

# NIMS でのマテリアルズインフォマティクス研究概要紹介

伊藤 聡

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

NIMS では従来より大規模材料データベース MatNavi を構築・整備し、web 上で研究者・技術者に提供してきた。MatNavi は高分子 DB、超伝導 DB、無機材料 DB、金属 DB、計算電子構造 DB などから構成される総合的な材料 DB であり、材料分野におけるデータ駆動型科学「マテリアルズインフォマティクス」を進めるにはこうしたデータベースが必要不可欠である。この MatNavi の存在を大きな要因として、2015 年 7 月より JST イノベーションハブ構築支援事業の一環として、「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Materials Research by Information Integration Initiative: MI<sup>2</sup>I)」が NIMS をハブ拠点として実施されている。

MI<sup>2</sup>I では MatNavi に API を開発・実装し高機能化するとともに、データ科学的な研究に基づく機械学習の解析ツールを開発し、これを組み合わせた材料データプラットフォームを構築している。こうした材料データプラットフォームも活用して、現在、磁性材料、蓄電池材料、伝熱制御材料を具体的テーマとしてマテリアルズインフォマティクスの研究を進めている。マテリアルズインフォマティクスは学際的かつ新興分野であるので、その専門家は少ない。そのため東北大、阪大、名工大、産総研、統数研、東大、北陸先端大などをノード機関としたオールジャパン体制を敷いている。さらに産学官にわたるコミュニティを構築するために、MI<sup>2</sup>I コンソーシアムを 2016 年に立ち上げた。コンソーシアムではマテリアルズインフォマティクスを座学で学ぶだけでなく、手を動かして体得できる場も用意しているし、現在開発中の材料データプラットフォームを試用することも可能である。すでに MI<sup>2</sup>I では新しい全固体蓄電池向けの材料の候補物質の提案、化合物半導体の熱伝導特性を設計する手法を見出すなどの成果が得られているが、今後はそうした候補物質のいくつかを具体的に合成し、実験によって実証していく方針である。

マテリアルズインフォマティクスをさらに進めていくには、より幅広い情報源からの材料データの収集・集約が必要である。これを行うために、今年度から NIMS では次世代材料データプラットフォームの構築を開始した。ここでは IoT 的な発想に基づく実験・計測機器からのデータ収集、収集したデータの高付加価値化、テキストデータマイニング技術を活用した文献からのハイスループット・ハイクオリティデータ収集、機関レポジトリシステムとの連携、データ間の関連付けを行った階層的高機能データベース、データベースを利用した解析ツール・利用環境の整備を進めている。今後、数年間のうちにナショナルセンターとして運用が開始される予定である。

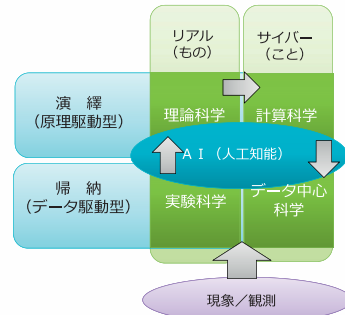
実験・計測機器から得られるデータには物理的に意味あるデータとノイズが混在し、解析手法によって抽出できるデータが変わってくる。従来の計測技術はここに大きなボトルネックがあった。計測データの解析にインフォマティクス・機械学習の技術を取り入れることが昨今、重要になってきている。NIMS においても、先端的な計測技術を駆使した研究を行っている部門もあり、現在、横断的に計測インフォマティクスへ取り組んでいるところである。今後、このような活動を NIMS 外とも連携して進めていくことを計画している。

## NIMSでのマテリアルズインフォマティクス 研究概要紹介

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8月9日

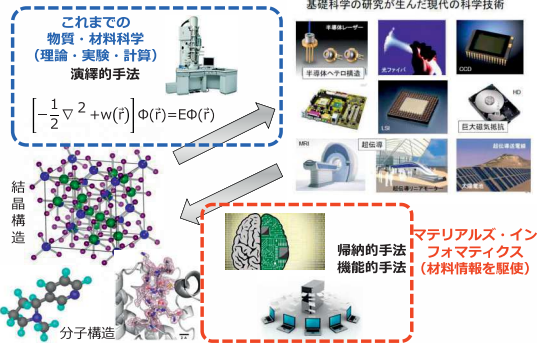


## 科学技術の発展過程

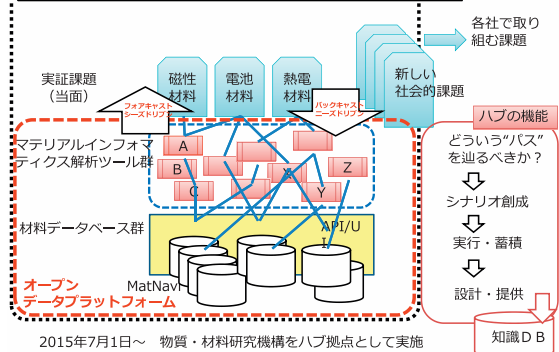


北川源四郎 (情報システム  
研究機構) の資料を改変

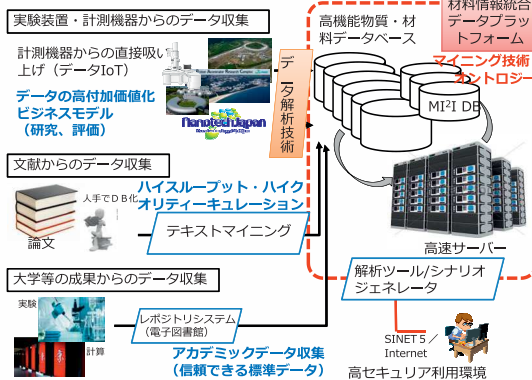
## 変革する物質・材料研究開発



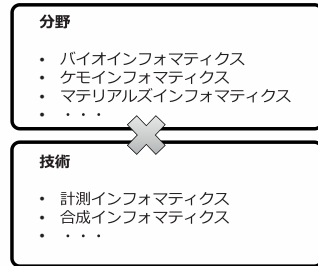
## 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ MI<sup>2</sup>: "Materials research by Information Integration" Initiative



## 物質から材料へ ～ プロセスデータの収集 ～



## 物質から材料へ ～ xインフォマティクス ～



ハイスループットからインフォマティクスへ