

【産業競争力懇談会 2018年度 プロジェクト 最終報告】

【エネルギー革新に向けたMI基盤の構築】

2019年2月15日

産業競争力懇談会 **COCN**

【エクゼクティブサマリ】

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、日本が強みを有する高分子機能材料に関し、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向け革新的高分子材料創生を産学共通の目標に据えて検討した。

今年度は、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つの切り口のマテリアルズ・インテグレーション（MI）として踏み込み、産学が協働する「高分子機能材料開発に関するMIの協調領域」を設定した上で、実際の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た。すなわち本プロジェクトは、我が国の機能材料開発の中長期での先導性に繋がるMI基盤構築を推進すべく提言するものである。

2. 検討の視点と範囲

（1）現状認識

近年、材料開発にデータ科学の手法を取り入れたマテリアルズ・インフォマティクスが世界中で推進されており、材料開発の方法論がグローバルに変わりつつある。我が国でも、例えばSIP革新的構造材料において、金属・セラミックスを中心とした材料開発が、構造・性質・パフォーマンス・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」として進められている。そのなかで高分子材料は、構造の複雑性・多様性・非平衡性など煩雑で着手が遅れていたが、最近、構造材料に供される汎用高分子を中心にデータベース構築が始まりつつある。しかし高分子機能材料では、幅広い物性値・特徴量の取り込みの難しさと併せ、その性能差が直接競争に繋がるため、個社に蓄積されている多くのデータを共有して活用できる状況には到っていない。さらに材料の界面やデバイス化プロセス等の多くの因子が絡みあっており、これらを包含する手法の構築が強く望まれている。

（2）検討内容

【社会ニーズと目標性能の整合】 対象として、産学が共に強い関心をもて、かつ挑戦的な次の二つの材料性能を設定した。いずれも、30年前には我が国の研究開発が世界に先駆けていたが、現在は欧米や中国に遅れを取り始めている状況であり、国際競争力を急ぎ担保するためにもMI活用が不可欠である。

- 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）。

【データ科学と検証実験の協同】 上記2性能に関して、公開論文・報告書等から性能、測定条件・方法、組成、物性、製法、構造など材料の出口を視点を精査・収集したデータベースを初めて構築した（物質・材料ごとに一覧できる既存のデータベースとは逆向きの構成）。それらを入力とした帰納的な機械学習により性能との相関を求め、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例示した。そのなかで、大学における再合成、最新機器による追加分析は入力データの信頼性向上に極めて有効であった。さらに演繹的な計算科学により、実験では得られないイオン・高分子鎖間結合エネルギー、ハードネス／ソフトネス・パラメータなどシミュレーションデータを取得し、データベースを拡張した。

データベース連携の試行として、JXTG 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性高い実験データをネガティブデータも含め丹念に取り組み、同性能に特化したスモールデータベースを作成した。早稲田大学協力の下、機械学習を実施するとともに、上記公開情報に基づくデータベースと材料化学式は未開示のまま連結した。連結により、データ拡充による精度向上、性能を支配する因子（特徴量）が両データベースで異なること、背景にあるメカニズムの解釈や予測性が高まるなど、データ連携の効果が示された。

【データ科学の素養もつ材料科学者の育成】すでに早稲田大学で進められている文部科学省「高度データ関連人材育成コンソーシアム」等の取り組みを参考にしつつ、実践的データ技術者育成に向け、本プロジェクト産業界メンバーの具体的なニーズも取り込み同大学院における新科目『マテリアルズ・インフォマティクス α ：MI の基礎スキルを学ぶ』、『同 β ：MI の応用を学ぶ』を、2019 年度秋学期開設に向けて立ち上げた。また、2018 年度開始の文部科学省「卓越大学院プログラム」で採択された早稲田大学拠点「パワー・エネルギー・プロフェッショナル育成プログラム」とも、革新的なエネルギー材料開発の切り口で、産学協働による人材育成の強い可能性を提示した。

3. 産業競争力強化のための提言

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、デジタルの活用、具体的にはMI をキーワードにした機能材料の研究開発と人材育成を、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、今後のアクションとして重要な3点を示す。

① データ連携のスモールスタート：マテリアルズ・インフォマティクスで不可欠な材料データのビッグデータ化については、産業界は多くの企業がデータを出し合うのを待つのではなく、まずは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、スモールスタートが重要である。その際、大学は各社データの秘匿性の担保はもちろん、学習モデルの支援、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。また国レベルのデータ連携までを視野に入れ、機能材料に適した共通フォーマットの作成を先導する。

② コンソーシアム体制での協調領域の材料開発の実行：スモールスタートした連携の有用性が確認できれば、自ずと他社とのデータ融合に進むと期待でき、その際は大学を核にしたコンソーシアムを形成し、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MI 拠点を形成し、開発を加速すべきである。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（合成、分析）の整備と運用も重要となる。

③ 材料開発を題材としたMI 人材育成の具体化：MI 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、卓越大学院等の枠組み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を継続すべきである。

【目次】

はじめに	1
プロジェクトメンバー	2
1. プロジェクトの背景	4
1-1. サステナブルなエネルギーシステム実現に向けた課題	
1-2. 本プロジェクトの出口と目標	
2. マテリアルズ・インフォマティクスの動向	8
2-1. マテリアルズ・インフォマティクスの取り組み状況	
2-2. 高分子機能材料のマテリアルズ・インフォマティクスの課題	
3. マテリアルズ・インテグレーション (MI) 実現に向けた検討	11
3-1. 社会ニーズと材料性能の整合	
3-2. データ科学と検証実験の協同	
(1) 高分子機能材料のデータベース構築とその検証	
(2) 構築した高分子機能材料データベースの活用	
(3) 計算科学を活用したデータ範囲拡張の可能性	
(4) データベース連携と課題	
3-3. データ科学の素養もつ材料科学者の育成	
(1) 材料開発でのデータ技術者の育成に向けた大学院科目の設置	
(2) 卓越大学院プログラムでの産学協働の提示	
3-4. その他	
4. 産業競争力強化のための提言	24
4-1. マテリアルズ・インフォマティクス推進に関する課題	
4-2. 提言実現に向けた展開	
参考文献	28

【はじめに】

世界各地で、地球温暖化が原因と推測される異常気象が顕在化し始めており、温暖化対策は待ったなしの状況である。パリ協定の採択・発効以降、世界では政府のみならず、企業・自治体等も含めたあらゆるステークホルダーにおいて、世界共通の長期目標として掲げられた産業革命前からの気温上昇 2°C 未満/ 1.5°C 努力目標に向けた取り組みが進められている。温室効果ガス排出を抜本的に削減するためには、エネルギー・環境分野での本格的なイノベーションの実現、すなわち、エネルギー関連の装置や設備のネットワーク化とシステム全体として最適化、および個々の装置・機器レベルでの革新的な排出削減技術の社会実装、の両輪が不可欠である。

こうしたイノベーションを実現するための鍵はコストとスピードにある。コスト競争力は世界市場で戦うための必須要件であり、革新的な性能を実現したとしても、社会実装されなければその性能が発揮されることもない。すなわち、性能・効率と同等以上にコスト低減が重要となる。またスピード感について、我が国の欧米や中国に対する劣後は、様々な場面で指摘されているところである。より一層のスピード感を持ち、従来にはない新たな価値を提供するためには、産学官連携の本格化を通し、日本のアカデミアの知の財産をイノベーションの起点とするための取り組みの強化が求められる。

