

SPring-8材料構造の解析に役立つ計算科学研究会(第3回)／
第10回SPring-8先端利用技術ワークショップ



MI²Iが構築する新しい物質・材料開発の 産学官連携体制

MI²I プログラムマネージャ／JST
伊藤 聡 ITOH.Satoshi@nims.go.jp
2017年2月27日

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

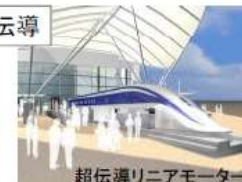
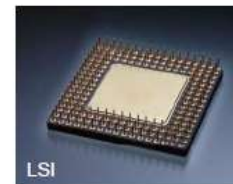
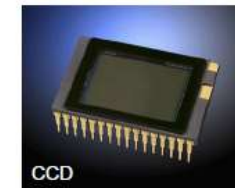
これまでの
物質・材料科学
(理論・実験)

演繹的手法

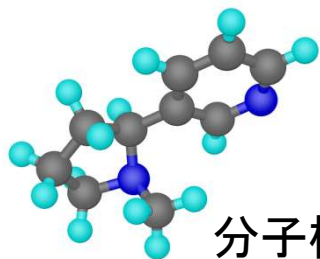
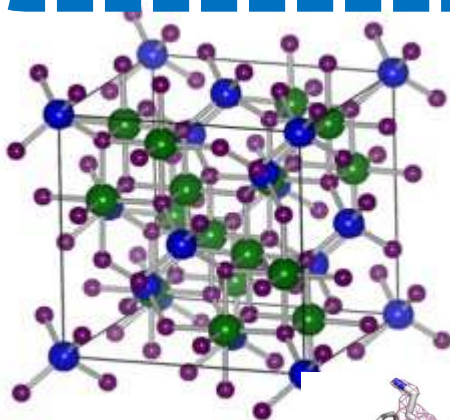
$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + w(\vec{r}) \right] \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r})$$



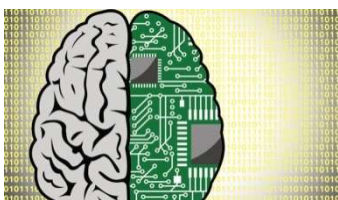
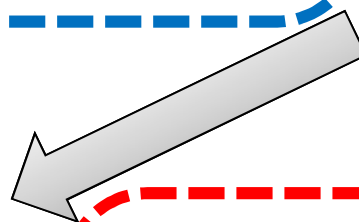
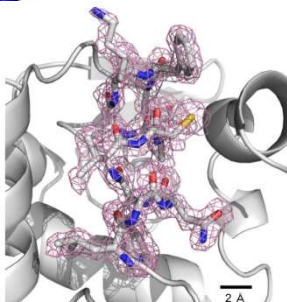
基礎科学の研究が生んだ現代の科学技術



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
(材料に関する
データを駆使)

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ
MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

PL: 寺倉清之

各社で取り
組む課題

実証課題
(当面)

