なハードウェア、ソフトウェア、ネットワーク構成、認証システムなどの仕様を確定した。

<新しい仕組みの取り組みの進捗状況>

ハブ構築・運営：ハブが準備するデータプラットフォームを活用した出口課題解決への取り組みを主導する場としてコンソーシアム型活動方式を設計。2 回のフォーラムには、この活動の核となる産業界から多数の参加を得た（第一回：142 社 205 名、第二回：162 社 193 名）

<自己評価>

前例のない大規模なハブ拠点を発足し、運営・推進体制を整備。日本の情報統合型物質・材料研究を支える知的基盤（※）の足場を構築できた。（本文 P-69～72 参照）活発な人材・情報交流を通じ、研究開発面においても上記や本文 P-4、第 3 章のように、顕著な成果を多数創出できた。



2016 年度報告書 エグゼクティブサマリー

<主な活動>

ハブ構築・運営：「情報統合型物質・材料研究拠点（CMI²）」は NIMS の中長期計画に位置付けられ、情報・数理分野の研究者を含め 100 名超規模のハブ拠点を構築した。（外部：64 名、38 名の招聘・特別研究員を含む） MI²I フォーラム開催（2 回、延べ 150 企業から約 240 名が出席）を通じ、産業界からの期待・要請等を取入れ、MI²I コンソーシアム活動を開始した。前年度の名古屋工業大学に加えて 2 つ目の NIMS サテライト拠点を大阪大学に設置、新たに 2 件の連携覚書締結、理研 AIP との共同研究契約書締結等、活発な拠点構築事業を推進できた。

研究開発：蓄電池材料、磁石・スピントロニクス材料、伝熱制御・熱電材料の各グループは、それぞれの分野において、データベース構築、第一原理に基づく物性計算など、データ駆動に必要な技術開発を強力に進め、データ駆動型手法の開発・適用を大幅に増強した。一方、データ科学、モデリンググループは、データ駆動のためのツール群を精力的に開発し、出口グループとの連携により具体的な課題解決に適用開始した。それらは、非周期的構造情報の定量化、ナノ構造系熱輸送計算手法の開発法、未踏領域新物質の同定など広範にわたる。これらの成果は、61 件（前年度比+52）の学術論文（解説記事を含む）、260 件（同+178）の口頭発表（外部機関による招待講演 74 件（同+54）を含む）として公表された。

<特筆すべき成果>

ハブ構築・運営：産学官の材料科学・計算科学と情報・数理科学との人材・情報交流の場を設け、20 回を超える交流会・勉強会・公開講座の開催を通じ、相互理解と連携研究をさらに加速できた。

研究開発：伝熱制御・熱電材料グループの塩見准教授（NIMS 招聘研究員、東京大学）は、ナノ構造の熱輸送を計算するグリーン関数法とベイズ最適化手法（COMBO）を組合せ、ナノ構造を最適化する手法を開発した。Si・Ge 2 元系材料に適用し、全候補数の数%の構造計算だけで最適構造の同定を可能にした。熱抵抗最大となる最適構造は、周期的超格子構造でなく、非周期的層構造であることを明らかにし、その機構をフォノンの粒子性と波動性の組合せによって説明した。

データ科学グループの吉田准教授（NIMS 招聘研究員、統計数理研究所）は、iqspr（図 i：所望物性を有する分子構造を予測するプログラム）と第一原理計算との統合プログラム SPACIER を開発した。iqspr が設計する仮想分子群に対し、第一原理計算による仮想実験を行い、構造物性データ追加・再学習を繰り返しながら、未踏のターゲット領域に存在する新物質を同定できる。