このような背景の下、本プロジェクトでは、我が国の基盤産業の一つである材料分野、なかでも、軽量・加工性・資源的制約の少なさ等からコスト競争力が期待される高分子材料に関して、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を活用した革新的材料の開発、さらにはマテリアルズ・インフォマティクスを社会実装するために必要な種々のインテグレーションについて、課題を抽出した上で、解決に向けた方策をとりまとめた。具体的には、サプライチェーンで繋がる各企業・アカデミア参加の下、エネルギー機器の構成材料として産学が共通して強い関心を有する、挑戦的な高分子材料の機能を具体的な物性として共有し、データ連携を含めたマテリアルズ・インフォマティクス活用の例示を通して、その目標に向けた道筋を示した。データ科学・実験の両面における協調領域を設定した上で、産学が協働する材料開発の体制を構築するために必要な事項について検討を進めており、材料開発に関する産学連携のあるべき姿の提言を目指している。

2050年を見据えた「持続可能なエネルギーシステムの実現」に向け、ゲームチェンジを引き起こし得る新たな革新的機能材料の創出への期待は大きく、その加速のための取り組みは、日本の産業競争力強化に大きく貢献するものである。今後の展開に関し、関係各位の多大なる支援をお願い申し上げます。

【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	:	原 富太郎	(エリーパワー株式会社)
		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)
		高 石 貴 子	(株式会社島津製作所)
		中 西 太 郎	(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)
		神 例 信 貴	(株式会社東芝)
		戸野谷 純 一	(株式会社東芝)
		内 田 健 哉	(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)
		鈴 木 正 明	(パナソニック株式会社)
		荒 瀬 秀 和	(パナソニック株式会社)
		今 中 佳 彦	(株式会社富士通研究所)
		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)
		河 戸 孝 二	(富士フイルム株式会社)
		田 口 慶 一	(富士フイルム株式会社)
		奥 野 幸 洋	(富士フイルム株式会社)
		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)
		吉 田 まほろ	(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)
		小柳津 研 一	(早稲田大学)
		錦 谷 禎 範	(早稲田大学)
		本 間 敬 之	(早稲田大学)
		須 賀 健 雄	(早稲田大学)

	畠山 勲	(早稲田大学)
	小林 直人	(早稲田大学)
	喜久里 要	(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	(JXTG エネルギー株式会社)
	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)
	佐藤 桂樹	(トヨタ自動車株式会社)
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)

【本 文】

1. プロジェクトの背景

1-1. サステナブルなエネルギーシステム実現に向けた課題

新たな経済社会“Society 5.0”、すなわち「サイバー空間とフィジカル空間の高度な融合により、経済的発展と社会的課題の解決を両立し、人々が質の高い生活を送ることができる人間中心の社会」の実現に向け、産学官が連携した種々の取り組みが推進されている。なかでも、安全性を前提として、安定供給、経済効率性、環境適合性、すなわちS+3Eを満たすエネルギーの確保は、Society 5.0 実現に向けての基盤的な課題であり、特に「エネルギーバリューチェーンの最適化」は、Society 5.0 を構成する上で必要となるコアシステムの一つとして開発が進められている（科学技術イノベーション総合戦略 2016）。エネルギー関連のデバイスや設備を繋ぎ、エネルギーシステム全体として最適化することで、エネルギーの徹底的な有効利用が期待できる（図1）。

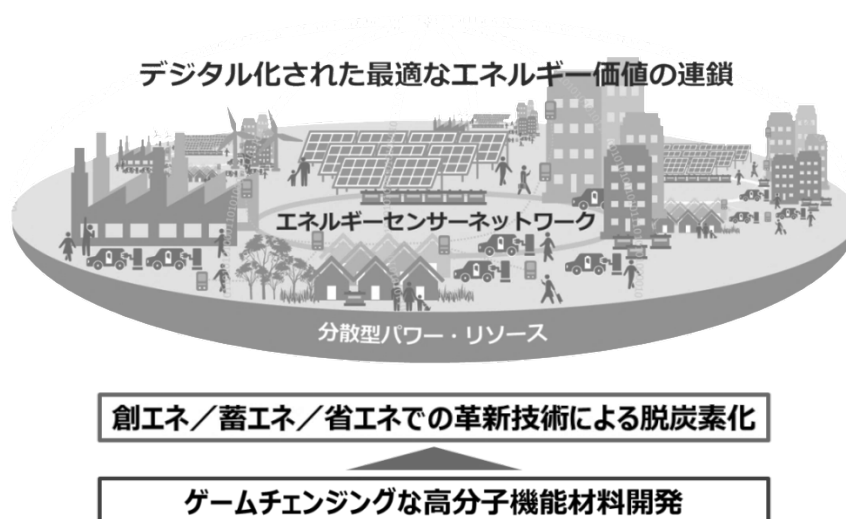


図1 Society 5.0におけるエネルギーバリューチェーンの最適化

現在、パリ協定を境に2℃目標達成に向けた脱炭素化の流れが世界的に加速している。我が国でも、2016年に「エネルギー・環境イノベーション戦略」(NESTI2050)が策定され、2050年に世界全体での温室効果ガス削減を可能とする①エネルギーシステム統合技術、②システムを構成するコア技術、③「省エネルギー」「蓄エネルギー」「創エネルギー」「CO₂固定化・有効利用」分野の革新技術、に基づくイノベーションの創出の必要性が示された。しかしながら、第5次エネルギー基本計画でも、2050年に向けては「野心的な複線シナリオであらゆる選択肢を追求する」と述べられているように、脱炭素化に向けての戦略は全方位的にせざるを得ないのが現状である。一方、COCNでは、2050年を見据えた「サステナブルなエネルギーシステム」の実現に向け、①再生可能エネルギー（変動電源の技術とコストの課題、二次電池のブレイクスルー、火力発電の高効率化と燃料の多様化）、②原子力エネルギー（中小型炉と次世代炉の開発、バックエンド技術の課題解決、地質・地盤の科学的知見の確立、原子力人材の育成）、③水素シ

システム（多様な用途開発、水素のコスト課題、地域特性に合わせた水素システム）、④CCUS（CO₂回収・使用・貯蔵）、⑤高度システム化と個別技術の深耕による最適インフラ構築、⑥産業部門における省エネルギー技術、をイノベーションに繋がる技術的ブレイクスルーが特に必要な6分野として2018年7月に提言したところである。

個別技術領域（省エネルギー、蓄エネルギー、創エネルギー）において、革新的な性能を有する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個々の材料レベルでの技術革新が不可欠となる。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、製造プロセス技術で、他国に対して優位性がある。一方近年、「第4の科学」とも呼ばれるデータ科学の進展により、材料科学の分野において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」の検討が世界で推進されており、材料開発の方法論がグローバルで変わりつつある（図2）。

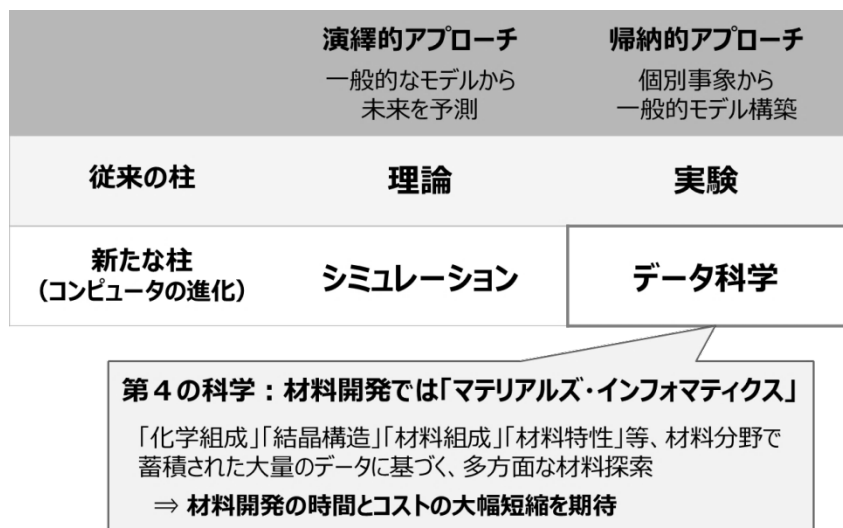


図2 サイエンスを支える柱

材料開発、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、従来、競争領域の研究開発として実施されてきた。長期的なエネルギー問題の解決、ならびに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向けの革新材料開発においても、材料開発の時間とコストを大幅に短縮するためには、マテリアルズ・インフォマティクスの手法を活用することはもちろんのこと、その活用において、産学官が連携した協調領域を設定し、協働して開発を推進することが喫緊の課題であるとの認識が広まっている。