磁性
材料

電池
材料

熱電
材料

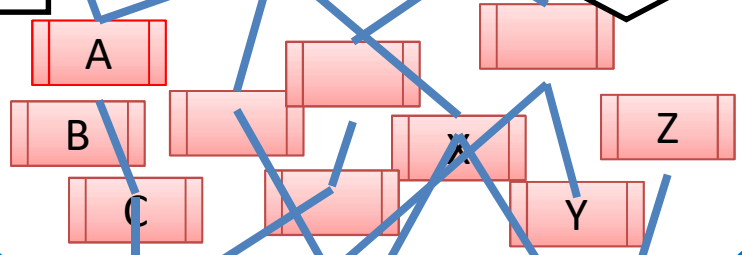
新しい
社会的課題

フォアキャスト
シーズドリブン

バックキャスト
ニーズドリブン

ハブの機能

マテリアルインフォマ
ティクス解析ツール群



どういう“パス”を
辿るべきか？



シナリオ創成

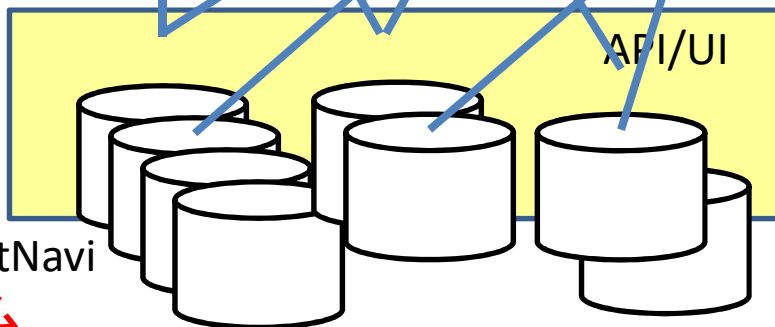


実行・蓄積



設計・提供

材料データベース群



オープン
データプラットフォーム



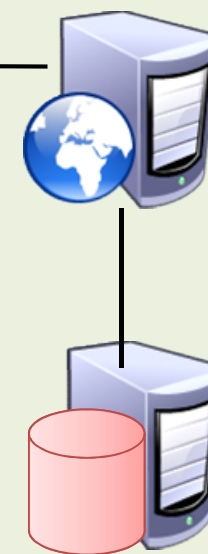
2015年7月1日～ 物質・材料研究機構をハブ拠点として実施

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

ハードインフラ ⇒ データプラットフォーム(プロトタイプ)構築・運用
セキュア環境と利便性・アクセシビリティの確保

想定ユーザ数: ~200名

MI²iポータル
(API、解析ツール)API DBサーバ(NIMS
材料DBシステム
MatNavi等のデータ)

NIMSイントラネット

計算クラスター(48台)

大容量ス
トレージ(200TB)MI²iクラウド(サーバ12台)バーチャルマシン
(データ解析、機械学習)

VPN

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

MatNavi ポータル

- MatNavi GUI無料公開



MI²i ポータル

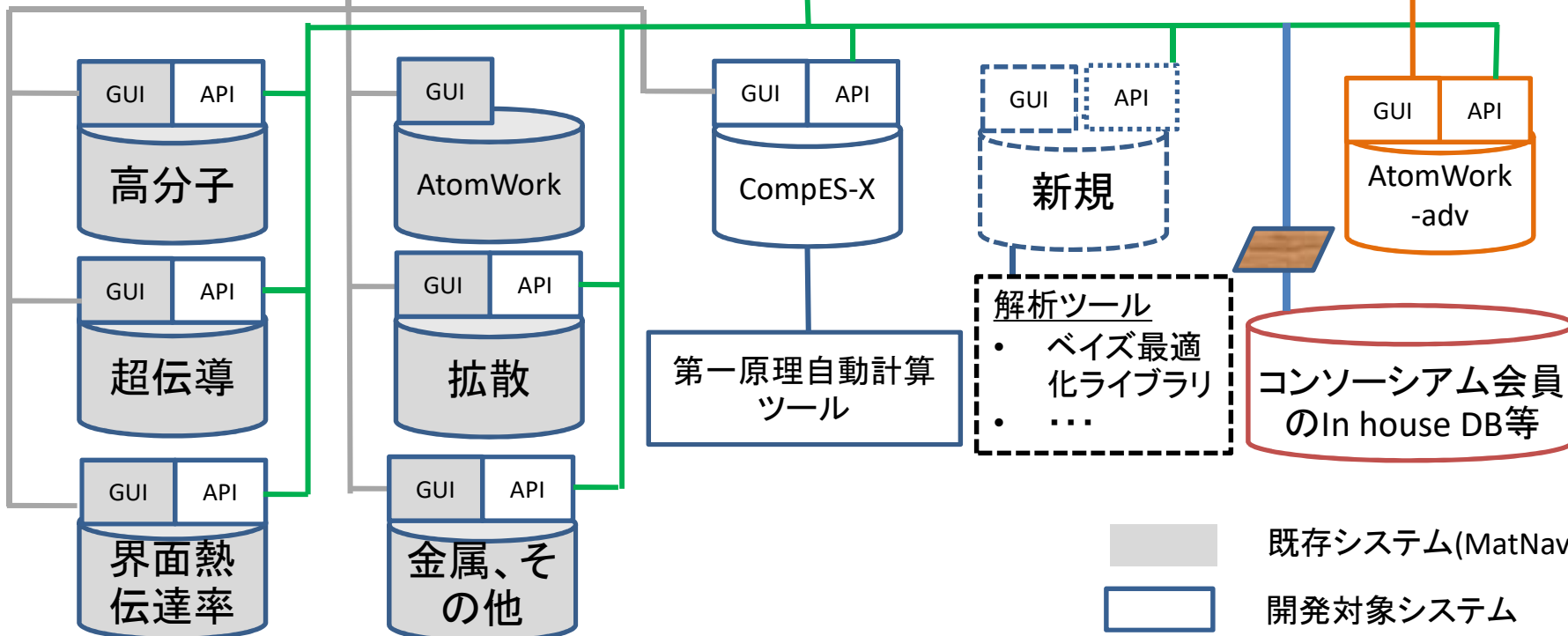
- API公開
- ツール公開
- 外部リンク



AtomWork-adv Web版



ツール群
(場合によって、APサーバを設置)



