

【産業競争力懇談会 2019年度 プロジェクト 中間報告】

## 【エネルギー革新に向けた MI 基盤の構築】

2019年10月3日

産業競争力懇談会 **COCN**

## 【エクゼクティブサマリ（中間）】

### 1. 本プロジェクトの基本的な考え方

本プロジェクトでは、我が国が強みを有する高分子機能材料を中心に、データ駆動型科学に基づく材料開発を加速すべく、蓄電池や太陽電池に代表される中長期の創／蓄／省エネルギーデバイスの創出に供する、革新的高分子機能材料の開発を促進するマテリアルズ・インフォマティクスの基盤構築を、産学共通の目標に据えて検討した。「社会ニーズと目標性能の整合」「データ科学と検証実験の協同」「データ科学の素養もつ材料科学者の育成」の3つの切り口で踏み込むマテリアルズ・インテグレーション（MI）として取りまとめた昨年度の提言内容の中で、今年度は後2項目での残課題を継続検討し、我が国が高分子機能材料開発で世界を先導し続けるための、産学協同のハイスループット材料開発拠点のあるべき姿について提言する。

### 2. 検討の視点と範囲

#### （1）現状認識

データ駆動型の材料開発手法であるマテリアルズ・インフォマティクスの検討が世界中で推進されており、新しい方法論として衝撃を与えている。高分子材料の分野では、物質・材料研究機構（NIMS）のデータベース（DB）“PoLyInfo”が世界的にも先行しており、入口視点（物質としての高分子構造）で物性値等を一覧できるDBとして高い評価と期待が寄せられている。一方、高分子機能材料の出口（実験・実測）データを主対象とした機能視点のDBは、そのものが国内外で開示されていないのが現状である。別面では、データ源として質・量とも極めて高い機能材料の実測値等は産業界個社内に埋蔵しており、材料研究開発の加速のためには、そうした出口データを結集した上で、適合したインフォマティクス方法論を開発し、運用可能なDBを構築することが喫緊の課題であり、あわせ技術・システムの改革、人材育成への波及の整理も重要である。

#### （2）検討内容

##### 【機能材料データ連携の仕組み構築】

昨年度構築した超高イオン伝導ポリマーと透明・超高導電フィルムのDBを補強するとともに、機械学習では分子構造をグラフ構造で表現し、高分子の化学式を汎用性高い記述法で入力する方法の有用性を実証し、これを機能材料に適した一般性あるフォーマットとして提示した。さらに先行するNIMSとも密に意見交換し、DB連結への普遍性を担保した。

昨年度試行したイオン伝導性ポリマーに関するデータベース連携の事例を基に、今後、秘匿性の高い産業界のデータを連結する場合の、DBの管理と解析・運用手順について以下の通り整理した。

- ① データは保守・点検ある専用サーバー（例えば、公的に認知・支援されている大学データ科学センター）で、秘匿性を担保して管理し解析する。
- ② 許可された利用者は、与えられた権限内でデータ、解析プログラムにアクセスする（他社データは閲覧不可）。
- ③ 機械学習モデルは公知情報と個社データに基づき学習する。

④ 結果は各社にフィードバックするとともに、解析結果の理解を支援する。

#### 【M I 駆動による機能材料開発コンソーシアム】

データを結集し産学が協同で材料開発を推進する、大学を核にしたコンソーシアム体制を形成し、データ連携による協調領域の材料開発を under one roof で進めるためのM I 拠点の要件をまとめた。拠点においては、大学と企業の1対1の関係をベースとしつつ、大学にハイスループット開発のための必要なインフラ（分析、合成）を整備し、産業界が共用できる運用体制を構築することが重要と結論づけた。

#### 【データ科学の素養もつ材料科学者の育成の具体化】

産業界メンバーの具体的なニーズも取り込み、早稲田大学大学院における新たに2つの正規科目「マテリアルズ・インフォマティクス：M I の基礎スキルを学ぶ；M I の応用を学ぶ」（各1単位）の開設（2019年度秋学期～）で協力した。また、文科省「卓越大学院プログラム」（同大拠点）とも、革新的なエネルギーマテリアル開発の切り口で協同した。今後はデータ駆動による産学共同研究の経験と方法論の修得による産学双方の人材育成を通して、カリキュラムへフィードバックし、新しい学問領域としての体系化していくことが重要となる。

### 3. 産業競争力強化のための提言

我が国が高分子機能材料開発で世界を中長期に亘ってリードし続けるためには、M I を共通軸にした機能材料の研究開発と人材育成を両輪で推進していくことが不可欠である。そのためにも、大学をプラットフォームに産学が連携し、コンソーシアム体制で協調領域のデータ連携と材料開発を実行・強化していくことを提言する。

具体的には、大学と個社の1：1の連携を融合すべく大学を核にして国プロを活用したコンソーシアムを組織し、融合データに基づき協調領域の材料開発を進め、事例としてアピールすべきである。拠点では産学が共用可能なハイスループット開発のための必要なインフラ（高速・多次元分析、合成装置等）の整備と利用支援も含む運用が重要である。

なお、軸となるDBに関しては、NIMS等のナショナルDBへの接続を想定して、プラットフォーム間で密に連携し、機能材料に適した共通フォーマットを作成していく必要がある。

M I 人材育成は、実際の出口に繋がる材料開発と組み合わせることでその相乗効果が期待でき、進行する卓越大学院プログラム等を活用した産学双方の人材育成を通して、M I 人材の母数増加に注力すべきである。

### 4. 最終報告書に向けた検討上の課題と展開

議論を進める中で、機能材料開発において、企業が保有する機密性の高いデータを外に出すことが、大学と個社の1：1の連携であっても非常にハードルが高いという実態が明らかになっている。最終報告に向けては、その背景を分析し、データ連携に関する課題を提起するとともに、拠点においてコンソーシアム体制で開発を行う価値をさらに掘り下げて検討する。

## 【目 次】

|  |    |
|--|----|
| プロジェクトメンバー   | 1  |
| 1. プロジェクトの背景   | 3  |
| 1-1. エネルギーエコシステム実現に向けた革新材料への期待                           |    |
| 1-2. マテリアルズ・インフォマティクス/インテグレーション (MI) の動向と<br>高分子機能材料での課題 |    |
| 1-3. 本プロジェクトの出口と目標                                       |    |
| 2. 機能材料データ連携の仕組み構築                                       | 8  |
| 2-1. データベースの構造とフォーマットの提示                                 |    |
| 2-2. データ連携のスムーズスタート                                      |    |
| 2-3. 協調領域でのデータ連携に向けて                                     |    |
| 3. MI 駆動による機能材料開発コンソーシアム                                 | 13 |
| 3-1. ハイスループット分析・開発のための整備                                 |    |
| 3-2. 融合データに基づくMIと高速材料開発のために                              |    |
| 4. データ科学の素養もつ材料科学者の育成の具体化                                | 17 |
| 4-1. 材料開発を題材としたMI人材育成と大学院科目の開講                           |    |
| 4-2. 卓越大学院プログラム等における産学協働での支援                             |    |
| 5. 産業競争力強化のための提言と最終報告に向けた検討課題                            | 19 |
| 参考文献   | 20 |

## 【プロジェクトメンバー】

|        |   |         |                      |
|--------|---|---------|----------------------|
| リーダー   | : | 西 出 宏 之 | (早稲田大学)              |
| サブリーダー | : | 中 山 慶 祐 | (JXTG エネルギー株式会社)     |
| メンバー   | : | 圓 城 敏 之 | (株式会社島津製作所)          |
|        |   | 秋 本 雅 司 | (株式会社島津製作所)          |
|        |   | 目 賀 章 正 | (株式会社島津製作所)          |
|        |   | 木 下 英 治 | (株式会社島津製作所)          |
|        |   | 真 崎 仁 詩 | (JXTG エネルギー株式会社)     |
|        |   | 内 田 聡 一 | (JXTG エネルギー株式会社)     |
|        |   | 岩 永 寛 規 | (株式会社東芝)             |
|        |   | 石 川 諭   | (株式会社東芝)             |
|        |   | 内 田 健 哉 | (株式会社東芝)             |
|        |   | 曹 健     | (株式会社東芝)             |
|        |   | 石 川 誠   | (日産化学株式会社)           |
|        |   | 小 袋 健二郎 | (日本電気株式会社)           |
|        |   | 馬 場 雅 和 | (日本電気株式会社)           |
|        |   | 吉 川 勝 徳 | (日本電気株式会社)           |
|        |   | 荒 瀬 秀 和 | (パナソニック株式会社)         |
|        |   | 田 頭 健 司 | (パナソニック株式会社)         |
|        |   | 今 泉 延 弘 | (株式会社富士通研究所)         |
|        |   | 吉 田 宏 章 | (株式会社富士通研究所)         |
|        |   | 金 井 浩 之 | (株式会社三菱ケミカルホールディングス) |
|        |   | 中 村 裕 彦 | (株式会社三菱総合研究所)        |
|        |   | 舟 橋 龍之介 | (株式会社三菱総合研究所)        |
|        |   | 中 嶋 隆 人 | (国立研究開発法人理化学研究所)     |
|        |   | 本 間 敬 之 | (早稲田大学)              |
|        |   | 小柳津 研 一 | (早稲田大学)              |
|        |   | 錦 谷 禎 範 | (早稲田大学)              |
|        |   | 須 賀 健 雄 | (早稲田大学)              |
|        |   | 國 本 雅 宏 | (早稲田大学)              |
|        |   | 畠 山 勲   | (早稲田大学)              |
|        |   | 松 永 康   | (早稲田大学)              |
|        |   | 丸 山 浩 平 | (早稲田大学)              |