本プロジェクトでは、革新的エネルギーデバイスの創生に向けた高分子機能材料開発のためのマテリアルズ・インフォマティクスと、マテリアルズ・インフォマティクスを社会実装するために必要なインテグレーション、「マテリアルズ・インテグレーション（MI）」（注1）に焦点を当てる（図3、図4）。

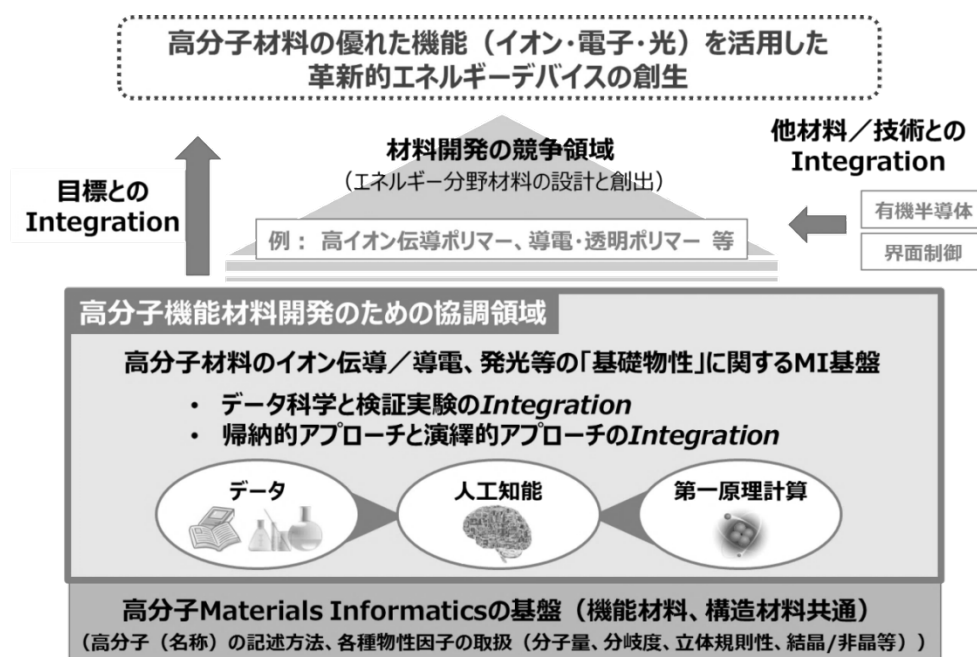


図3 本プロジェクトの概念図

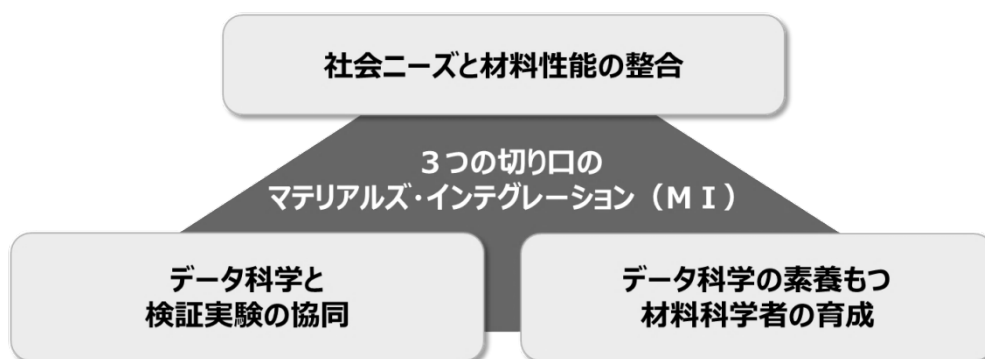


図4 本プロジェクトで検討したマテリアルズ・インテグレーション

高分子材料は、分子設計の容易さと多種多様性や、フィルム・繊維等への高精度の加工性から、種々の材料として実用化されている。ただ、高分子機能材料においては、電子・イオン伝導や光学特性を例にとっても、その機能を発現するための原理・機構に不明な部分が多く、マテリアルズ・インフォマティクスを軸としたデータ駆動による研究開発が期待されている領域である。高分子機能材料は軽量・加工性・資源的制約の少なさからも、エネルギーデバイスの構成材料としての期待が大きく、本プロジェクトでは様々なインテグレーションの視点から、MI基盤の構築に向けた活動推進の提言を目指す。

(注1) “Materials Integration” の用語は、高付加価値なデバイスの目標性能を実現するため、環境負荷・安全性・感性など社会要請も満足させながら、材料の設計開発とそれを効率的に積み上げ・組み合わせる戦略としてしばしば用いられてきた。例えば、我が国も月刊誌『マテリアル・インテグレーション』（編集代表：新原 皓一（長

岡技術科学大学)、一ノ瀬 昇 (早稲田大学)) が 1999 年より出版された。また、用語『Integrated Computational Materials Engineering (ICME)』も最近提唱されている。

1-2. 本プロジェクトの出口と目標

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、今年度の本プロジェクトの出口は「高分子機能材料開発に関する M I の協調領域設定」を踏まえた「M I 拠点の構築提言」とした (図 5)。

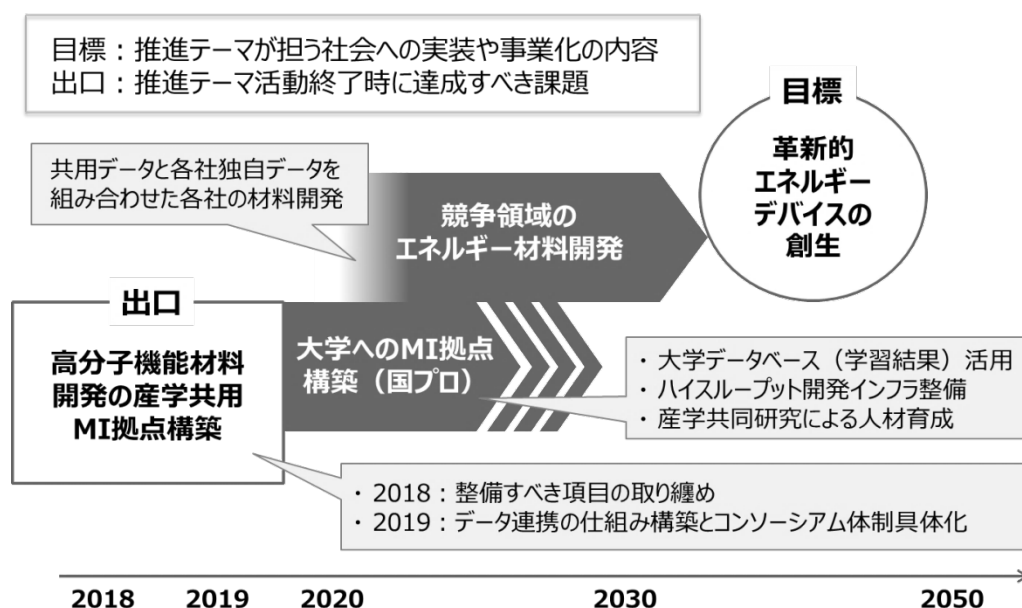


図 5 本プロジェクトの目標と出口

具体的には、まず社会ニーズに合致し、我が国として研究開発を注力すべき「高分子材料の機能」を選定した。その目標値を実現するために、基礎となる分子設計にまで立ち戻り、「構造系と必要な物性値データ」を産学官が共同で蓄積していくマテリアルズ・インフォマティクスの協調領域を例示した。協調領域の材料開発を推進し、その後の各社の競争領域の材料開発に繋げていくためには各社が保有するデータ・新規に取得するデータを連携させることによるビッグデータ化、ならびに材料科学とデータ科学を習得する M I 人材の育成が必要となり、こうした取り組みはフラットなプラットフォームを提供できる大学を拠点として推進することが重要と考えている。

