

## 材料開発における AI・データ科学活用に向けた取り組み

(研)物質・材料研究機構 統合型材料開発・  
情報基盤部門(MaDIS) ; 副部門長  
出村 雅彦

第5期科学技術基本計画<sup>(1)</sup>では、Society 5.0すなわち超スマート社会の実現に必要な11のシステムの一つとして統合型材料開発システムが掲げられ、「計算科学・データ科学を駆使した革新的な機能性材料、構造材料等の創製を進めるとともに、その開発期間の大幅な短縮を実現する」(同 p.19)と謳われている。革新的な材料が Society 5.0を支えるという期待とともに、サイバーとフィジカルの融合という考え方によって材料開発そのものが刷新されることも企図されると言える。日本金属学会においても、マテリアルズ・インフォマティクスやマテリアルズインテグレーションといった、データ科学との融合領域の研究発表が近年増えてきている。本稿では、AIすなわちデータ科学を活用した材料開発について、我が国における取り組みを概説したい。

物質・材料の研究開発にデータ科学を活用していく場合、物質・材料の持つ複雑さに比して材料データが必ずしも十分とは言えないという点が問題となる。データ科学を適用するアプローチは、現時点では3つに整理できるだろう(図1<sup>(2)</sup>)。

アプローチの一つは、物質探索を目的としたマテリアルズ・インフォマティクスである。我が国としてのまとまった取り組みは、2015年度に開始されたJSTイノベーションハブ構築事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」(NIMS 拠点)を嚆矢とする。これに続く形で、CREST・さきがけ等においてマテリアルズ・インフォマティクス関連の研究領域が設定され活発化している。第一原理計算とデータ科学を組み合わせ対象の物性値を最大化(もしくは最小化)する物質の探索の他、最近では、文献データを用いた探索例も報告されている。これら物質探索への活用に加え、第一原理計算の高速化にデータ科学を活用する例もある(成果は文献(3)を参照のこと)。世界でも取り組みが活発化しており、新たな学領域の形成が期待される。

2つ目のアプローチは、実用材料の複雑な課題に取り組むためのマテリアルズインテグレーション(MI)である。内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「革新的構造材料」において、計算科学、実験、データベース、データ科学を融合して、プロセス、組織、特性、性能という材料工学の4要素をつなぐというコンセプトが提案され、一領域として取り組まれてきた。このアプローチは欧米で Integrated Computational Materials Engineering (ICME) と呼ばれるものと近い。2014年10月に開始された本プロジェクトにおい

物質・材料の複雑さに対応した材料開発刷新の3つの取り組み

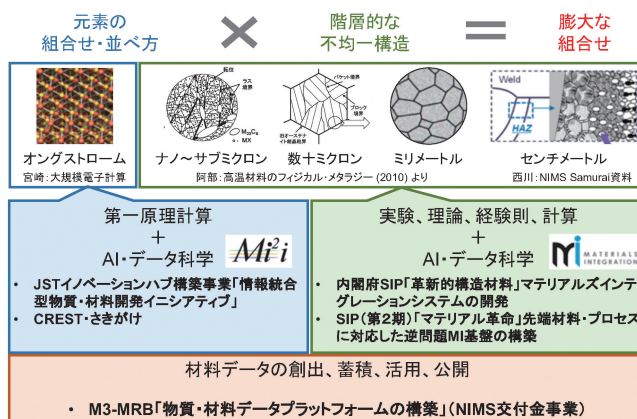


図1 AI・データ科学活用に向けた3つのアプローチ<sup>(2)</sup>。(オンラインカラー)

ては、鉄鋼溶接部を対象に、疲労、クリープ、脆性破壊、水素脆化について、プロセスから性能を予測するための計算モジュール、また、それらをつなげたワークフローを構築し、統合システムへの実装が進められている<sup>(4)</sup>。この中でデータ科学はモデル選択やデータ同化という形で活用されている。さらに、ワークフローで複雑な材料問題に関する順方向計算ができるようになると、データ科学と組み合わせることで、欲しい性能から材料組成やプロセスを探索する逆問題に取り組むことができるようになる。SIP(第2期)「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」では、この逆問題 MI 基盤の構築が進められようとしている。

これら2つのデータ科学を活用した研究開発が積み重ねられると、改めて、材料データの重要性が認識されるようになってきた。データ科学活用を進めるための3つ目のアプローチが材料データ基盤(インフラストラクチャー)の整備である。2017年度より物質・材料データプラットフォーム構築事業(NIMS 交付金事業)が開始された。ここでは、文献からの効率的な材料データ抽出手法、計測データの自動収集技術、様々な材料データを統合的に扱うためのシステムの開発が進められている。

以上、物質・材料研究におけるデータ科学活用に向けた我が国の取り組みについて駆け足で述べてきた。現時点でのまとめとしてお役に立てば幸いである。紙面の関係で取り上げることのできなかった施策(例えばNEDO超超プロジェクト<sup>(5)</sup>等)もあるが、ご容赦願いたい。

## 文 献

- (1) <https://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/index5.html>
- (2) 出村雅彦: 第70回白石記念講座, 70(2018), 25-42.
- (3) <https://www.nims.go.jp/MII-I/index.html>
- (4) <http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d1.html>
- (5) [https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP\\_100119.html](https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html)

(2018年12月11日受理) [doi:10.2320/materia.58.155]  
(〒305-0057 つくば市千現 1-2-1)