|            |   |        |                             |
|------------|---|--------|-----------------------------|
| オブザーバー     | : | 岡本 昌彦  | (国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構) |
|            |   | 三宅 政美  | (国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構) |
| COCN 実行委員  | : | 五十嵐 仁一 | (JX リサーチ株式会社)               |
|            |   | 梶原 ゆみ子 | (富士通株式会社)                   |
|            |   | 姉川 尚史  | (東京電力ホールディングス株式会社)          |
| COCN 企画小委員 | : | 田中 克二  | (株式会社三菱ケミカルホールディングス)        |
|            |   | 武田 安司  | (日本電気株式会社)                  |
| COCN 事務局長  | : | 中塚 隆雄  |                             |
| COCN 副事務局長 | : | 五日市 敦  | (株式会社東芝)                    |
|            |   | 佐藤 桂樹  | (トヨタ自動車株式会社)                |

# 【本 文】

## 1. プロジェクトの背景

### 1-1. エネルギーエコシステム実現に向けた革新材料への期待

「エネルギーの多様化、安定確保」は、新たな経済社会「Society 5.0」の実現に直接繋がる社会骨格として、また我が国の産業競争力にとっても最重要課題であり、エネルギー・環境イノベーション戦略「NESTI2050」においても具体的項目が提案されている。なかでも世界全体での温室効果ガス排出量の削減(パリ協定)またエネルギー自給率向上に沿ったエネルギーリソースの革新が迫られており、蓄電池やエネルギー変換デバイスに代表される創エネルギー/蓄エネルギー/省エネルギー分野での技術的なブレークスルーと社会実装が不可欠であることは、本 COCN の提言(2018年7月)「2050年に向けたエネルギー分野の技術的課題とブレークスルー」でも強く指摘されている(1)。図1に例示のように、エネルギーシステム全体として最適化し、エネルギーの創出と徹底的な有効利用を実現するためには、エネルギー関連の分散した小規模・大量設備を短距離も含め双方向で瞬時応答・デジタル化して連鎖的に繋ぐことできる、革新的な創/蓄/省エネルギーデバイスの開発と社会実装が強く望まれている。



図1. エネルギーシステム最適化に向けた創/蓄/省エネルギー革新技術の開発

革新的な性能を有する創/蓄/省デバイスの開発および社会実装に向けては、デバイスを構成する鍵となる個々の機能材料レベルでの技術革新が不可欠となる。高分子機能材料群に代表される材料分野は我が国の基盤産業の一つであり、材料開発において、正確な実験に基づくデータ、ものづくり技術・ノウハウ、製造プロセス技術と蓄積で、他国に対して優位性がある。特に、機能材料はその性能差がダイレクトに各社の競争に繋がるため、競争領域での研究開発として実施されてきた。しかしながら、長期視点でのエネルギー問題の解決、グローバルな材料開発競争の激化のなか、我が国におけるエネルギーデバイス用革新機能材料の開発時間とコストを大幅に短縮するためには、その切り札の一つとして後述のデータ駆動型科学マテリアルズ・インフォマティ

クスが目されており（図1）、産学官が連携した非競争領域を設定し、協働することが喫緊の課題であるとの認識が共有されつつある。

## 1-2. マテリアルズ・インフォマティクスの動向と高分子機能材料での課題

「第4の科学」とも呼ばれるデータ科学の進展により、近年、材料科学分野でもデータ駆動型の材料創生手法であるマテリアルズ・インフォマティクスの検討が国内外で推進されている（表1）。

表1. マテリアルズ・インフォマティクスのプロジェクト比較

|    | プロジェクト名称   | 機関            | 特徴  |
|----|--|---------------|---|
| 国内 | SIP「革新的構造材料」(2014～2018)  | NIMS          | ①無機系革新的構造材が主ターゲット。②工学的視点からのマテリアルズ・インテグレーションとして、理論、実験、解析、シミュレーションDBなどを融合し研究開発。   |
|    | JST「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi <sup>2</sup> i)」(2015～)   | NIMS          | ①データ駆動型の研究手法の開発。磁性材料、伝熱・熱電材料、蓄電池材料などがテーマ。②情報統合型物質探索・材料開発システム・ツールの構築と普及が目的。  |
|    | NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術(超超)プロジェクト」(2016～)  | 産総研           | ①有機系機能性材料を対象に、計算科学技術、先端計測技術、プロセス技術分野での研究開発に導入するインフォマティクス手法開発。②データ蓄積・連携に主眼。  |
|    | NIMS「マテリアルズ・オープンプラットフォーム(MOP)」(2017～)  | NIMS          | ①ポリオレフィンなど汎用高分子材料のDB構築が第一目標。②国の基幹DBを目指す。  |
|    | 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」(2018～)   | NIMS          | ①発電プラントや航空機体・エンジン等の先端材料・プロセスを例に、材料/重エメカと連携して成果実装。②性能から材料・プロセス設計する『逆問題MI』の展開。  |
|    | MathAM-OIL   | 東北大・産総研       | 相分離構造、低分子イオン伝導率などの解析を主対象とし、計算科学の連携による拡張性を重視。  |
|    | COCN「エネルギー革新に向けたMI基盤の構築」(2018～)<br>本プロジェクト   | 早大・JXTGエネルギー他 | ①実用化への接続を意識し、社会ニーズと目標性能の整合、検証実験の協同、データ科学の素養もつ材料科学者の育成を目指すマテリアルズ・インテグレーションのもと遂行。②エネルギーデバイスに用いられる高分子機能材料を対象を絞り、ゼロからDBを構築、企業データとの連携・信頼性を担保する再実験も含める。 |
| 海外 | 有機・無機・合金材料を対象として Polymer Genome (米・ジョージア工大)、ChemSpider(英化学会)、MatSEEk (豪・クィーンズランド大)、Materials Genome Initiative(中・上海大)、Creative Materials Discovery Project(韓)、NOMAD Laboratory(独マックスプランク研)、Materials' Revolution(瑞西)等のプロジェクトが推進されているが、DB非公開、機能物性データ未整備など実際は運用困難。 |               |   |

マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発を目指す流れの切っ掛けは米国の Materials Genome Initiative(2011)であった。しかし、有機・高分子材料に絞ると継続した海外での、特にデータベース(DB)を構築・運用する動きは多くはない。ジョージア工科大 Ramprasad 教授は Polymer Genome を立ち上げ運用している(2)。Polymer Handbook(John Wiley& Sons社、1989)から古典的なデータは取り込み、実験研究者らとの共同研究を通じたデータ取得で順次拡充してい

るが、組織的な運用には必ずしも現時点では到っていない。シカゴ大 de Pablo 教授は高分子構造を対象とした計算化学・シミュレーションの第一人者であり、マテリアルズ・インフォマティクスのポテンシャルを早くから提唱してきたが (3)、同研究室にはDBとして立ち上げられてはいない。現在主流であるシミュレーション基盤のマテリアルズ・インフォマティクスの延長では、実践レベルの精度実現に難点が指摘されている。当分野の最新の総説 (Walsh ら, 4) や、仮想物質探索 (Spacier, 吉田ら, 5) に例示されるように、内外のマテリアルズ・インフォマティクス研究は大半が理論計算の再現・補助目的で運用されている現状にある。