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、M I をキーワードにした材料の研究開発と人材育成を両輪で進めるための産学官が共用できる M I 基盤を構築すべく、体制に繋がる整備について、提言をまとめた。

2. マテリアルズ・インフォマティクスの動向

2-1. マテリアルズ・インフォマティクスの取り組み状況

近年、既存の合成・測定データから得られた理論に基づく演繹的な材料開発に代わり、ビッグデータと情報科学に基づくデータ駆動型の材料開発「マテリアルズ・インフォマティクス」が精力的に実施され始めており、グローバルに材料開発手法の変革が起こっている。以下に、世界および我が国の動向を記載する（表1）。

表1 マテリアルズ・インフォマティクスの取り組み状況

<世界の動向>

- 米国：2011年にMaterials Genome Initiative (MGI) 立上げ、目的は先端材料開発を低コストで2倍速で実施。
- 欧州：2009年にMatSEEC (Materials Science and Engineering Expert Committee) を組織
- 中国：中国科学院・中国工学院が連携して中国版MGIを着手
- 韓国：2015年からCreative Materials Discovery Projectを立上げ（10年）

<日本の動向> ¹⁾

【プロジェクト】

- 2014～ SIP「革新的構造材料」
- 2015～ JST「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」
- 2015～ JSTさきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
- 2016～ NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術（超超）プロジェクト (U2M)」
- 2017～ 化学大手4社とNIMS「マテリアルズ・オープンプラットフォーム (MOP)」
- 2018～ 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」

【拠点】

- ✓ NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)
- ✓ 産総研・東北大数理先端材料モデリングオープンイノベーションラボラトリ (MathAM-OIL)

① 世界の動向

従来からデータ駆動型材料開発の概念はあったが、潮流の切っ掛けは2011年の米国・オバマ政権でのMaterials Genome Initiative (MGI) の立上げである。MGIの目的は、計算科学とデータ科学を融合したデータ駆動型材料開発により、先端材料の開発を低コスト、半分の期間で実施することである。この取り組みが、データ科学の重要性を謳う本格的な「第4の科学」の始まりであり、それ以降、例えば米国では、リチウムイオン電池の無機電極材料や低分子系有機発光材料等の研究開発で注目すべき成果が挙げられている。

欧州は材料開発の先進地域であり、物質材料科学分野への集中支援を目的として、例えばESF (European Science Foundation) にMatSEEC (Materials Science and Engineering Expert Committee) がある。マテリアルズ・インフォマティクスに関しては、米国MGIに続く形で2015年にNOMAD (Novel Materials Discovery) Laboratoryプロジェクトが立ち上げられている。

国家戦略「中国製造2025」で省エネルギー・新エネルギー車や新素材を重点分野としている中国は、中国科学院・中国工学院が中国版MGIの立ち上げに着手している。韓国は2015年から、

10年期間の Creative Materials Discovery Project で、マテリアルズ・インフォマティクス研究に力点を置き始めている。

② 日本の動向

我が国も MGI に遅れること 1～2 年で国レベルの取り組みが始まっている。2013 年に科学技術振興機構 (JST) が先駆的に「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進 (マテリアルズ・インフォマティクス)」を戦略プロポーザルとして公開するとともに、マテリアルズ・インフォマティクスの将来性および重要性を政府に提言している。

2015 年には物質・材料研究機構 (NIMS) を中心機関として、JST 事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (“Materials research by Information Integration” Initiative: MI2I)」が発足するとともに、NIMS では統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) が設立された。

内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) においても、「革新的構造材料」(2014 年～)、「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」(第 2 期) でマテリアルズ・インフォマティクスが取り上げられている。ここでは、金属・セラミックスを中心とした材料開発が、構造・性質・パフォーマンス・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」として進められている。

JST プロジェクトとしては、若手研究者を対象としたさきがけ「[マテリアルズインフォ]理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」と、ネットワーク型の CREST「[革新材料開発] 実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」が推進されている。学会でも例えば、応用物理学会は第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 (2018 年 9 月、名古屋国際会議場) よりマテリアルズ・インフォマティクスのセッションを設けている他、ここ 1～2 年の学協会誌でしばしば特集テーマとして掲載されている。

高分子材料も対象としたマテリアルズ・インフォマティクスとしては、2016 年開始の NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超超プロジェクト)」がある。また 2017 年、NIMS はポリオレフィン (代表的にはポリエチレンやポリプロピレン) 等の汎用高分子のマテリアルズ・インフォマティクスを推進すべく、化学大手 4 社と「マテリアルズ・オープンプラットフォーム (MOP)」を立ち上げ、ポリオレフィンのデータベースを構築している。

高分子学会は 2018 年 12 月に開催の国際会議で “Polymer Informatics” のセッションを設けているが、発表の多くが構造や物性のシミュレーションに滞っており、必ずしもインフォマティクスに至っていないのが現状である。

2-2. 高分子機能材料のマテリアルズ・インフォマティクスの課題

高分子機能材料にマテリアルズ・インフォマティクスを適用する場合の課題は、対象材料としての複雑さと、マテリアルズ・インフォマティクス活用時の難点に分けることができる。それらをまとめると、次のようになる。

- ◇ 対象材料としての課題：構造の複雑性・多様性 (分子量、分子量分布、分岐度、立体規則性、結晶／非晶等)、熱力学的非平衡状態、最終製品は混合物、機能発現の機構解明が困

難 等

- ◇ 適用における課題：高分子構造の記述方法、公開データベースがほとんどない（特に機能に特化した公開データベースはない）、データの量と質（例えば、履歴や実験条件を反映した質の良いデータが少ない） 等

導電性ポリマーを例に、その構造と物性値の相関を得るためには、1次、2次構造、さらに高次構造、およびドーパントが入力因子となる。特に、高次構造は結晶と非晶、その間を繋ぐ中間相からなっており、複雑となる。また、全く同じ材料でも非平衡状態であるため、作製時の履歴を大きく受け、同じ出発材料で得られた物性・機能データでも同じ土俵で比較することができない（図6）。さらに、高分子の高次構造まで含めた記述方法が開発されておらず、データベースの構築には新しい手法と考え方が必要となる。このような背景から、高分子機能材料に関するデータベースそのものが国内外で開示されていないのが現状である（NIMSが整備しているデータベース“PoLyInfo”については後述）（注2）。

（注2）誘電性ポリマーについては Ramprasad ら（米ジョージア工大）が自身のデータ収集によりインフォマティクスを報告している。吉田（統計数理研究所）は熱電性ポリマーについて、PoLyInfoのデータを転移学習と組合せ実施した結果を最近報告している。