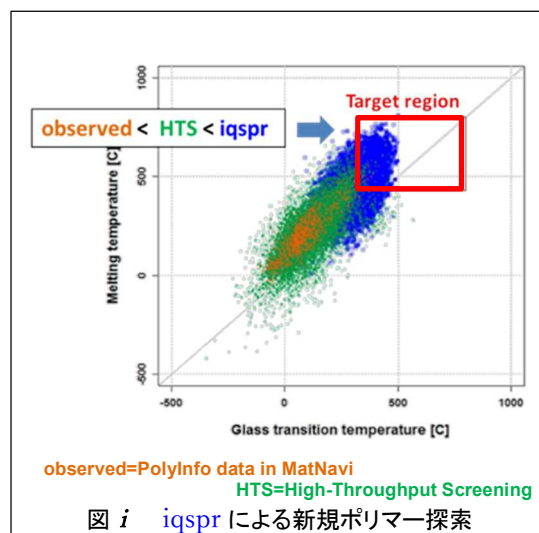
データプラットフォームグループの徐 GL（NIMS）らは、企業等アンケート結果やデータプラットフォーム委員会の提言を受け、MI²I データプラットフォーム（以下、MI²I-DPF）を構築し、ハブ拠点内部（MI²I コンソーシアム会員も含む）向けのサービス提供を開始した。

<新しい仕組みの取り組みの進捗状況>

ハブ構築・運営：ハブが準備する MI²I-DPF を活用した出口課題解決への取り組みを実践する場として MI²I コンソーシアム活動を開始、45 社から 148 名の活動員が登録済み。利用者講習会を開催し、共有知識基盤といえる MI²I-DPF の社会実装に向けた取り組みを開始した。

<自己評価>

前例のない大規模なハブ拠点を構築し、運営・推進体制を整備。日本の情報統合型物質・材料開発を支える知識基盤として MI²I-DPF を提供し、社会実装に向けた運用を計画通り開始した。活発な人材・情報交流を通じ、研究開発面においても後述のように、顕著な成果を多数創出できた。



2017 年度報告書 エグゼクティブサマリー

<主な活動>

ハブ構築・運営：情報・数理分野の研究者を含め 200 名弱規模のハブ拠点を構築・拡充（外部：77 名、45 名の招聘・特別研究員を含む）、MI²I コンソーシアム活動員 235 名（63 社）と合算すると 400 名超規模の事業に成長させた。MI²I フォーラム開催（2 回、延べ約 470 名が出席）、MI²I チュートリアルセミナー開催（6 回、延べ約 420 名が参加）など、大きな輪になりつつある。7 件の連携覚書、4 件の共同研究契約等、活発な拠点構築・運営事業を推進できた。

研究開発：蓄電池材料、磁石材料、伝熱制御材料の各グループはデータ駆動に必要なデータ・ツールを開発、及びツール群を精力的に開発した要素技術開発 4 グループとの連携により、データ駆動型手法の適用を大幅に前進させた。特に、手法開発にとどまらず新物質探索・発見、合成・計測等実験的な実証を多数実践できた。それらの成果は、95 件（前年度比+34 件）の学術論文（解説記事を含む）、218 件（同+58）の口頭発表、8 件のソフトウェア（累計で 21 件）として公表された。

<特筆すべき成果>

ハブ構築・運営：MI²I コンソーシアム活動の着実な拡充（63 社（同+18 社）、活動員 235 名（同+58 名））ができた。また、NIMS 研究者が準備した例題を使ったハンズオン形式のセミナーを開催した。（3 回、延べ 59 名が参加）

研究開発：森川教授（NIMS 特別研究員、東工大）と吉田 GL（NIMS 特別研究員、統数研）らは、iqspr を用いて高熱伝導性を持つ新規高分子材料の構造を予測し、合成・計測による実証に成功した。AI が自律的にデザインした物質が実際の発見に至ったという事例は、現時点では皆無に等しい。今回の発見は、マテリアルズ・インフォマティクス歴史に残る金字塔と言っても過言ではない。（図 i 参照）

津田 GL（NIMS 招聘研究員、東大）らは、モンテカルロ木探索・深層学習・シミュレーションの組合せで新しい有機化合物を生成するソフトウェア ChemTS を開発・公開し、田村研究員（NIMS）らと連携し ChemTS で予測した有機化合物を合成、目標特性値（光吸収波長）の発現を確認した。

高際主任研究員・Hou 特別研究員（NIMS）らは、津田 GL と連携しベイズ最適化手法を n 型 Al-Fe-Si 系材料の最適組成化に適用し、予測した材料を合成して中温域の出力特性を約 40%向上させた。熱電特性へ機械学習を適用し実証した世界初の事例となる。（特許出願済み）