一方、学術論文出版社 (特に Elsevier 社、Wiley 社、アメリカ化学会) でのマテリアルズ・インフォマティクス、例えば Literature Mining 手法や図表からの情報抽出法の開発などは進展が急で、注視すべきである。欧米企業の個社、例えば独 BASF や Evonik 社、では高分子・有機材料の研究開発にマテリアルズ・インフォマティクス活用すべく強い動きが見聞されるが、大学等オープンな組織としての展開は若干滞っている。

米国でのマテリアルズ・インフォマティクス提唱に大きな遅れとることなく、物質・材料研究機構 (NIMS) は我が国のマテリアルズリサーチ・バンクとしてのDB構築・活用拠点としての活動を開始している (表 1、情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (JST)、革新的構造材料 (SIP) プロジェクト等)。NIMS 物質・材料DBである “MatNavi” (6) の一つに、有機・高分子材料を対象とした世界で先駆また最大のDBである PolyInfo (7) がある。高分子学会編の紙媒体「高分子データ・ハンドブック」(培風館、1986) の JST 支援でのDB化が起点で、2003 年より NIMS に移管して構築を開始し、現在、文献 6 万件からポリマー 2 万 7 千種、ブレンド、コンポジット、モノマー各 2 千種余、物性項目 30 万点超に到っており、世界最大のDBである。

PolyInfo は学術文献から高品質のDB作成が特徴で、年間数百文献から専門家 0B 10 名のダブルチェック体制で 20 年超のデータ取り込み・蓄積がなされている。化学式、構造、成分、物性などからの検索機能を備えている。歴史と人手による物質毎の整理が質高くなされている反面、近年の機械学習でのアクセスや材料応用のDBとしては、使い勝手が必ずしもよくない面もある。これを受けて「機械学習用 API」として改修に着手しており、AI 読み取り、プロセス情報の自動抽出など対応の「PolyData」として近々披露との告知がある。

上記のように PolyInfo は、入口視点 (物質としての高分子構造) で物性値等を一覧できるデータベース (DB) であり、先駆的に整備が進められている。一方、機能材料の実験 (実測) データを主対象とするアプローチは、運用可能なDBを実データから構築する方法論とともに、要望も強く今後一層の拡充が必要となっている。本プロジェクトで試行するDBは、PolyInfo とは逆向きの、出口の機能視点で性能、測定条件・方法、分子構造、組成、高次構造、製法等を精査・収集したデータから構成している。後述のように例えば、Li イオン伝導性の予測には高分子に限らず多彩な低分子塩、各種添加剤 (可塑剤、無機粒子) やナノ構造 (グラフト等) に対応した形式が必要である (表 2)。本提案のDBは将来的には公共DBである PolyInfo との連結も想定している。

新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超々プロジェクト)」では、企業 18 社が参画した組合も構成し、有機材料や機能性材料の開発基盤として計算科学-先端計測-製造プロセス技術を高度に統合化を目指している (8)。同 NEDO

プロジェクトの後半では、上記にあわせインフォマティクスツール開発に力点を置いて、技術論文から高分子材料の物性情報等を抽出する手法、また高分子材料のコーパス構築とオントロジー設計が目指されている(9)。さらに国内でも、機能材料に特化したDBの構築とサービスを目指す動きは、ベンチャーキャピタル含めてあるが、学術論文をもとにしたDBでは出版社側の知財権など未解決点も潜んでいる。

表 2. 本プロジェクトDBとPoLyInfo(物質・材料研究機構)の比較

| 項目     | 本プロジェクトDB   | PoLyInfo                    |                       |
|--------|-------------|-----------------------------|-----------------------|
| データの特徴 | 対象物質        | 高分子、複合体、組成物 <sup>1)</sup>   | 汎用高分子 <sup>2)</sup>   |
|        | 解析する物性      | 機能物性                        | 主として基礎物性              |
|        | 総データ数       | > 10 <sup>4</sup>           | > 3 x 10 <sup>5</sup> |
|        | イオン伝導度データ数  | ◎ <sup>3)</sup>             | △ <sup>4)</sup>       |
| DBの構造  | データフォーマット   | イオン伝導体にチューニング <sup>5)</sup> | 共通フォーマット              |
|        | 化学構造        | 既存の SMILES 記法 <sup>6)</sup> | 独自フォーマット              |
|        | 高次構造・末端構造等  | グラフ構造                       | テキスト <sup>7)</sup>    |
|        | プロセス情報・組成情報 | 表形式、グラフ構造                   | テキスト <sup>7)</sup>    |
| サービス   | 配布時のデータ形式   | 機械学習に適した表形式                 | 一般ユーザはデータ毎に手動         |
|        | 公開先         | 現在は限定                       | NIMS 登録会員に配布          |

1) 低分子物質を含む。2) 複合体を含む。3) 組成や温度範囲を網羅。4) 汎用DBとして構築され、イオン伝導など特定の物性を抽出した場合はデータ数が必ずしも充分でない。室温付近の代表値に限定。5) 現状では情報量・精確さ・簡便さの全てを満たす共通フォーマットが存在せず、予測精度の向上を最重要課題としてデータ形式や対象を適宜最適化している。6) Simplified Molecular Input Line Entry System。7) テキストデータの機械学習は現在のAI技術では基本的に困難。

### 1-3. 本プロジェクトの出口と目標

本プロジェクトのターゲットは、エネルギー機能を有する革新的なデバイスに用いられる高分子機能材料の創生であり、我が国が中長期の機能材料開発で世界をリードし続けるためには、データ駆動型科学の活用が不可欠である。2018年度は、高分子機能材料のマテリアルズ・インフォマティクスを、「社会ニーズと目標性能の整合」「データ科学と検証実験の協同」「データ科学の素養もつ材料科学者の育成」の3つの切り口で踏み込むマテリアルズ・インテグレーション(MI)として検討し、材料開発のための産学共用のMI拠点として整備すべき項目について取りまとめている(図2、2018年度COCON本プロジェクト報告書に「MI」の意図を記載)。「データ科学と検証実験の協同」「データ科学の素養もつ材料科学者の育成」については、2019年度継続して議論するのが本プロジェクトである。

これらエネルギー材料・デバイスのイノベーションを推進するためには、バルク・表面構造、物性、デバイス構成、プロセスの全体を結び付ける「マテリアルズ・インテグレーション(MI)」、さらに、探索空間を絞り込み高い効率で迅速に開発できる機能材料のハイスループットな分析・合成・評価法の開発とその新たな実装も急務となっている。本プロジェクトの目標は、上述の通り「エネルギー分野の革新的デバイスの創生」であり、時間軸としては2030年頃のデバイスの社

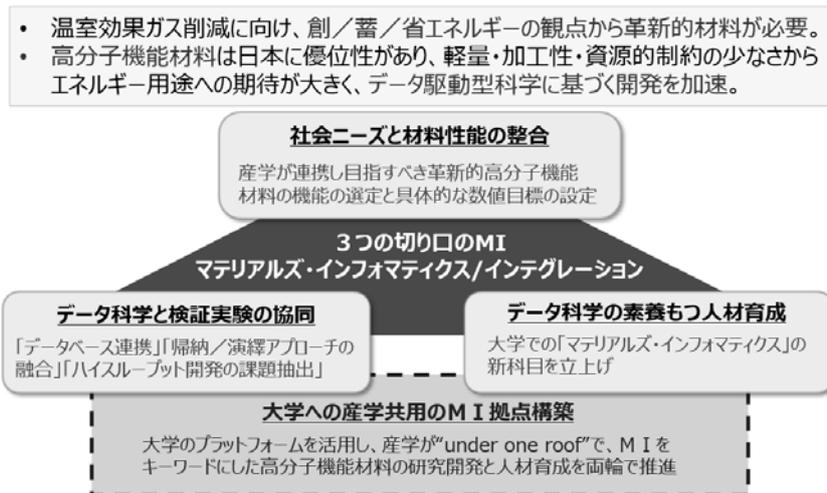


図 2. 本プロジェクトの全体像

会実装開始および 2040 年頃の本格的な普及を想定している。こうした長期的な取り組みに対して、2019 年度の本プロジェクトの出口は「機能材料開発に関するMI 駆動型開発の協調領域設定」を踏まえた「MI 駆動型開発拠点の構築提言」とした（図 3）。