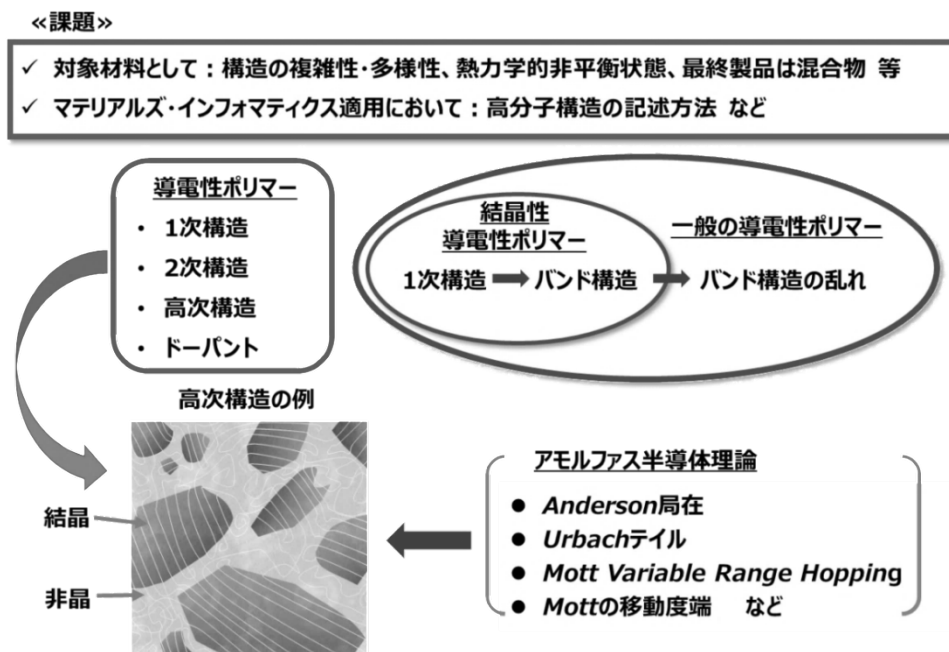


図6 高分子機能材料マテリアルズ・インフォマティクスの課題：導電性ポリマーを例として

3. マテリアルズ・インテグレーション（MI）実現に向けた検討

3-1. 社会ニーズと材料性能の整合

効果的なマテリアルズ・インフォマティクスの実行には、信頼性ある膨大なデータ数から成るデータベースの構築が必要である。高分子材料に限らず、機能材料はその複雑性と記述法未開発とあわせ、従来競争領域の研究開発として実施されてきたため、各社が保有するデータを統合するには高いハードルがある。

我が国の有する高分子機能材料に関するデータ連携を実現するためには、産学が共通で関心をもて、かつ「永遠の課題」とも言える挑戦的な性能を設定した上で、候補となるモデル構造を提示し、産学共同で水準と効率高い分析により新しいデータを取得し、データベースを拡充していくなど戦略的なテーマの設定が重要と考えた。

本プロジェクトにおいては、具体的な性能として、社会ニーズの観点から「超高イオン伝導性」および「透明・超高導電性」について検討を進めることで合意した。この2つの性能はいずれも、30年前には我が国の研究開発が世界に先駆けていたが、現在は欧米や中国に後れを取り始めている状況であり、国際競争力を急ぎ担保するためにもMI活用が不可欠である。また、エネルギー用途に限らず、様々な社会実装が期待される機能性でもある。

① 超高イオン伝導性

全固体超高容量・超高出力蓄電池への適用を目指した、シングルイオン型超高イオン伝導性ポリマーについて、目標値としてイオン伝導度 1.0×10^{-2} S/cm（既知材料より2桁高い値）を設定した。

国際エネルギー機関（IEA）が示す2℃シナリオにおいては、2060年段階で、各国の温室効果ガス削減目標量の積上げから算出したリファレンス技術シナリオに対して、約300億トンのCO₂削減が必要と示されている。これを実現するために期待される導入技術の寄与としては、再生可能エネルギーを35%、省エネルギーを40%としている（図7）。また、2018年12月にポーランドで開催されたCOP24においては、パリ協定の実施ルールについて合意がなされ、世界的な温室効果ガス削減の重要性が改めて認識された。

出力変動のある再生可能エネルギーの導入には、調整力の観点から電力貯蔵技術の導入が不可欠となり、定置用の電力貯蔵（揚水発電、蓄電池、電気二重層キャパシタ等）は、2060年に1,300GW余りの導入が必要と試算されている。特に、今後の技術進展が期待されている蓄電池に関しては、高容量・高出力、低コスト、高安全性の実現に向けた技術革新が必要である。さらに、電化が主要な低炭素化手段である移動用電力貯蔵においては、電気自動車の熾烈な開発競争に代表されるように、既に世界で精力的な取り組みが始まっている。同じくIEAの試算で、2℃シナリオの世界では電気自動車用の蓄電池導入量は2060年に28,000GWhと示されている。電気自動車システムの急速な発展を実現するためには、充電施設の整備とともに、高エネルギー密度、急速充放電性、低コスト、高安全性を備えたゲームチェンジングな蓄電池開発が不可欠である。現在我が国でも、電気自動車用リチウムイオン電池（LIB）に用いられるセラミックス系固体電解質が精力的に研究開発されている。産官学協同によるオールジャパン体制のNEDOプロジェクトにおいても、主に硫化物セラミックス系電解質を用いた全固体LIBの開発が2020

年代後半実用化目指して進められている。本プロジェクトは、軽さ、柔軟性、接着性あわせもつシングルイオン型超高イオン伝導性固体ポリマーに焦点を絞った革新的 LIB をターゲットとしており、硫化物系固体電解質型 LIB と相補しながら、2030 年代前半の社会実装を目指している。さらに、金属負極を用いたより革新的蓄電池に関しては、2040 年頃のデバイス創生を目標としている（図 8）。

