文部科学省 研究３事業連携へ 関係者が初めて集う

マテリアル戦略総合シンポジウム2023

～データを「つくる、ためる、つかう」ＤＸ基盤構築へ～

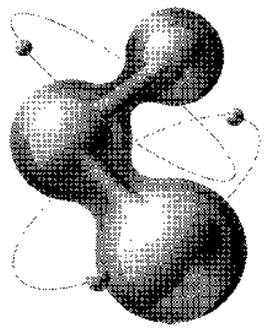
文部科学省などは2023年12月5日、マテリアル研究3事業の関係者が初めて一堂に会する「マテリアル戦略総合シンポジウム2023」（日刊工業新聞社、モノづくり日本会議協賛）を東京都千代田区の一橋大学一橋講堂で開催した。マテリアル分野の3事業を連携させ、データを「つくる、ためる、つかう」研究環境を整備することで、マテリアルDXプラットフォームの構築を目指す。リアル会場に170人、オンラインに478人の参加申し込みがあり、ポスターセッションも開いた。

開会あいさつで、文部科学省研究振興局の塩見みづ枝局長がマテリアル分野の研究DXを総合的に推進する「マテリアルDXプラットフォーム」の構築に向けた取り組みを説明した。マテリアル先端研究の共用設備から創出されたデータを蓄積・提供するためのマテリアル先端リサーチインフラ「ARIM（エーリム）」と、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトの「DxMT（ディーマテ）」、物質・材料研究機構（NIMS）のデータ中核拠点「DICE（ダイス）」の3事業の連携を「新たな知を生み出す基盤」とした上で、「マテリアルDXプラットフォーム構想を打ち出して今年で3年目。体制整備が着実に進捗している」と述べた。

続いてあいさつしたNIMSの宝野和博理事長は、「より多くのマテリアルデータを蓄積・利活用できるようDICEで開発したデータ蓄積・共用ツールRDEが稼働を始めている。ARIMはそれを使ってマテリアルデータの蓄積を始めており、いよいよマテリアルDXプラットフォームが動きだす」と期待を示した。さらに「まだ蓄積されているデータ量は十分とは言えないが、今後、積極的な利用をお願いしたい」と呼びかけた。

「新たな知」生み出す

RDE稼働…いよいよ本格化



セッション1・基調講演　データ駆動型研究を取り巻く環境

「サイロ化」壊さないと

LLMとの対話 重要

セッション1「データ駆動型研究を取り巻く環境」は冒頭で、文科省研究振興局の宅間裕子参事官が、主要国の政府や企業がデータ駆動型研究への投資を拡大している現状に対し、「我が国としてマテリアル研究開発のDXを一気に加速し、データ駆動型研究の新たなモデルを世界に先駆けて確立することが必要だ」と指摘し、基調講演に移った。

量子物質と触媒作用

基調講演には、まず東京工業大学の細野秀雄栄誉教授が登壇し、「量子物質と触媒作用」の演題で語った。「マテリアルゲノムなどデータ駆動型研究を強力に推進しているのは中国で、ターゲットは日本がこれまで先んじてきた材料開発だった」と明かし、「資金と人材が豊富だから日本が同じことをやっても絶対に負ける。日本の材料研究は実績と歴史があり、各分野 プリン（伝統領域を超える）」を訴え、「堅いものはサイロを壊す武器なので、これをデータサイエンスと人工知能（AI）ベースの方法論が良い上で「ビヨンド・トラディショナル・ディシ 触媒になる」と力を込めた。

東京工業大学栄誉教授
細野 秀雄氏

永久磁石設計のためのマテリアルズ・インフォマティクス

続くオーストリア・クレムス継続教育大学のトーマス・シュレフル教授は「永久磁石設計のためのマテリアルズ・インフォマティクス」の演題で講演した。シュレフル教授は数値微小磁気シミュレーションを応用し、磁気記録や磁気センサー、永久磁石の設計上の問題に取り組んできた。現在の研究テーマは材料科学への機械学習の活用で、「目的の特性を達成する適切な化学組成や微細構造を持つ材料を見つけることができる」とし、隠れた追加データの収集に科学論文のPDFによる大規模言語モデル（LLM）も適用。「信頼できる回答が得られるよう情報を再構築するためにはLLMとチャットのような対話を行うことが重要だ」とした。

オーストリア・クレムス継続教育大学教授
トーマス・シュレフル氏

東大拠点1000名の仲間と拓く新規エネルギー マテリアル・デバイス研究の新展開

仲間の数なら「世界一」

ＡＲＩＭでの東京大学微細加工拠点は床面積600平方㍍の連邦規格クラス１スーパークリーンルームに70台超の一流の大型微細加工装置を備える。昨年度は180研究室の1062人が登録し２万1000㌦の利用を得た。今年度は登録1100人超の見通し。欧州にもナノテク研究コンソーシアムが約40ありクリーンルーム面積3000平方㍍のパリの研究所を筆頭に、欧州平均1000平方㍍の拠点が続々整備され規模では見劣りする。ただ我々は小粒でピリリと辛い。仲間の数は文句なしの世界一で対等に張り合っている。

三田 吉郎氏
東京大学

ＤＸに向けて　～計測の標準条件とマテリアルマップ構築に向けて～

データ利用 簡単さ重要

ユーザー側としてはデータに簡単にアクセスでき、簡単にためられ、簡単に引っ張り出せる、という点が重要になる。検索性がさらに上がってくれば、みんながもっとデータを使ってみようという気になるだろう。我々も実際にＡＲＩＭを使ってデータを収集しＲＤＥで構造化してもらった経験があるが、非常にきれいに整えられたものが返ってきた。