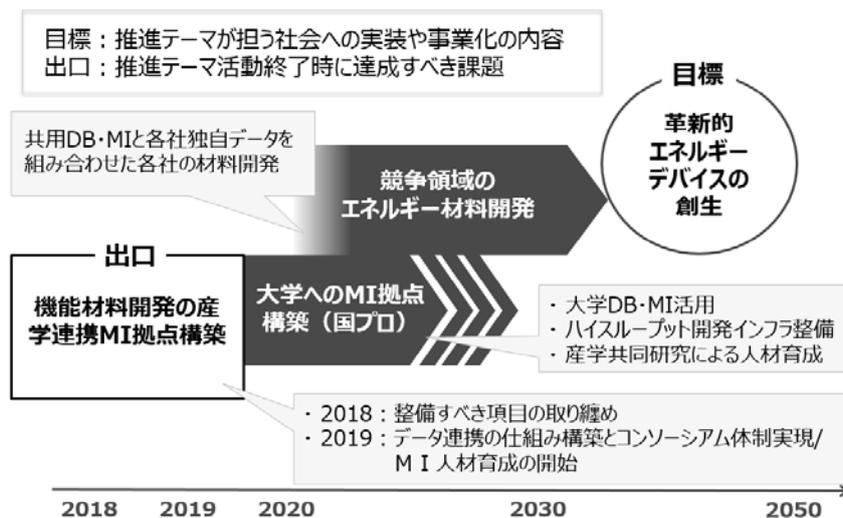


図 3. 本プロジェクトの目標と出口

具体的には、MI を共通軸にした機能材料の研究開発と人材育成を、大学をプラットフォームに産官学が連携し、推進していくことが不可欠である。協調領域のデータ連携と材料開発の実行には、大学と各個社の連携を融合すべく大学を核にして国プロも活用したコンソーシアムの組織化が望まれる。融合データに基づき協調領域の材料開発を進めるためのMI 拠点として強化し、事例を訴求できると考えた。拠点においては、産側が共用可能なハイスループット開発のための必要なインフラ（高速・多次元分析、多点高速合成装置など）の整備と利用支援も含む運用が重要である。

なお軸となるDBに関しては、NIMS に代表される国DBへの接続を想定して、機能材料に適し

た共通フォーマットの作成も密に連携して議論した。

MI人材育成は、実際の出口に繋がる材料開発と組み合わせることでその相乗効果が期待でき、進行する卓越大学院プログラム等を活用した産学双方の人材育成を通して、カリキュラムへのフィードバックによる新しい領域としての体系化と、企業側の理解による参加者増加に期待が寄せられた。

本プロジェクトでは、我が国が中長期の機能材料開発で世界をリードし続けるために、MI駆動型の材料研究開発と人材育成を両輪で進めるための産学官が連携・共用できるMI基盤を構築すべく、コンソーシアム体制に繋がる整備について、提言をまとめた。

## 2. 機能材料データ連携の仕組み構築

### 2-1. データベースの構築とフォーマットの提示

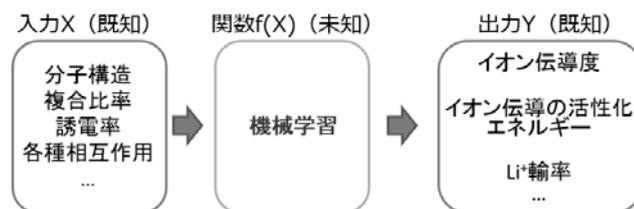
機能高分子材料のMIを試行、議論、問題点等を抽出するに当たり2018年度に、「社会ニーズと目標性能の整合」、すなわち産学が共に関心もち、かつ挑戦的なテーマとして、次の2課題を選定した。

- ① 超高イオン伝導性：全固体超高容量・高出力蓄電池で鍵となるシングルイオン型超高イオン伝導性ポリマーについて、目標値  $10^{-2}$  S/cm（既知より2桁高）
- ② 透明・超高導電性：照明・太陽電池などに組み込む透明・導電フィルムについて、表面抵抗  $5 \Omega/\text{sq}$ （導電ガラスに匹敵）。

これら2性能に関して、2018年度構築のDBに最新の公開論文・報告書等から性能、測定条件・方法、組成、高次構造、物性、製法など材料の出口を視点を精査・収集したデータを数千点以上追加し、補強した。なおデータ収集は専門家と大学院生の手作業で実施した。

帰納的な機械学習により機能との相関を求め、目標値を持ち得る新規構造群の提案に至るマテリアルズ・インフォマティクスの流れを精度高く例示した（図4）。

(1) 公開論文データを用いた学習（イオン伝導性ポリマーでの例）



(2) 公開論文データを用いた学習結果からの予測

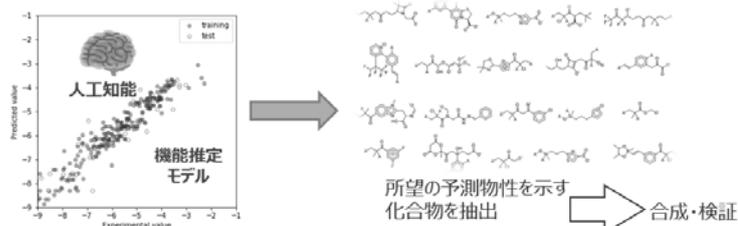


図4. イオン伝導性ポリマーでの機械学習

これら極めて多彩なデータを取り込み機械学習に供するDBの構造として、早稲田大学（小柳津ら）では本プロジェクトも通して、高分子の化学構造を汎用性高い記述法で入力するとともに、高次化学構造、組成、実験操作、製法情報などをグラフ構造も含めて表現し機械学習する方法が有効であることをはじめて実証し、これを機械材料に適した一般性あるフォーマットとして提示している（10）。信頼度高く運用可能なマテリアルズ・インフォマティクス技術の実現のため、「任意の特性・材料に適用可能」、「精度 9 割以上」かつ「所望の特性水準を満たす」条件で創エネルギー/蓄エネルギー/省エネルギー分野の新材料を提案可能なマテリアルズ・インフォマティクスシステムの実現に繋がると考えている。

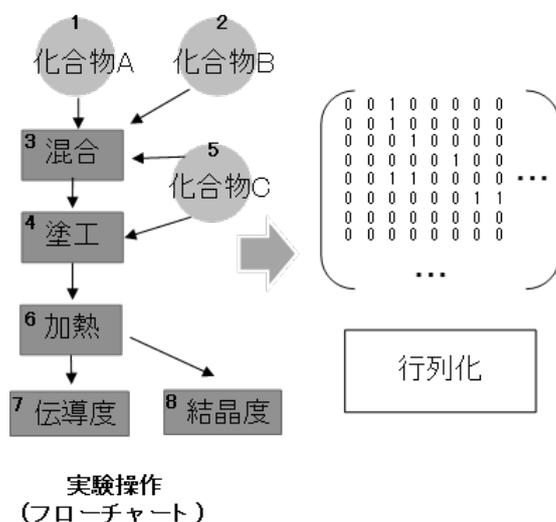


図 5. グラフ理論による実験操作の行列表現

具体的には以下である。

#### (1) 実験データベース構築の方法論

化学プロセス情報を簡潔・包括的に記述可能で機械学習用にも利用出来るDB記法を試行している。記述表現力と導入コストの低さを両立すべくプロセスフローチャートを有向グラフ構造として解析する手法を提示している(図5)。材料・操作・測定情報を一律に行列表現として記述後、グラフニューラルネットに訓練し、各因子の物理的意味も学習させるものである。

実用性高い一連の管理・解析ツールを参加企業のスモールDBと連携・共有する仕組みを構築し、本システムの提供を通じて、一つのデファクトスタンダードの候補になると期待している。

#### (2) ベイズ深層学習モデルの検討

外挿予測可能で、実験の不確定性や信頼区間を表現可能な学習モデル(Gaussian 過程, Bayesian ニューラルネット等)の導入はMIに対しても有効であると考えられる(グラフ構造を扱えるベイズ深層学習モデルの確立)。外挿領域での精度向上のため、記述子の追加(>10<sup>3</sup>)・他DBでの転移学習を通じて記述子内の背後則を見だし、未知試料が内挿領域へ移動するよう座標変換することも一つの有力な方法論となろう。

### (3) 共通スクリーニングシステム・M I の構築

グラフ構造データベースに対応したベイズ深層学習システムを具体的材料へ適用し、実験データを集積している。産学の多彩なデータ追加により予測精度・適用可能な対象を増加させ、既に構築済みの基礎DB (> 10<sup>4</sup>件) を基盤に、データ追加と信頼度向上による正の相乗サイクルを推進し、社会実装にも適う予測性能を有したM I の共通スクリーニングシステムの構築に繋がると考えられる。