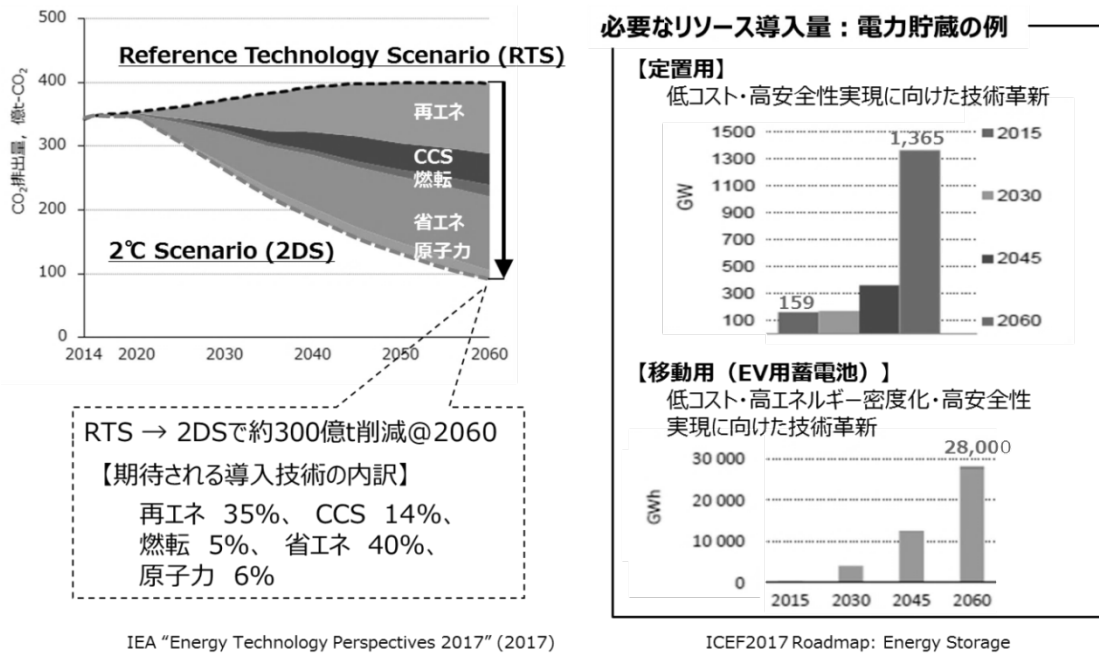


図 7 リソースイノベーションへの期待：電力貯蔵を例として

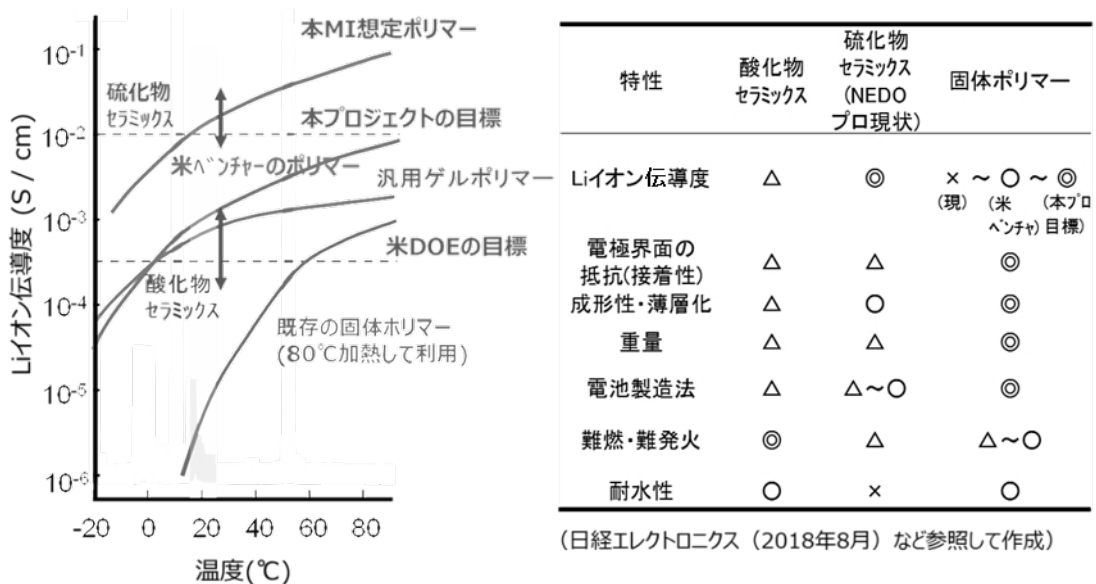


図 8 Li イオン高伝導性材料

② 透明・超高導電性

太陽電池や照明に代表される発光素子等、光エネルギーに関するデバイスへの適用を目指した、超高導電性・高耐久透明ポリマーについて、目標値として表面抵抗 $5 \Omega/\text{sq}$ (既知の透明導電ガラスに匹敵するレベル) を設定した。

CO₂削減が強く期待されている分野として、照明がある。現在、世界の照明で消費される電力は、総使用量の約 20%と推定されている。特に我が国においては、約 25%と照明で消費される電力割合が高い。近年、エネルギー効率の高い無機発光ダイオード照明が使用されるようになってきたが、さらなる高効率化、面発光、形状フリー化、低コスト化が可能な革新的照明デバイスを開発できれば、快適で活気に溢れ、質の高い生活を送ることが可能となる。候補として期待されている有機発光ダイオードでは、透明導電膜として ITO (Indium Tin Oxide) を使用するのが一般的であるが、高コストで希少元素インジウムを用いている。そこで、資源的制約のない高分子機能材料を用いた軽量・形状フリーな ITO 代替透明導電膜が、革新的ブレイクスルー材料となる。フィルムから成るフレキシブルさらにはストレッチャブル有機発光ダイオードは、照明用途のみでなくウェアラブル IoT (Internet of Things) デバイスとして医療・介護、ヘルスケア分野等で大いに見込める。

一方、太陽電池に関しても、低炭素化に向けたキー・エネルギー変換デバイスとして、建物屋上やメガソーラー以外の設置で、世界規模でのさらなる需要拡大が予想されている。軽量で設置容易で低コストな ITO 代替透明導電フィルムの開発が鍵である。さらに、フレキシブル、ストレッチャブル太陽電池の作製も可能となり、ユビキタス太陽電池の普及拡大が実現できる。

3-2. データ科学と検証実験の協同

(1) 高分子機能材料のデータベース構築とその検証

従来の材料開発は、材料科学者の直感、試行錯誤による実験と、理論・計算に沿った系統的实验に基づく演繹的なアプローチが取られてきた。例えば導電性ポリマーでは、セレンディピティに因るポリアセチレンから始まり、その後の膨大な実験で材料開発が進んでいる。一方、マテリアルズ・インフォマティクスに基づく材料開発は、帰納的な機械学習(データ科学)を用いて、膨大な実験に因らず、データ駆動型のアプローチで達成される。機械学習を実行するためには、まずデータベースを構築する必要がある。高分子機能材料に関するデータベースは海外でも未だ整備されていないことから、本プロジェクトでは「機能材料でマテリアルズ・インフォマティクスを進める」という視点で、「超高イオン伝導性」と「透明・超高導電性」の2つの機能に関して、一旦ゼロベースで独自のフォーマットでデータベースを新しく作成した。具体的には、イオン伝導、電子伝導に注目して、公開学術論文や報告書から組成・物性、性能、製法、構造等のデータを取得し、高分子機能材料のマテリアルズ・インフォマティクスに必要なデータベースを初めて構築し、機能材料インフォマティクスの方向性を示した。

超高イオン伝導性ポリマーのデータベース作成で取り込んだ特徴量を下記に記載する。

- ◇ ポリマーの繰り返し単位構造、また分子量、分散度・分岐度
- ◇ Li イオン伝導度、Li 輸率 (@測定温度)

- ◇ 活性化エネルギー、溶媒和エネルギー、解離度
- ◇ ガラス転移温度、融点、粘弾性(貯蔵・損失弾性率、ヤング率)
- ◇ WLF パラメータ、自由体積
- ◇ 誘電率、双極子モーメント
- ◇ ドナー数、アクセプター数
- ◇ ハードネス/ソフトネス・パラメータ
- ◇ HOMO、LUMO
- ◇ 摂動因子(無機フィラー添加物等)

我が国の先駆的な高分子材料データベースとしては、幅広い公開文献から作成した NIMS データベース“PoLyInfo”がある。PoLyInfo は一般的な物質データベースであり、化学式に基づく物質・材料としての高分子ごとに、その物性値、特性、製造法などのデータが一覧できる構成である。これに対し、本プロジェクトで作成したデータベースの構成は、前項 3-1 で設定したような性能・機能、すなわち材料の出口を視点にデータを精査・収集し、機械学習に供すべくくなされている。機械学習としては本来、いずれの視点からのデータベースでも適用できるものであるが、データの精度や網羅範囲の違いは、実行における煩雑さと結果の適切性に限界を残すことになる。また、PoLyInfo を改めて眺め、将来的な PoLyInfo とのデータベース連携を視野に入れ、高分子機能材料のデータベースとして望まれるフォーマット・項目を以下の通りまとめた。

- ◇ 自動的にデータを機械学習に適したファイル形式(csv: comma-separated values、エクセル、テキスト等)に変換できること
- ◇ 高分子を対象とした機械学習でも汎用される SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) が与えられること
- ◇ 実験・性能測定条件を明確にし、データが収集されていること

(2) 構築した高分子機能材料データベースの活用

本プロジェクトで作成したデータベースに基づき、機械学習を適用し出力とした性能との相関を求めることで、材料構造提案までのフローの見える化を行った(図 9: 深層学習の例)。機械学習の手法としては、ランダムフォレスト、勾配ブースティング (Gradient Boosting)、深層学習 (DNN)、サポート・ベクトル・マシン (SVM) 等の手法を用いた(図 10)。さらに、入力データの信頼性を確認するための追加の合成実験と性能測定も実施した。