あとは商用を含め、機械学習などのアプリケーションに入力するだけで、さまざまに応用できる。この辺りは非常に進んでいると感じている。

庄司 哲也氏
トヨタ自動車

データ創出・活用型磁性材料研究拠点における材料研究ＤＸの取り組み

外挿探索がポイント

新材料を見つけるにはどうしても人の手がいるが、ここが全く速くなっていない。そこでデータ連携による解析や、データがないところの外挿探索がポイントになる。研究データを自動的に構造化して蓄積するＲＤＥシステムに、ＰＩ（研究責任者）ごとにデータを蓄積する領域を作り、プロジェクトメンバーがデータセットを見られる形で実際に使っている。ＲＤＥを使ったデータ連携では、個人ごとに表記揺らぎなどもあるため語彙（ごい）リストを作っているところだ。さらに材料辞書の作成も考えている。

袖山 慶太郎氏
NIMS

セッション2　ＤＸＭＴ、ＡＲＩＭの融合

セッション3・パネルディスカッション　ＡＲＩＭ―ＤｘＭＴ融合に向けたＤＰＦインフラ発展への期待

「データ応用・人材」議論

セッション3では「ARIM―DxMT融合に向けたDPFインフラ発展への期待」と題したパネルディスカッションを実施した。ARIMとDxMT、そしてNIMSのデータプラットフォーム（DPF）機能について、「実験装置からのデータ 先端と応用」「ツールを使いこなす人材 現状と未来」という前後半二つの切り口から10人の研究者が議論した。

汎用的なDBが必要に

門平 DPFへの期待トークをいただきたい。

星野 ビッグデータ駆動による二酸化炭素（CO_2）分離膜の開発を手がける。旧来の試行錯誤的な研究に強みを持ち、とがったデータが多い。NIMSの研究者がRDEとのつなぎ役を果たし、ウェットの研究者でも使いやすい形でデータを蓄積できている。

松田 最先端材料のデータは皆がほしいわけではない。むしろデータベース（DB）的な汎用的なものが求められる。我々の拠点では皆が買いたくなるDBで、かつ世の中にまだ整っていないものを積極的に作り、データ駆動研究を進めるという議論も行っている。

竹村 RDEで便利なのは計測データのトランスファー（移動）だ。IoTセキュリティーデバイスを挟むことで古いOSでも安全にRDEに接続でき、すぐに共有できる。グループのメンバーが入れ替わってもデータを散逸なく保全できる利点も大きい。

加藤 データを使う立場では、機械学習モデルの構築の際にはどのようなデータがあるのかをまとまりとして把握したい。一方、自分の研究の参考に個々のデータを閲覧したいニーズもあるかと思う。両者に応えられるものができれば非常に便利になる。

土屋 加工・プロセス装置の利用からはワンポイントデータがほとんどだ。材料・加工・計測全てで系統立てたデータを収集するため、利用者にプロセスフローのデータ登録をお願いし、標準プロセスを定め、利活用可能なデータの収集に取り組んでいる。

庄司 磁石のスペクトルを人間が見てもさっぱりわからないが、機械学習をうまく使って次元削減すると潜在空間で特徴が見えやすくなることがある。しっかりデータを取り、目的ごとにデータを統合していくことが大事になる。

目的ごとにデータ統合

若手のIT人材登用を

大住 データの構造化を進める上でコーディング担当の人材不足が課題だ。情報系の専門家はウエット実験の経験がない。NIMSのデータ人材育成企画などを通じて実験現場の人材をコーディングできるようにする方が手っ取り早い、との話になっている。

河村 実験装置用のPCが古い課題に対し、オープンソースプログラムと自作IoT機器を使ってデータをストレージに上げ、解析する仕組みを作り上げた。情報系人材はスキルが高く、データの一部欠損やフォーマットのふぞろいは大した障壁にはならないと思う。

古原 現在、極限環境対応構造材料研究拠点（RISME）事業では、材料研究における計算科学・データ科学人材育成も進めている。このようなデータ駆動型研究拠点をプラットフォームとする成果は、今後の次世代人材育成のロールモデルになるのではないか。

神谷 大学の教育現場では教員、学生両サイドの課題がある。材料系の教員でIT系の教育ができる人はそれほど多くない。教員への教育、および、若い人も含めてIT系がしっかりできる人をグループに入れて連携するのが現実的であると思う。

門平 本日は来場者に3事業の連携をどうやって発展させていくのかを考える機会にしてもらうのが目的で、その目的は果たせたのではないかと思う。パネリストの皆さま、ありがとうございました。

ファシリテーター
門平 卓也氏（NIMS）

パネリスト
星野 友氏（九州大学）
松田 翔一氏（NIMS）
竹村 太郎氏（NIMS）
加藤 幸一郎氏（九州大学）
土屋 智由氏（京都大学）
庄司 哲也氏（トヨタ自動車）
大住 克史氏（名古屋大学）
河村 光晶氏（東京大学）
古原 忠氏（東北大学）
神谷 利夫氏（東京工業大学）

土屋氏

加藤氏

竹村氏

松田氏

星野氏

門平氏

神谷氏

古原氏

河村氏

大住氏

本研究に関心があり社会実装に向け共に歩まれたい方は…　**マテリアル戦略総合シンポジウム事務局**（MatISS@nims.go.jp）までお問い合わせ下さい。