徐 GL・Wu ポスドク研究員・後藤主席研究員・佐々木特別研究員（NIMS）らは、独自のデータセット構築と特性予測モデルを提案し、高分子材料並みの低熱伝導性を有する新規 Bi/Si ナノ複合材料を機械学習で探索・設計、無機薄膜では世界最小熱伝導率の断熱材料となることを実証した。（特許出願済み）

<新しい仕組みの取り組みの進捗状況>

ハブ構築・運営：ハブが準備する MI²I-データプラットフォーム（DPF）を活用した出口課題解決への取り組みを実践する場としての MI²I コンソーシアム活動を改善、コンソーシアムイベントでは双方向コミュニケーションを開始した。その結果、会員が相互に連携して社会実装に向けた MI²I-DPF の活用策を協議し、有志による自主的な WG 活動の立上げ・拡張（約 30 名参加）に進展した。

<自己評価>

前例のない大規模な研究開発ネットワーク（400 名超）を構築・拡充し、論文・発表、各種イベント（自主開催を含む）で質の高い情報発信を継続して拡張できた。このネットワークは将来のハブ拠点にとっても有益な無形資産となりうる。また、日本の情報統合型物質・材料開発を支える知識基盤として MI²I-DPF を提供し、MI²I コンソーシアム活動と連動させることで社会実装に向けた運用を強化した。CPMD2017 開催、MI²I-Letter シリーズの発行開始等、活発な人材・情報交流を通じ、研究開発面においても後述のように、顕著な成果を多数創出できた。

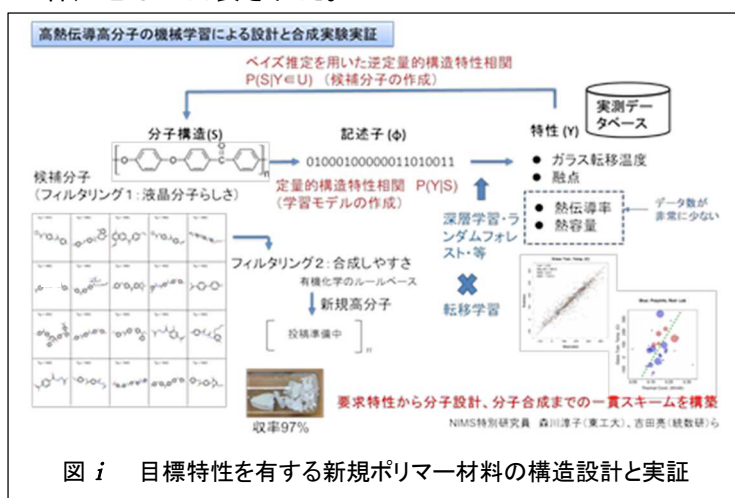


図 i 目標特性を有する新規ポリマー材料の構造設計と実証

2018 年度報告書 エグゼクティブサマリー

<主な活動>

ハブ構築・運営：情報・数理分野の研究者を含め 200 名規模のハブ拠点を構築・維持（外部：77 名、43 名の招聘・特別研究員を含む）、MI²I コンソーシアム（法人会員 82 社（活動員 316 名）、アカデミア会員 10 名）と合算すると **500 名規模の事業**を維持した。MI²I フォーラム開催（2 回、延べ 528 名出席）、MI²I チュートリアルセミナー開催（座学 2 回：延べ 185 名、ハンズオン 10 回：延べ 402 名参加）など、大きな輪になっている。7 件の連携覚書、4 件の共同研究契約（アカデミア）、18 件の企業との共同研究契約（ハブ関連のみ）等、活発な拠点構築・運営事業を推進できた。

研究開発：蓄電池材料、磁石材料、伝熱制御材料の各グループはデータ駆動に必要なデータ・ツールを開発するとともに、**ツール群を精力的に開発**した要素技術開発 4 グループとの連携により、**データ駆動型手法の適用をさらに前進**させた。手法開発にとどまらず新物質探索・発見、合成・計測等実験的な実証を多数実践できた。それらの成果は、**104 件（前年度比+9 件）の学術論文**（解説記事を含む）、241 件の口頭発表（前年度比+57 件）、累計 26 件のソフトウェアとして公表された。