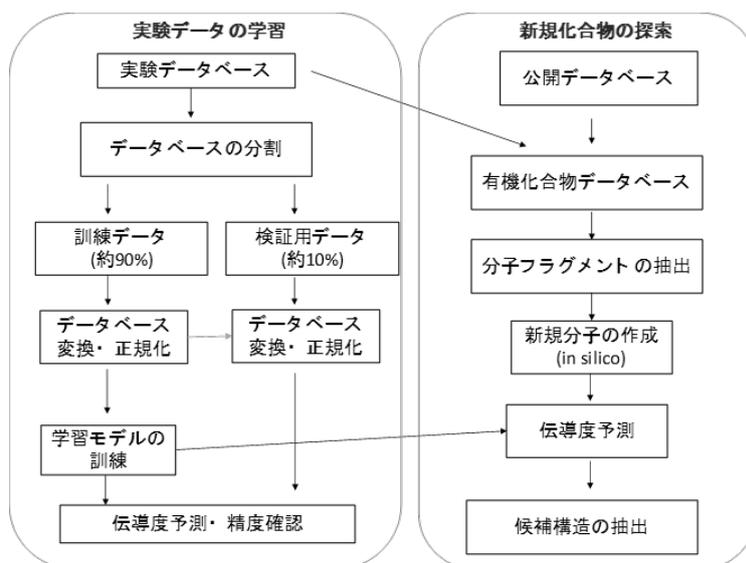


図 6. 解析スキームの詳細

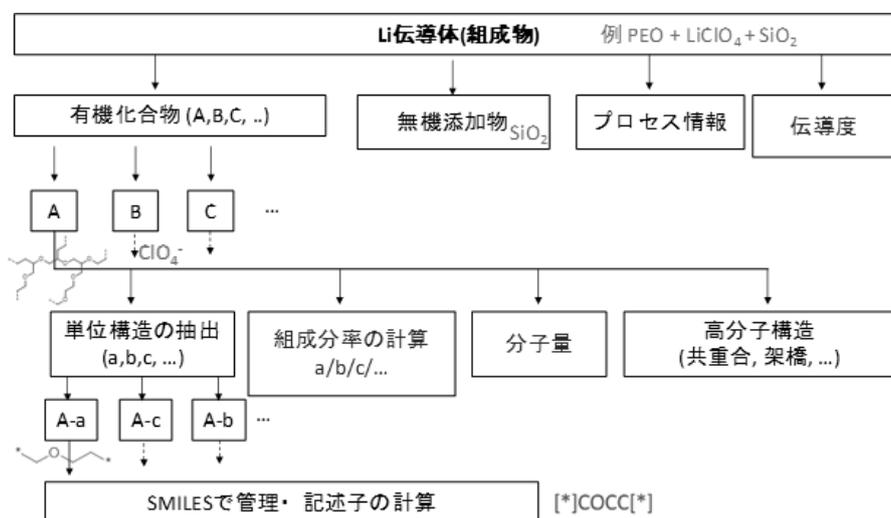


図 7. データベースの変換 (化学情報の数値化)

以上のように、DBに含まれない新材料に対する高信頼予測を可能にするため、ベイズ深層学習モデルを構築し外挿予測を試験しつつある。本アプローチの従来DB・インフォマティクス技術に対する相違点・優位性は以下である。

- ・機械学習により莫大な候補群から狙った物性もつ材料が抽出可能になりつつある。データ収集

コストの観点から、現状では単一予測モデルにつき単一物性しか予測出来ないが、実装に繋げるべき材料では化学安定度、機械強度、界面物性、溶解性、安全性など多機能の複合制御が必須である。

- ・ 絞込みの補助手法としての合成容易性スコア (Schuffenhauer ら, 11) 等の既存アルゴリズムでは、経験値を導入せざるを得ない現状にある。
  - ・ 標準DBのプラットフォーム化と共通解析コードの開発により、多彩な機能材料物性を一括予測・スクリーニング・提案するプロセスを初めて実現できる。
- 今後、対象となる材料機能の拡がりに向け、転移学習の手法も試行している。

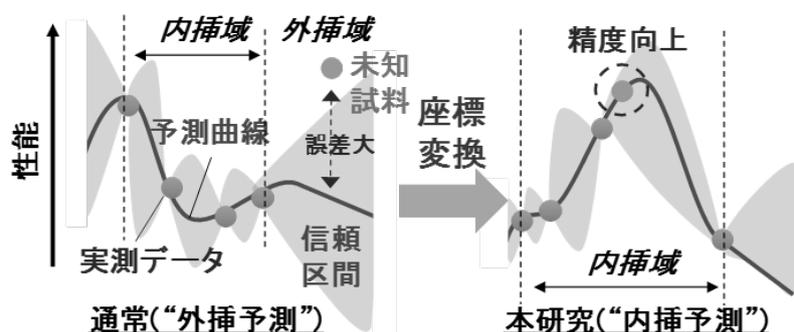


図 8. 記述子の追加と深層・転移学習による予測精度の画期的向上

## 2-2. データ連携のスタート

高分子機能材料開発は産業界にとって競争領域に直接結び付く研究開発テーマであるため、産業界が保有するデータが開示される事例はほとんど無い。たとえば後述のように、高分子材料で産学データ連携を目指している NIMS の化学 MOP においても、対象は汎用ポリオレフィンに限定されている。本プロジェクトでは、早大が主体的に検討した前述の DB 作成および材料構造提案までのフローの見える化を通して、改めて DB 連携の可能性を呼びかけたところ、複数の企業から前向きな回答を得た。

まず一例として、機能材料の DB 連携の試行として、JXTC エネルギーで蓄積されているイオン伝導性ポリマーに関する信頼度高い実験データをネガティブデータも含め丹念に手作業で読み取り、提示フォーマットに沿って同性能に特化したスモール DB を作成した。早大協力の下、機械学習を実施するとともに、その DB を、材料化学式は未開示のまま上記公開情報に基づく DB と連結した。連携により、データ拡充による精度向上、性能を支配する因子（高分子の分岐構造や添加物など特徴量）が両 DB で異なること、背景にあるメカニズムの解釈や予想性が高まるなど、スモールスタートのデータ連携の効果が示された。

機能特化した材料 DB の質向上とデータ連携により、例えば Li イオン伝導ポリマーにおいても、目標  $10^{-2}$ S/cm を達成しうる候補物質を提示できる手応えをメンバー内で共有している。

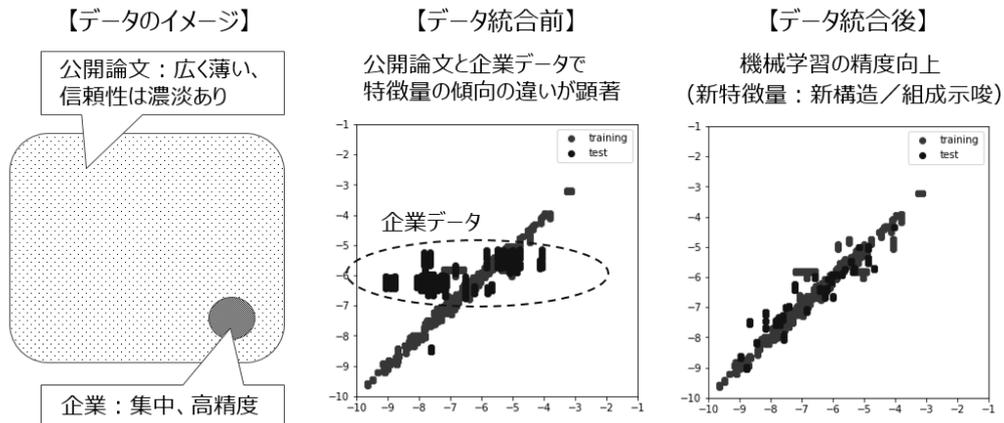


図 9. 産学DBの統合（スモールスタート）

20-30年前に我が国が世界に先駆け研究開発してきた、エネルギー関連機能材料・部材の質量とともに極めて高いデータが産側個社に埋蔵している。これら過去の出口データの掘り起し、価値の見直しは、現時点でしか成し得ない課題である。

### 2-3. 協調領域でのデータ連携に向けて

大学と産側個社とのデータ連携に際し、まずDBの管理と解析・運用手順について整理した。

- (1) データは保守・点検のある専用サーバー（例えば、公的に認知・支援されている大学データ科学センター、12）で、秘匿性を担保して管理し解析する。
- (2) 許可された利用者は、与えられた権限内でデータ、解析プログラムへアクセス（他社データは許可なく閲覧不可）。
- (3) 機械学習モデルは全データ（公知情報と個社データ）を学習。各社の提供データ数が増えれば、機械学習の予測精度は向上。
- (4) 各社データ解析結果をフィードバックするとともに、要望に応じて、親DB情報を開示するとともに、解析結果の理解を支援。