情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

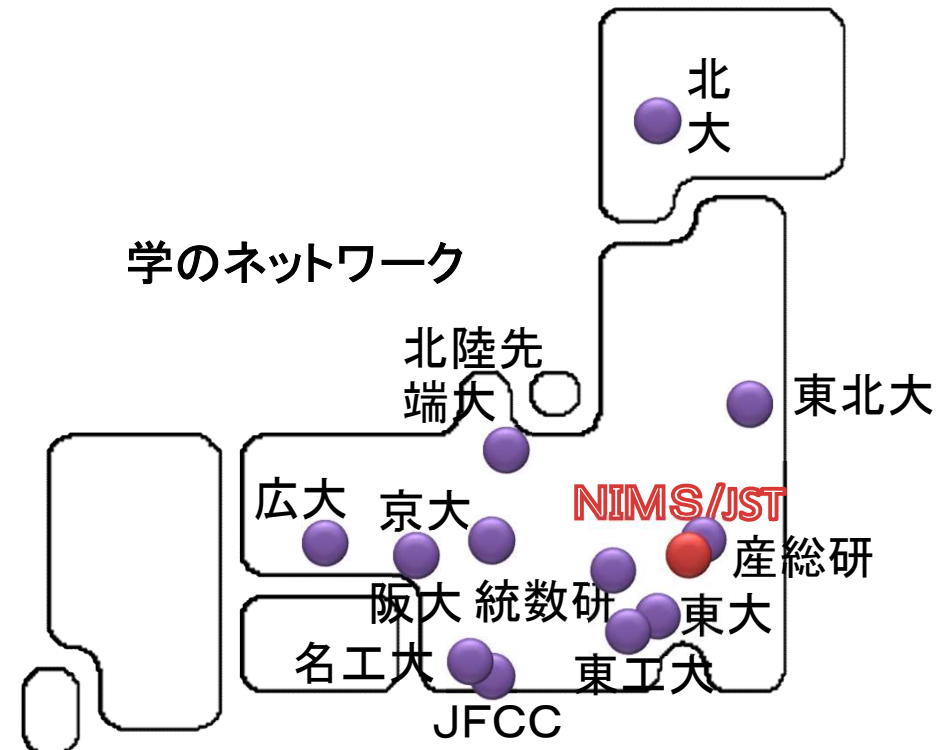
オールジャパン体制(ネットワーク)の構築

地域間連携によるオールジャパン

- ハブ拠点としてのNIMS/JST
- 学のネットワーク・・・東北大、東大、東工大、北陸先端大、名工大、京大、阪大、産総研、統数研、JFCC
- **社会実装サテライト拠点**

セクター間連携によるオールジャパン

- **従来型の産官学連携**
- **新しい産官学連携**
- 知的基盤分野連携



情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

1社と実施

ソフトインフラ ⇒ 人材糾合策:
広い分野の産学のプレーヤが利
用しやすい複数の仕組みを実装

共同研究契約型の参加

- ◆ 特定企業向けのカスタマイズを想定した事業
- ◆ 研究開発予算は企業側が負担
- ◆ 成果非公開



コンソーシアム型の参加

- ◆ ハブ拠点機能のトライアルユース
- ◆ 会費無料
- ◆ 成果はコンソーシアム内公開

40社(～80人)
6人(アカデミア)

約100人が参加

ハブ拠点構築(集中研)に参加

- ◆ 拠点事業戦略に沿った研究開発
- ◆ 研究開発予算は拠点側が原則負担
- ◆ 成果は拠点に帰属

6月28日(火) コンソーシアムキックオフ開催



コンソーシアムが目指すもの

- 材料開発にかかわる研究者・技術者がMIの知識を身につけ、それぞれの研究開発業務に活用
- 材料DBおよびMIツールを試用し、使いこなせる実践的スキルの体得
- MI技術を実証・実用化していくための相互活動(情報共有、DPFシステムへのフィードバック、研究開発テーマの探索・提言等)
- MIを推進していく産官学・分野横断型コミュニティーの形成・醸成
- これらの活動の拠点となる『場』がコンソーシアム