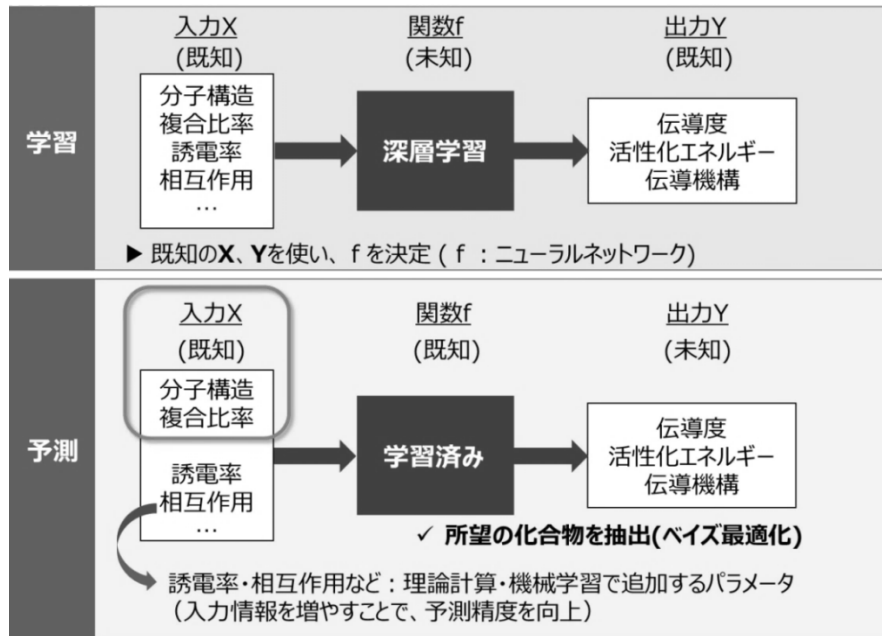


図9 深層学習を用いた化合物スクリーニング (概要)

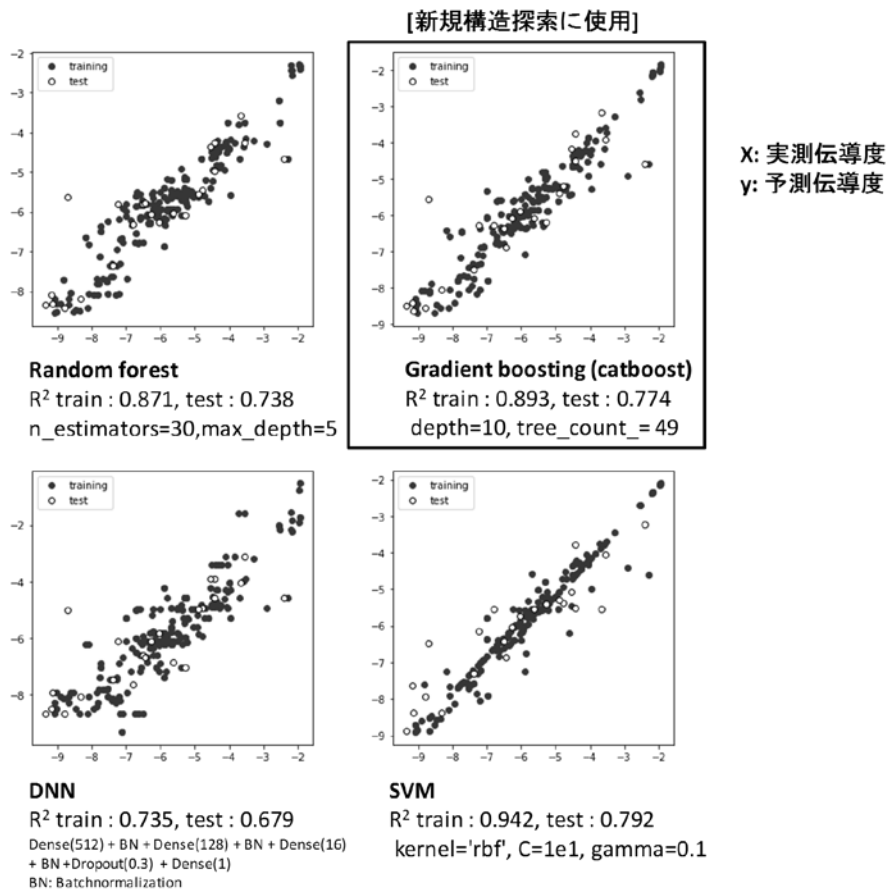


図10 イオン伝導性ポリマーに対する機械学習結果

① 超高イオン伝導性

《実施内容》

- ・ 高分子リチウムイオン伝導性ポリマー約 3500 に関するデータベースを、既学術論文、総説、NEDO プロジェクト報告書より手入力し初めて構築した。
- ・ 高分子のユニット構造について、Mordred 記述子からなる数値特徴量 (1 ユニット構造当たり約 2,000 種) を生成し、入力ベクトルとした。出力量としてはイオン伝導度@温度を用いた。
- ・ 解析モデルとして、ランダムフォレストやその改良版 (Gradient Boosting)、多層ニューラルネットワーク、サポート・ベクトル・マシン (SVM) を適用した。
- ・ 線形回帰 (Lasso) での解析により、特徴量のさらなる絞り込みを検討した。
- ・ データの 90% を訓練用とし、残り 10% をテストデータとした。
- ・ シングルイオン伝導を示す新規候補化合物として、ランダムに設計したポリマー (2.2 万種) をフラグメント・アルゴリズムにより自動作成した。
- ・ データベース中の化合物、並びに上記ランダムポリマーを組み合わせた組成において、ベイズ最適化も用い高い伝導度を示す条件をスクリーニングした。

《得られた結果》

- ・ 本データベースの入出力ベクトルを対応付けるモデルとして、ランダムフォレストや Gradient Boosting モデルを用いることで、伝導度 10^{-2} 近く $\sim 10^{-9}$ S/cm の範囲で、決定係数 R^2 が 0.9 を超える高い学習精度が得られた。
- ・ 上記モデルは、本件のように入力次元数の多い (数千~数万) ベクトルに対しても、次元削減せず高精度で予測できた。
- ・ 上記モデルは解釈性にも優れており、重要な特徴量として、たとえばポリマー中の元素の電気陰性度や極性、また無機添加物の種類と量がイオン伝導度に強く影響することが分かった。Lasso 回帰では、特徴量がイオン伝導度に与える効果の正負も解明できた。
- ・ 本機械学習スキームでは、まだ分子の HOMO、LUMO、誘電率、高次構造等の情報を入力特徴量に含めていないが、計算コストの低い Mordred 記述子 (汎用コンピュータで >10 分子/秒) でも、上記の高い予測精度が得られた。
- ・ $10^{-2} \sim 10^{-3}$ S/cm 級のシングルイオン伝導度を示し得る候補化合物が、ベイズ最適化によるスクリーニングから約 200 件以上見つかった。従来十分に検討されなかった化学構造として、例えば C、S、N アニオンを含むポリマーが高い伝導度を示すと予測された。

《抽出された課題》

- ・ 高イオン伝導領域での予測精度を上げるためのデータベースのデータ拡充が望まれる。
- ・ 外挿領域の予想ができていない。

《今後の検討項目》

- ・ HOMO、LUMO、誘電率、高次構造、Li イオンの移動量 (分子動力学 (MD) 計算) を特徴量として含む機械学習を実施し、予測精度の向上を目指す。
- ・ (実験・理論計算による) 特徴量の追加により、伝導度に加え、電気化学的 (電池) 安定