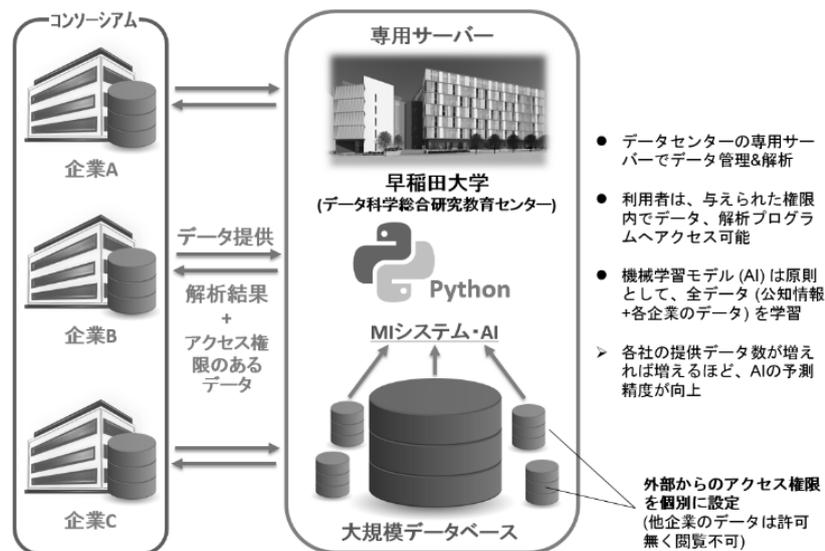


図 10. データベースの管理

一方、化学・物質材料のデータ連携とマテリアルズ・インフォマティクス共有について、先行するプログラムでの現状と課題を調査した。産業界でのデータ連携については、経産省 Connected Industries の施策後押しのもと、協調領域でのデータ共有と AI システムの展開について NEDO プログラムや、材料分野での日本化学工業協会での問題点の整理と提言がなされている (13)。

国研を足場としての企業間連携としては、NIMS によるマテリアルズ・オープン・プラットフォーム (MOP) がある (14)。同 MOP 化学マテリアルズ担当の中西尚志氏 (NIMS フロンティア分子グループリーダー) を招聘しての勉強会も実施した。汎用ポリオレフィンを対象とした化学大手 4 社が参画する MOP では、NIMS と 4 社がターゲットを共有した上で、NIMS が実施する試料の成形・基礎物性等の測定・評価を通して NIMS フォーマットでの DB を構築している。その DB を用いた MI 解析のノウハウをメンバー内で共有することで将来使える技術を作ることを目指すとともに、今後の各社-NIMS 間のクローズドな競争領域への移行もできる建付としている。機密性の高い企業データを社外に出すのは極めて困難な現状と、それを認識しての打開策として学ぶところが大きかった。

### **3. MI 駆動による機能材料開発コンソーシアム**

#### **3-1. ハイスループット分析・開発のための整備**

MI の目標は、マテリアルズ・インフォマティクスに基づいて新たな機能材料を開発し、それらが組み込まれたデバイスの社会実装に繋げることである。そのためには、機能材料開発の期間と経費を短縮するデータ科学と性能検証のインテグレーションが重要となる。マテリアルズ・インフォマティクスの精度を向上させるためにも、機械学習からの提案に対して、実際に高分子機能材料を合成・分析することで性能を測定・評価し、DB にフィードバックする、という一連の流れを速やかに回す必要があり、デバイスでの性能評価も含めた、材料のハイスループット開発のシステム構築が必須である (図 11)。ハイスループット開発とは、データ駆動の指針とシミュレーション支援、多点同時合成法等も活用しつつ探索範囲を効率高く網羅する実験手法、データ解析に連動した分析を機能的に融合することで、開発時間を短縮し、限られた人的資源のもと効率極めて高く材料を開発することである。単に合成・分析・評価に留まらず、従来型のパイロット試験を経由しない開発ルートの提案にもつながる。

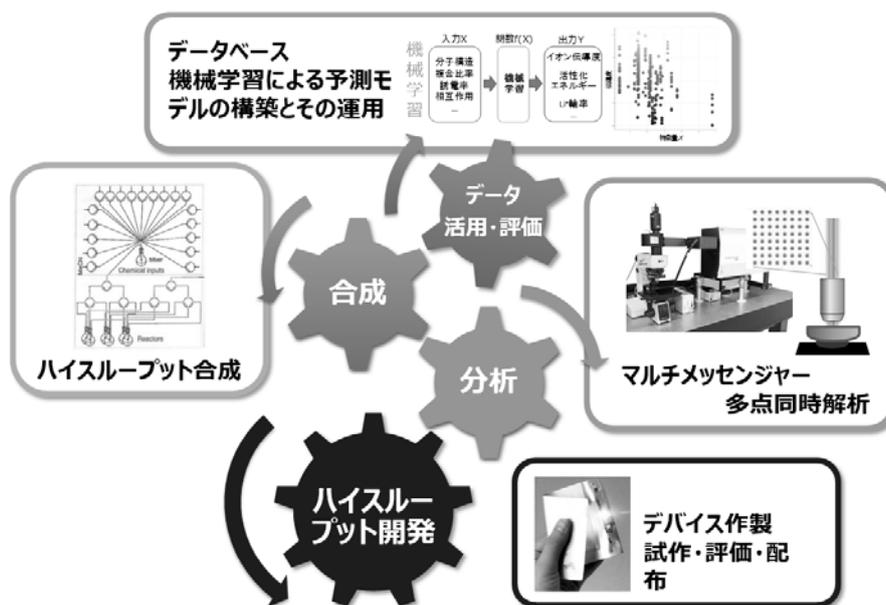


図 11. ハイスループット開発

機能材料のバルク領域のみならずデバイス形成時の特性発現を左右する表面や積層界面における微細構造や化学構造、さらに物理的、機械的、化学的性質など複数のパラメーターについて同時に、高い分解能で高速にオペラント測定（作動条件下測定）可能な、3次元同時マルチメッセンジャー解析を実現する新たな複合計測技術の構築も重要である。従来スキャンのために多大な時間を要した3次元評価の高効率化を可能とすれば、創/蓄/省エネルギー材料・デバイス革新に寄与するハイスループット開発の効率を一層向上できる。さらに各企業の開発ニーズの機能特化したユーザーフレンドリーな、熟練の技術を必要としない計測機器も強く望まれる。

こららの実現にあっては、(1) 3次元多点分析技術、(2) 複雑な測定生データを評価可能な機械学習手法と連携させた解析技術、(3) 個々の応用事例に応じた測定系、の開発がそれぞれ必要である。個々の要素技術の萌芽をさらに高精度化するとともに、インテグレートする道筋が重要である。

企業の製品開発現場におけるハイスループットな開発においては、高速でかつ多種類の情報量を同時に与える評価法もまた不可欠である。従来の手法では困難であった、材料・デバイスの特定位置における物理・機械特性、化学構造、さらに計測特性を同時かつ3次元的に与えるマルチメッセンジャー型は、MIと組合せたハイスループット分析の強力な新規手法となろう。

先端計測機器の開発は、質量分析のノーベル化学賞を挙げるまでもなく、我が国が常に先導してきた技術領域である。MIとの共役によって開発がさらに加速化すると期待される。

### 3-2. 融合データに基づくMIと高速材料開発のために

上記のようにスモールスタートした連携の有用性が強く確認できたので、推進体制として大学を核にしたコンソーシアムを形成し、データ連携による協調領域の材料開発を under one roof で進めるためのMI 拠点を構築すべく要件をまとめた。拠点においては、大学と企業の1対1の関係をベースとしつつ、さらに横連携に向けたツールとインセンティブを共有すべく議論した。