<特筆すべき成果>

ハブ構築・運営：MI²I コンソーシアム活動を着実に拡充できた（82 社（前年度比+19 社）、活動員 316 名（同+81 名）、アカデミア 10 名（同+1 名））。また、「Python を使った MI 講習会」の習熟度別コース、MI²I で開発されたコードを実際に走らせる実践コース等合計 10 回のハンズオンセミナー（前年度比+7 回）を開催した。習熟度別コースは大阪大学・東北大学へオンライン配信を行い、受講機会の拡充も図った。

研究開発：特定の電磁波を放出する波長選択性輻射多層膜の構造に関しベイズ最適化手法と厳密結合波解析法によって全領域の 2 % を探索するだけで最適設計解を得ることに成功した。その解である SiO₂/Ge 多層膜を実際に合成し特性評価したところ、ほぼ設計値通りの輻射波長と特性であることを確認・実証した。構造制御によって電磁気的特性およびエネルギー特性を調整・設計できることでエネルギー分野での幅広い応用が期待できる。（図 i 参照）

ほかにも結晶構造データベースをもとに、圧力誘起超伝導転移を予測・設計し、新しい超伝導材料の合成に成功するなど、MI 的手法の実験的検証を進めた。

その一方で、離散幾何学を用いてガラスなどの乱れた系の特徴付けを行う手法を開発し高圧下でのガラス構造を理解することや、キュリー温度を記述する記述子間の階層的クラスタリングから記述子間の相関関係を理解するといった、MI 手法を通して物質特性の理解が深まった。

<新しい仕組みの取り組みの進捗状況>

ハブ構築・運営：ハブが提供する MI²I-データプラットフォーム（MI²I-DPF）を活用した出口課題解決への取り組みを実践する場として、MI²I コンソーシアム会員活動員有志によるワーキンググループ活動を更に拡大し、有機材料グループと無機材料グループに分けて展開。活動状況を全体会議・フォーラム等で紹介し、MI²I 参画者との情報共有を推進した。

<自己評価>

大規模な産学官研究開発ネットワーク（500 名超）を構築・維持し、論文・発表、各種イベント等で質の高い情報発信を継続できた。このネットワークは将来のハブ拠点にとって有益な無形資産である。また、日本の情報統合型物質・材料開発を支える知識基盤として MI²I-DPF を改善・提供し、MI²I コンソーシアム WG 活動への展開や個別の共同研究（ハブ・サテライトで 18 件）への発展など、社会実装に向けた運用を大きく加速できた。

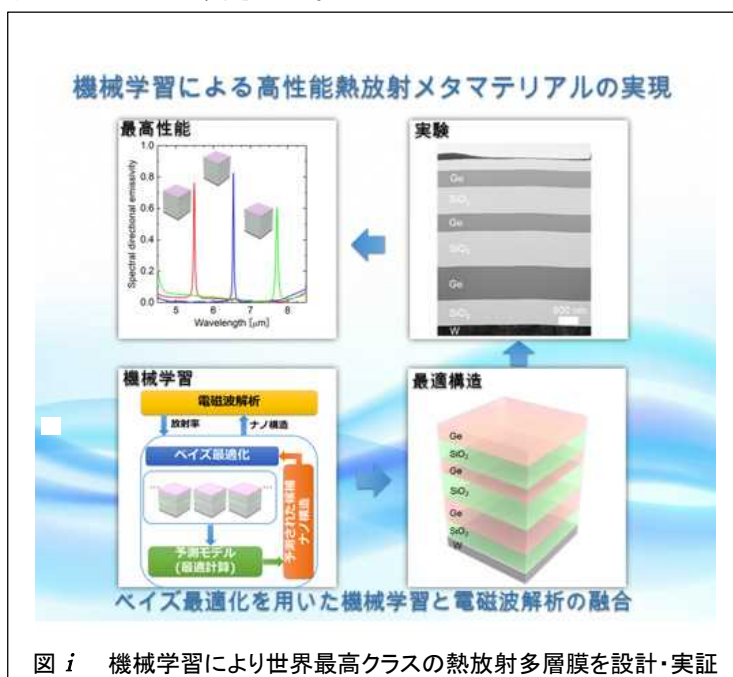


図 i 機械学習により世界最高クラスの熱放射多層膜を設計・実証

2019 年度報告書 エグゼクティブサマリー(案)

