

COCNフォーラム2019

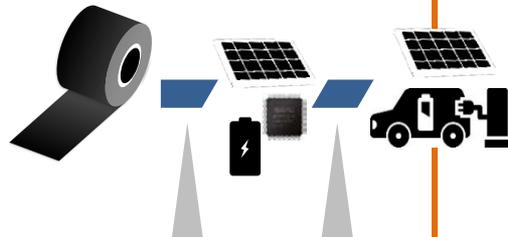
エネルギー革新に向けたMI基盤の構築

(MI : Materials Informatics/Integration)

早稲田大学 特任研究教授 西出 宏之

スマートシティ実現に向けた創/蓄/省エネにおけるMI

創/蓄/省エネ革新技術の開発



マテリアル新価値 システム新価値 kW/ΔkW新価値 社会制度デザイン・国際標準化

<技術最適化>

<社会最適化>

<エネルギー社会システム最適化>

材料機能設計
ハイスループット評価
超高効率変換

パワーリソース最適化

デジタル化/小規模・大量/
分散統合/短距離双方向



CO₂排出量
削減率向上

エネルギー
自給率向上

革新的高分子機能材料のデータ駆動型科学による開発加速

推進テーマ全体像

- 温室効果ガス削減に向け、**創／蓄／省エネルギー**の観点から革新的材料が必要。
- **高分子機能材料**は日本に優位性があり、軽量・加工性・資源的制約の少なさからエネルギー用途への期待が大きく、**データ駆動型科学に基づく開発を加速**。

社会ニーズと材料性能の整合

産学が連携し目指すべき革新的高分子機能材料の機能の選定と具体的な数値目標の設定

3つの切り口のMI マテリアルズ・インフォマティクス/インテグレーション

データ科学と検証実験の協同

「データベース連携」「帰納／演繹アプローチの融合」「ハイスループット開発の課題抽出」

データ科学の素養もつ人材育成

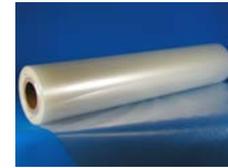
大学での「マテリアルズ・インフォマティクス」の新科目を立上げ

大学への産学共用のMI拠点構築

大学のプラットフォームを活用し、産学が“under one roof”で、MIをキーワードにした高分子機能材料の研究開発と人材育成を両輪で推進

機能視点の高分子材料データベースの構築とデータ連携の例

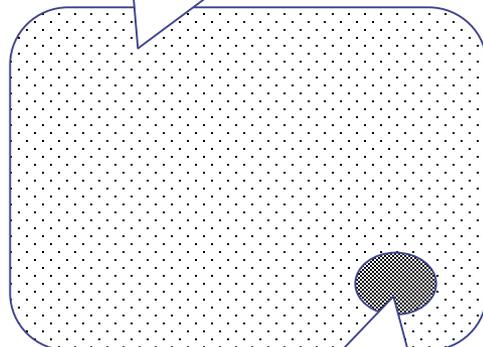
機能	目標性能	応用例
イオン伝導性	イオン伝導度 1.0×10^{-2} S/cm (既知より2桁高)	全固体超高容量・ 高出力蓄電池



- ・公開論文等から物性・性能・製法・構造等、多くを特徴量として取り込み、データベースを世界で初めて構築し、マテリアルズ・インフォマティクスの流れを例示
- ・信頼性が高い企業データを早大データベースと連携することで、予測精度の向上および新たな特徴量の示唆（産の過去データ活用の重要性を実例として確認）

【データのイメージ】

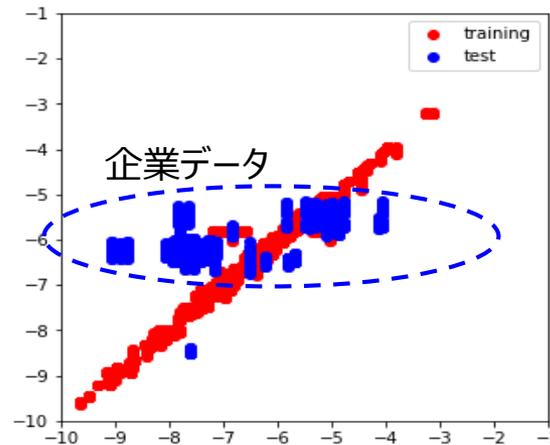
公開論文：広く薄い、
信頼性は濃淡あり



企業：集中、高精度

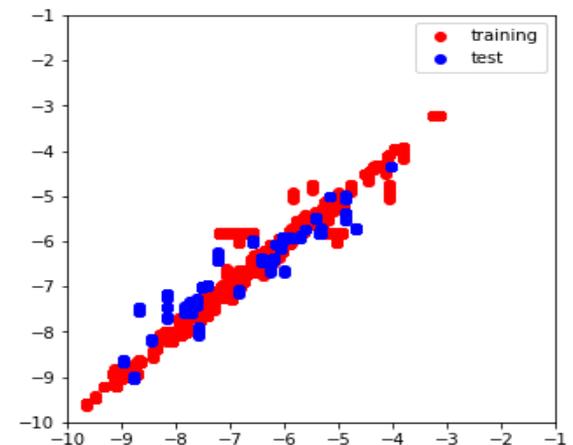
【データ連結前】

公開論文と企業データで
特徴量の傾向の違いが顕著



【データ連結後】

機械学習の精度向上
(新特徴量：新構造／組成示唆)



大学の人材・インフラを核としたMI拠点: コンソーシアム体制で構築

産学がunder one roofでエネルギー機能材料のMI研究開発と人材育成を両輪で推進

コンソーシアム体制（大学のデータベース、インフラを共用）

ハイスループット開発設備の導入

各社データと公開データの融合による学習向上と見える化（高精度、提案力）
産が共用できるツール・フォーマット・インフラの提示・運用・秘匿性担保

大学
(MI拠点)

大学と各社の1:1の連携（データ連携のスムーズスタート、企業の過去データ活用を通じた人材育成）

企業A

企業B

企業C

課題：横連携（産産）に向けたインセンティブ設計等



新研究開発センター産学連携施設など

データ科学の要素もつ材料科学者の育成

産業界として求める人材育成の意見とりまとめ、**材料開発ができる実践的データ技術者育成に向けた新科目を提言**

⇒ 早稲田大・先進理工学研究科に**マテリアルズ・インフォマティクス**の
新科目が2019年度秋学期より開設



<基礎：1単位>

- Pythonを学ぶ（早大）
- ビッグデータの視覚化（早大）
- MI概論（NIMS）
- MIの基礎理論（NIMS）
- MIのハンズオン（NIMS・早大）

<応用：1単位>

- データベースとAIを使った研究事例紹介（産総研、早大）
- データベースとMIを使った研究事例紹介（早大、理研）
- 産業界におけるMIの実践（産業界）
- MIの実践理論（NIMS）
- MIのハンズオン（NIMS・早大）

早大・卓越大学院プログラム（パワー・エネルギー・プロフェッショナル育成）と連携

- ✓ 2018年採択、13国公私立大学が連携
- ✓ 共同研究への参画を通して、将来の電力・エネルギー・マテリアル分野（創出・制御・輸送・利活用からルール
の策定、新サービス、国際標準化まで）における新産業
創出を担う博士学生を育成
- ✓ 連携大学も含めた共同研究の横展開も推進