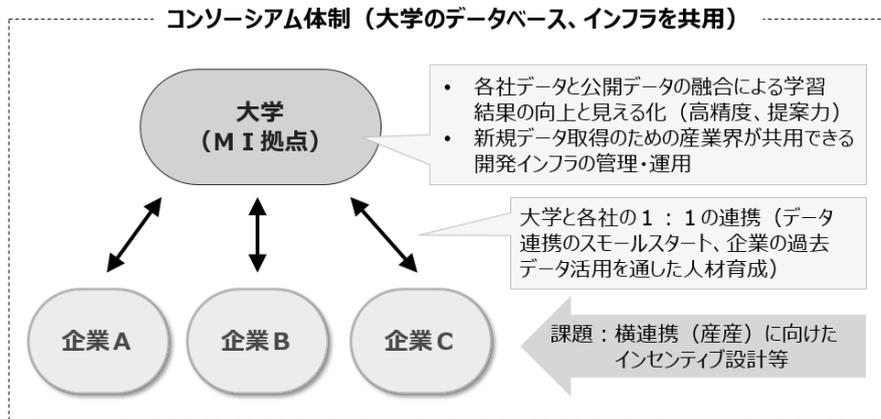


図 12. データベース連携のためのコンソーシアム

機能材料に特化したMIの推進を図るためには、参画企業及び参画大学が、「エネルギー革新のMI 共創コンソーシアム」(仮称)を構成することが望ましい。コンソーシアムでは、図 13 に示すように協調領域として、MI 駆動による機能材料開発とハイスループット分析・合成・評価法の開発を共通・共用の横軸とする。派生する競争領域としては個社毎に、協調領域での成果と方法論を起点とした革新的エネルギー材料開発、革新的エネルギーデバイス開発が進行する。協調領域を支える組織体としてプロジェクト推進会議(進捗管理等)、研究戦略部門、知財戦略部門、社会実装部門を設置し、大学内に事務局を置く。

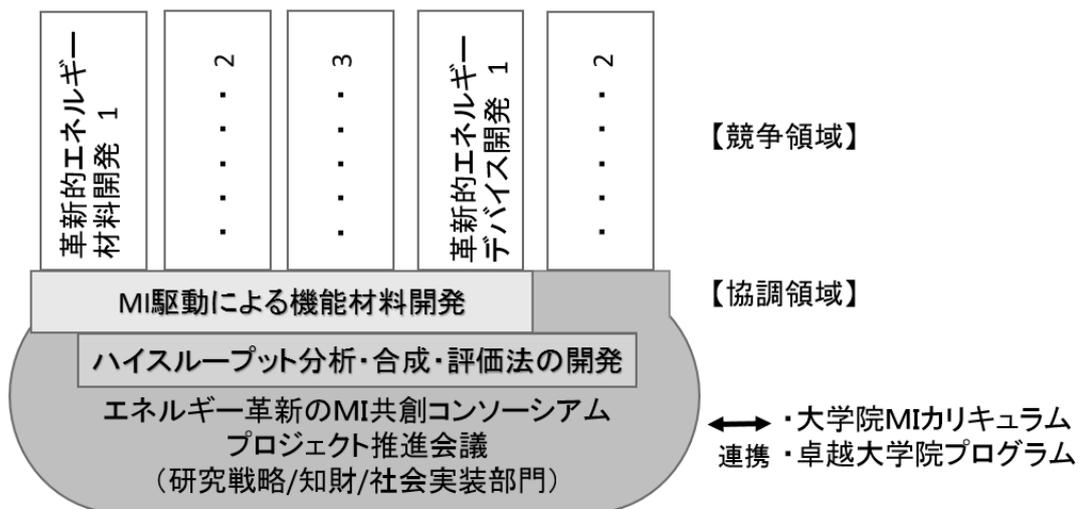


図 13. エネルギー革新のMI 共創コンソーシアム案

プロジェクト推進会議が全体を統括し、メンバー間の調整を図り参画する大学・企業・機関の決定の権限と責任を負う。研究戦略部門はCOCNとの調整や、コンソーシアムへの新たな企業等を呼び込むプロモーション活動、コンソーシアム内メンバーの横連携の促進、コンソーシアム内の協調領域のM I 推進案、経費の使用案等をプロジェクト推進会議に提案する。知財戦略部門は、後記に示す知財ルールや運用案の策定を行う。人材育成は文科省・卓越大学院と連携し高度専門M I 人材育成を実践する。

コンソーシアムでの交流・共有方針案について、以下例示する。

- ・DB・資料等を保管・共有するクラウドシステムやグループウェアシステムを大学がハブとなって共有し効率的にコンソーシアムを運用する。
- ・M I 成果発表会、ワークショップ、共通機器等のデモンストレーション会合など、フォーマル、インフォーマルな face to face の交流の機会を随時設ける。
- ・コンソーシアムとして開発・整備する、DB、機器・施設、計算機等の利用・共用については、可能な限りの共同利用を図ることを基本とする。DB・M I 有効活用を図るため、利用・共用のための講習会等を開催する。

なお利用に際しては、大学における嘱託研究員等の嘱任手続きを行い身分を設定する。特にDBに関しては、原則として、与えられた権限内でのアクセス権を付与する形で、データ利用を認める。

共創コンソーシアムにおける知的財産の取扱いは以下とした。エネルギー産業、素材産業、電機・情報技術産業、分析機器産業など様々な産業界で事業展開する企業群の参画が想定される。それぞれの産業界は、知的財産の取り扱いに関するこれまでの経験・知見に独自性を有する場合が多く、一律な方針設定は困難を伴うことが想定される。そこで連携課題を担う企業群の親近性とコンソーシアム全体としての共創の理念の両面を勘案の上で、知的財産の取り扱いルールを設定する。

- (1) コンソーシアムで展開される共同研究には、企業からの提供資金で展開される個別領域と、国プロからのマッチングファンドも想定して展開される協調領域が併存する。
- (2) 研究コンソーシアムの中に複数の連携テーマ、また課題の階層が存在する。
- (3) 研究コンソーシアムに参画する企業は、連携テーマの階層で、大学等と共同研究契約を締結する。大学等をハブとするツリー(親子)構造を形成する。

協調領域で創出されるフォアグラウンド知財に対して

- ・権利は発明者の属する大学・機関企業に帰属する。出願等の費用は権利持ち分に応じて負担する。ただし大学等と企業との共願による場合は、権利者による自己実施の条件を考慮して協議し決定する。
- ・権利者が事業目的で自己実施する場合は、自由かつ無償で行うことを含め、関係者間で協議し決定する。
- ・権利者以外のコンソーシアム参加機関・企業がコンソーシアム活動に基づく研究成果を事業化する目的で実施を希望する場合、権利者は原則として許諾するものとする。有償許諾の場合、コンソーシアム参加機関・企業には、それ以外の機関・企業よりも有利な許諾条件を設定する。

- ・権利者以外のコンソーシアム参加機関・企業がコンソーシアムでの研究活動目的に実施する場合、権利行使の対象としない。

なおここで言うフォアグラウンド知財とは、本コンソーシアムにおける研究成果に係る知的財産権をいう。

社会実装部門は、マーケティングや標準化、制度化、価格・非価格政策を含めた社会実装にコンソーシアム等を通じて寄与する。また早大のデータ科学総合研究教育センター、さらには理化学研究所もMIの開発と実装をハード・ソフトの両面で支える。

以上、非競争領域において参画企業は安心して材料データやデバイスを持ち寄れるコンソーシアム運用の仕組みを整備する。

#### 4. データ科学の素養もつ材料科学者の育成の具体化

##### 4-1. 材料開発を題材としたMI人材育成と大学院科目の開講

マテリアルズ・インフォマティクスはデータ科学の領域であり、実際の材料に適用するためには、ものづくり(材料科学・有機合成化学、また分析化学技術等)との融合が不可欠である。産業界として求める人材育成に関して意見をとりまとめ、早大に材料開発できる実践的データ技術者育成に向けた新科目の設置を提言した。データ科学と材料科学の融合の実現、すなわち両方の素養を有する人材を育成するためには、将来的にはMI(マテリアルズ・インテグレーション)として、学問領域の構築を目指すことも重要となる。これら人材育成への先導的な取り組みは、近い将来の我が国の産業力の強化に貢献する。これらを受け、早大理工学術院は、NIMS、産総研、理研、さらに産業界とも連携のもと、以下の新しい2つの正規科目を2019年度秋学期より開設することとし、担当教員(朝日 透、小柳津 研一教授他)らで準備が整っている。

『マテリアルズ・インフォマティクス  $\alpha$ :MIの基礎スキルを学ぶ』(1単位)

マテリアルズ・インフォマティクスの基礎知識とスキルを学ぶことを目的とする。

- |                          |             |
|--------------------------|-------------|
| 1. オリエンテーション: Pythonを学ぶ1 | 5. MI概論     |
| 2. Pythonを学ぶ2            | 6. MIの基礎理論1 |
| 3. ビックデータの視覚化1           | 7. MIの基礎理論2 |
| 4. ビックデータの視覚化2           | 8. MIのハンズオン |

蓄エネルギーや省エネルギーに資するエネルギー材料などの新規機能材料開発に取り組むことができるようになることを目指す。

『マテリアルズ・インフォマティクス  $\beta$ :MIの応用を学ぶ』(1単位)