<主な活動>

ハブ構築・運営：情報・数理分野の研究者を含め 200 名規模のハブ拠点を構築・維持（外部：77 名、43 名の招聘・特別研究員を含む）、MI²I コンソーシアム（法人会員 90 社（活動員 335 名）、アカデミア会員 10 名）と合算すると 500 名規模の事業を維持した。最終報告会（MI²I フォーラムと全体会議を一体化）開催（延べ 550 名出席見込み）、MI²I チュートリアルセミナー開催（座学 1 回：111 名、ハンズオン 15 回：延べ 479 名参加見込み）など、大きな輪になっている。10 件の連携覚書・共同研究契約を継続、23 件の企業との共同研究契約（ハブ関連のみ、+5 件）等、活発な拠点構築・運営事業を推進できた。

研究開発：蓄電池材料、磁石材料、伝熱制御材料の各グループはデータ駆動に必要なデータ・ツールを開発するとともに、ツール群を精力的に開発した要素技術開発 4 グループとの連携により、データ駆動型手法の適用を継続した。手法開発にとどまらず新物質探索・発見、合成・計測等実験的な実証を重点課題とした。それらの成果は、学術論文（解説記事を含む）、口頭発表、MI 解析用ソフトウェア／データベース等として公表された。

<特筆すべき成果>

ハブ構築・運営：MI²I コンソーシアム活動を着実に拡充できた（90 社（前年度比+8 社）、活動員 335 名（同+19 名）、アカデミア 10 名（同+0 名））。また、「Python を使った MI 講習会」の習熟度別コース、MI²I で開発されたコードを実際に走らせる実践コース等合計 15 回のハンズオンセミナー（前年度比+5 回）を開催した。習熟度別コースは大阪大学・東北大学へオンライン配信を継続、受講機会を拡充した。

研究開発：

塩見（NIMS 特別研究員、東京大学）らは絶縁体（SiO₂）、半導体（SiC）、有機材料（PMMA）からなる複合細線構造を用いた波長選択性輻射構造体を、量子コンピュータ（D-WAVE 社製 2000Q）を用いて最適設計を行った。量子コンピュータで採用されている量子アニーリング手法における最適化アルゴリズムを材料設計向けに開発し、これによって特定の波長帯域のみを通過させる高性能バンドパスフィルタの設計に成功した（図 i 参照）。

小嗣（NIMS 特別研究員、東京理科大学）らは、磁性材料の磁区構造の解析にトポロジカル解析手法（パーシステントホモロジーダイアグラム）を適用し、磁化過程の特徴量を抽出することに成功した。これは永久磁石として重要な特性である保持力の改善に向けた開発指針となることが期待される。

田村（NIMS）、津田（NIMS 招聘研究員、東京大学）らは、ベイズ最適化ツール「COMBO」の活用を拡充するため、Windows 版プログラムを制作・公開した。併せてハンズオンセミナーで普及を図るなど、MI 手法の産業界へ普及促進に大きく貢献した。

<新しい仕組みの取り組みの進捗状況>

ハブ構築・運営：ハブが提供する MI²I-データプラットフォーム（MI²I-DPF）を活用した出口課題解決への取り組みを実践する場として、MI²I コンソーシアム会員活動員有志によるワーキンググループ活動（有機材料／無機材料の 2 グループ）を継続した。メンバー間で共同作業を進め、データ取得から転移学習までの一連のワークフローを実践した。活動状況を紹介し、MI²I 参画者との情報共有も推進した。

<自己評価>

大規模な産学官研究開発ネットワーク（500 名超）を構築・維持し、論文・発表、各種イベント等で質の高い情報発信を継続できた。このネットワークは将来のハブ拠点にとって有益な無形資産である。また、日本の情報統合型物質・材料開発を支える知識基盤として MI²I-DPF を改善・提供し、MI²I コンソーシアム WG 活動への展開や個別の共同研究（ハブおよびサテライトで 23 件）への発展など、社会実装に向けた運用を更に加速できた。本プロジェクト目標は全項目、達成された。