マスタースケジュール(年度目標)

2016年度	メンバー間の意識合わせ 先行事例の学習・検討
2017年度	先行事例の調査・精査 DPFシステムの試用
2018年度	DPFシステムの試用・活用 事例の検証(既存ツールとの比較)
2019年度	コンソメンバーの自前データでのDPFシステム利用

「コンソーシアムはうまくいかない」という通説(定説?)

コンソーシアムに参加するということはその技術分野に興味がある



興味を持っている分野で成果ができれば、利害関係がぶつかる



よって成果が出ないような“お付き合い”参加になる



コンソーシアムの活動が沈滞化



いつしか消滅



テーマの設定
が悪い!!



喩え話(しつこいですが...)

食事がしたい おなかすいたー



自炊



- 手間はかかるが自分の好きなものができる
- インハウスアプリ/自社設備

社員食堂

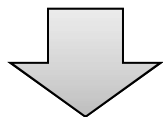


- 選択肢は限られるが、少し手を入れれば使えるシステム
- 国プロアプリ/国の研究施設(「京」、J-PARCなど)

高級料亭



- 高価かつ高い顧客満足度
- MIソリューション/解析受託機関



クッキングクラブ(≠料理教室)

- 食事は毎日する(一回ではない)
 - 自分が満足するものが食べたい
 - ...
- ということを料理の切り口で考えれば



- **誰もが**手を動かす
- 知識・技術を**相互に学ぶ**
- 共通技術を取り上げ、各社の**戦略課題は自社で実施**

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

MI²i: "Materials research by Information Integration" Initiative

兵庫県次世代材料開発研究会

【趣旨】

放射光実験施設の企業ユーザーを中心とした放射光データの新しい解析技術の研究

【実施内容】

- SPring-8を用いた解析用標準データの取得と解析
- 解析技術の共同研究

ご興味のある方は兵庫県企画県民部科学振興課までお問い合わせください



マテリアルズインフォマティクス研究の社会実装スキーム

アカデミア

- きらりと光る方法論
- 世界がぎくりとする成果

やり方・課題
解決シナリオ

産業界

- ビジネス展開の主役
- 国際競争力強化

実験装置・計測機器からのデータ収集



文献からのデータ収集



テキストマイニング
(理研AIPとの連携)

大学等の成果からのデータ収集



機関レポジトリシステム
(電子図書館)

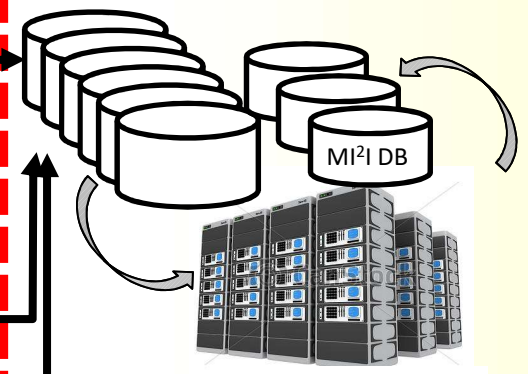
JST Central
事業(予定)

アカデミックデータ収集
(信頼できる標準データ)

材料情報統合データ
プラットフォーム

高機能物質・材料データベース

JaLC



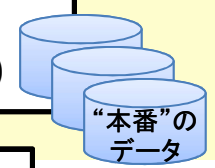
研究者・技術者コミュニティーによる研究推進

化学企業A
(カーボン素材)

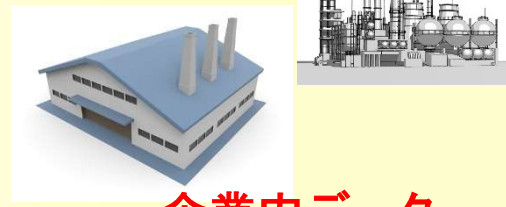


自動車企業B
(車体素材)

鉄鋼企業X
(高性能鋼)



電機企業Y
(燃料電池)



企業内データの
徹底活用