マテリアルズ・インフォマティクスの実践スキルを習得することを目的とする。

- |                            |                     |
|----------------------------|---------------------|
| 1. AI を使った研究事例紹介           | 5. 産業界における MI の実践 2 |
| 2. データベースと MI を使った研究事例紹介 1 | 6. MI の実践理論         |
| 3. データベースと MI を使った研究事例紹介 2 | 7. MI のハンズオン 1      |
| 4. 産業界における MI の実践 1        | 8. MI のハンズオン 2      |

AI を用いて新規材料開発できる実践的な能力を身に付けることを目指す。

成績評価方法（授業終了後に課される演習・ホームワークの採点結果、指定されたマテリアルズ・インフォマティクスに関するセミナー、ワークショップへの参加、授業への参加度の合計）

Python は汎用プログラミング言語であるため、その習得には若干の時間を要する。早大理工学術院やデータ科学総合研究教育センターには、これらのプログラミング言語やデータベースの扱いを習得するために科目群が必要なレベルに応じて設置されている。コンソーシアム参画者はこれらの科目群も習得できるよう特別な配慮を行う（学外からの科目等履修者の手続き）。

#### 4-2. 卓越大学院プログラム等における産学協働での支援

「卓越した博士人材の育成」と「新規な共同研究の創出が達成される卓越拠点の形成」を目的とした文部科学省の「卓越大学院プログラム」に、早大「パワー・エネルギー・プロフェッショナル育成プログラム」が採択されている（2018年10月、プログラムコーディネーター 林 泰弘 早大教授）。この卓越大学院プログラムは、i) 早大をハブとしてインターユニバーシティ型国公立 13 大学の柔軟な連携、ii) 真の産学協働による実践的な高度博士人材教育、iii) 産学共同研究に因る教育システムの実践、等を目指しており、産学共同研究を通して、エネルギーマテリアルと電力システム分野で世界的イノベーションを惹起できる人材育成をターゲットとしている（副プログラムコーディネーター/エネルギーマテリアル担当 本間 敬之 早大教授）。博士としての高い専門力とあわせ、目標となる人材像は以下である。

- ・新エネルギーシステムインテグレーター：ゲームチェンジングなマテリアル革新と融合システム革新に必要な技術を統合的に組み上げることができる人材
- ・新エネルギー事業創出ネゴシエーター：省庁・協働企業等と交渉し、kW 価値や  $\Delta$ kW 価値 を創出する新事業を具現化できる人材
- ・グローバル・エネルギーイノベーター：自立型電力・エネルギーシステムへ我が国を変革し、国際社会へ普及させて世界を牽引できる人材

これらの人材育成を実現するためには、大学と企業が協働した研究開発が必須であり、2018～2024 年度に亘る本高度人材教育プログラムを遂行するためには、企業が参画した実務的教育とあわせ、10 年後に想定されるデジタル社会に適合した、データ駆動による産学共同研究の経験と方法論の修得が不可欠である。

産学双方の人材育成を通して、カリキュラムへのフィードバックによる新しい学問領域としての体系化と、企業側の理解による参加者増加に注力すべきである。

## 5. 産業競争力強化のための提言と最終報告に向けた検討課題

我が国が機能材料開発で世界を中長期に亘ってリードし続けるためには、データ科学の活用、具体的にはM I を共通軸にした機能材料の研究開発と人材育成を、大学をプラットフォームに産官学が連携し、両輪で推進していくことが不可欠であり、今後の主な提言は以下である。

- (1) データ連携のスムーズスタートの仕組み：機能出口の実データからDB構築と運用可能なM I 開発が端緒についた。次いで拠点となる大学と企業の1対1の連携を通して、質良くパラメータ揃った企業の材料性能データの活用を開始する、スムーズスタートが重要である。その際、大学は各社データのDB化を必要に応じて支援するとともに、秘匿性の担保はもちろん、学習モデルの供与、特徴量～性能相関などデータ可視化で、企業のデータ連携へのインセンティブを提示する。またNIMSに代表される国DBへの提供、連携を通して、機能材料に適した共通フォーマットの作成も密に連携して寄与する。
- (2) コンソーシアム体制での協調領域のデータ連携と材料開発の実行：大学と各個社の連携を融合すべく大学を核にして国プロを活用したコンソーシアムを推進し、融合データに基づき協調領域の材料開発を進めるためのM I 拠点として強化し、事例をアピールすべきである。拠点においては、産業界が共用可能なハイスループット開発のための必要なインフラ（分析、合成、評価）の開発・整備と使い勝手のよい運用も重要である。
- (3) 材料開発を題材としたM I 人材育成の具体化：M I の教育プログラムは、実際の出口に繋がる材料開発と組み合わせることでその相乗効果が期待でき、進行する文科・卓越大学院等を活用した産学双方の人材育成を通して、カリキュラムへのフィードバックによる新しい学問領域としての体系化と、企業側の理解による参加者増加に注力すべきである。

一方で、プロジェクトメンバーとの議論や昨今のマテリアルズ・インフォマティクスプロジェクト進捗から、特に機能材料開発において、企業は自社内にクローズしたデータ活用を志向しており、大学と個社の1：1の連携であってもデータを出すことは非常にハードルが高いという実態が明らかになっている。最終報告に向けては、その背景を分析し、データ連携に関する課題を提起するとともに、拠点においてコンソーシアム体制で開発を行う価値をさらに掘り下げて検討する必要がある。

高分子材料機能を対象としたDB構築およびM I は前例がなく、ややもすると周回遅れとも揶揄される我が国のデータ科学・ビッグデータ解析において、むしろ先頭ランナーとして位置できる事例となりえる。エネルギー革新に供し得る革新的機能もつ高分子材料の創出を我が国が再び先導して近い将来に実現すべく、その推進力としての機能材料M I の構築を今こそ世界に先駆け産学で挑戦し、我が国のオープンイノベーションの加速に寄与すべきである。

## 【参考文献】

- (1) 「2050 年に向けたエネルギー分野の技術課題とブレークスルー」 COCN 基盤的課題への提言、2018 年 7 月
- (2) “Polymer Genome: A Data-Polymer Informatics Platform for Property Predictions” , C. Kim, A. Chandrasekaran, T. D. Huan and R. Ramprasad, *J. Phys. Chem. C* 2018, 122, 17575-17585
- (3) “Polymer Informatics: Opportunities and Challenges” , D. J. Audus and J. J. de Pablo, *ACS Macro Lett.* 2017, 6, 1078-1082
- (4) “Machine learning for molecular and materials science” , K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh, *Nature* 2018, 559, 547-555
- (5) 「SPACIER : 材料シミュレーションと機械学習の融合」 吉田 亮、高度情報科学技術研究機構 第 6 回材料系ワークショップ、東京、2018 年 10 月
- (6) NIMS 物質・材料データベース MatNavi <http://mits.nims.go.jp/>
- (7) NIMS 高分子データベース PoLyInfo <http://polymer.nims.go.jp/>
- (8) NEDO 超先端超高速開発基盤プロジェクト (2016-21)、先端素材高速開発技術研究組合
- (9) NEDO 超先端超高速開発基盤プロジェクト (研究対象の追加) (2019-21)
- (10) 日経産業新聞 2019 年 6 月 3 日「高分子材料 数秒で構造予測 早大、AI 使い基盤技術へ」、  
“Synthesis of Lithium-ion Conducting Polymers Designed by Machine Learning-based Prediction and Screening” , K. Hatakeyama-Sato, T. Tezuka, Y. Nishikitani, H. Nishide, and K. Oyaizu, *Chem. Lett.* 2019, 48, 130-132
- (11) “Estimation of synthetic accessibility score of drug-like molecules based on molecular complexity and fragment contributions” , P. Ertl and A. Schuffenhauer, *J. Cheminfo.* 2009, 1, 8.
- (12) 早稲田大学データ科学総合研究教育センター [www.waseda.jp/inst/cds](http://www.waseda.jp/inst/cds)
- (13) Connected Industries「素材分野検討ワーキンググループ検討報告書」、日本化学工業協会、2018 年
- (14) NIMS 化学マテリアルズ・オープン・プラットフォーム 日刊工業新聞 2019 年 8 月 21 日「MI で高分子材料性能向上」

一般社団法人 産業競争力懇談会（COCN）

〒100-0011 東京都千代田区内幸町 2 - 2 - 1

日本プレスセンタービル 4階

Tel : 03-5510-6931 Fax : 03-5510-6932

E-mail : jimukyoku@cocn.jp

URL : <http://www.cocn.jp/>

事務局長 中塚隆雄