性、機械物性、界面状態等の予測も目指す。合成難易度も鑑み、候補化学構造のポテンシャルを例示する。

- ・ 外挿領域の予想を可能にするため、演繹的アプローチとの融合の方向性を示す（スパコン京の適用ほか）。

② 透明・超高導電性

《実施内容》

- ・ 既報学術論文、総説を用いて PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrene sulfonate)) に関するデータベースを初めて構築した。
- ・ 約 5,000 S/cm (膜厚を 0.1 μm として表面抵抗は約 20 Ω/sq) の導電率を示す PEDOT/PSS の既報論文(硫酸処理による導電率の飛躍的向上)において、硫酸の代替化合物を約 5,000 種スクリーニングした。
- ・ PEDOT:PSS のメタンスルホン酸処理の再実験を実施した。

《得られた結果》

- ・ 機械学習を用いることで、PEDOT/PSS の後処理における硫酸処理の代替として、6,000 S/cm 級を示しうる低分子化合物が複数見つかった。例えば、スルホン酸構造をもつ Zwitter ionic 化合物が候補化合物として抽出された。
- ・ 既報論文に従い例えば、PEDOT:PSS (Aldrich 社製) をスピンコートで成膜し、メタンスルホン酸を加え加熱、洗浄乾燥して透明フィルムを作成した。van der Pauw 法による測定で、既報値に近い 1,900 S/cm の導電率を確認した。

《抽出された課題》

- ・ PEDOT の導電率向上という内挿領域の予想においては、予測精度を上げるためのデータ数(後処理化合物、後処理条件等)の増加が必要。
- ・ 外挿領域の予想ができていない。PEDOT に代わる、新たな骨格を有する超高導電性ポリマーの分子構造提案が未だ。

《今後の検討項目》

- ・ PEDOT においては、従来検討されてきた酸の代替として、マテリアルズ・インフォマティクスで見出した低分子化合物を用いた実験による予測の検証。
- ・ HOMO、LUMO、誘電率、高次構造を特徴量として含めた機械学習を実施し、予測精度の向上を目指す。
- ・ (実験・理論計算による) 特徴量の追加により、導電率に加え、耐久性、機械物性、界面状態等の予測も目指す。
- ・ 外挿領域の予想を可能にするため、演繹的アプローチとの融合の方向性を示す（スパコン京の適用）。

(3) 計算科学を活用したデータ範囲拡張の可能性

上述の通り、本プロジェクトで設定した二つのターゲット性能に関して、内挿ベースのマテリアルズ・インフォマティクスにより、目標として設定した物性値を有する候補構造の提案が可能であることを示した。しかしながら、目標とする性能をもつ革新的材料を提案するために

は、「外挿」での構造／性能予測が必要となる（図 11）。

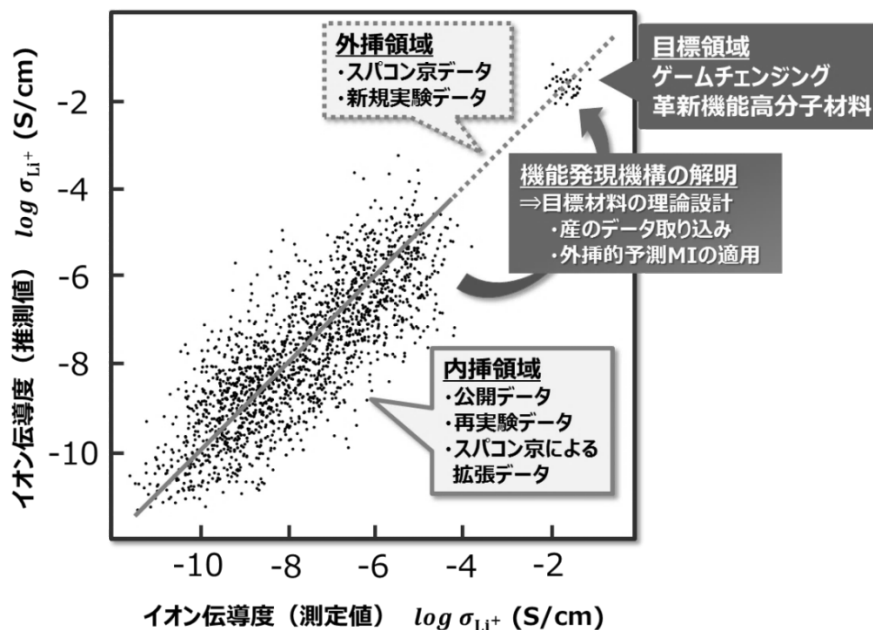


図 11 「外挿」での構造／性能予測

演繹的な計算科学を用いれば、実験で得られない電気陰性度、波動関数、ハードネス／ソフトネス・パラメータ、イオン・高分子鎖間結合エネルギー等のようなシミュレーションデータを取得できる。また、計算科学により機能発現機構を明らかにできれば、外挿領域でも使用可能な特徴量と機能の因果関係を表す関係式が導出できるため、外挿的マテリアルズ・インフォマティクスが可能になると考えられる。

本プロジェクトでは、スパコン京を活用した、計算科学とマテリアルズ・インフォマティクスの融合を検討した。京の活用方法としては、①外挿領域の予想までできるよう、機能発現機構を解析する、②マテリアルズ・インフォマティクスの基礎データベースを拡張する（ハイスループット・シミュレーション）、の2つの方法が考えられる。特に、1番目の機能発現機構の解明を通して、記述子と特性値の間の普遍的な関係式が得られれば、外挿領域においても構造／性能予想ができるようになる。つまり、機械学習の適用範囲が外挿領域まで拡張できるため、京の機構解析での活用が期待される。これは、限られた領域の実験データから原理となる関係式を見つけ出し、それに基づいて全く異なる領域の現象を予想することに対応している。

具体的な検討結果は以下の通りである。

《実施内容》

- ・ 超高イオン伝導性では、Li 塩における Li^+ とアニオンとの相互作用に関して量子化学シミュレーションを実施し、イオン伝導性との関係を検討した。また、ポリフェニレンスルフィド、クロラニル、Li ビス(トリフルオロメタンスルホニル)アミドからなる全固体イオン伝導性ポリマーに対して MD 計算を実施し、イオン伝導性におけるドナー・アクセプター形成との関係を示唆した。

- ・ 透明・高導電性では、PEDOT と PEDOT:Tos（トシレート）のホッピング伝導とバンド伝導のシミュレーションを実施した。

《得られた結果》

- ・ 量子化学計算により、イオン伝導機構が従来提案されているメカニズムでは説明できないことが分かった。機構解明には、MD 計算等を用いる必要がある。
- ・ MD 計算により、イオン伝導性におけるドナーアクセプター形成の重要性が認められた。定量的な議論のためには、分極力場等を用いる必要がある。
- ・ バンド計算により、Tos をドーピングすることで正孔移動度が大きくなることが分かった。

《抽出された課題》

- ・ 機能発現機構が未解明であり、外挿領域の予想ができていない。
- ・ 産のデータでの適用は未だ。
- ・ 外挿的予想マテリアルズ・インフォマティクスでの援用。
- ・ PEDOT に代わる、新たな骨格を有する超高導電性ポリマーの分子構造提案が未だ。

《今後の検討項目》

- ・ 到達可能なイオン伝導度の最高値（研究ターゲット）を計算する。
- ・ 外挿領域の予想を可能にするために、導電性メカニズムを解明する。
- ・ ハイスループット・シミュレーションを用いて、データベースの拡張を実施する。

(4) データベース連携と課題

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つ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。たとえば前述のように、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、早稲田大学が主体的に検討した前述のデータベース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、改めてデータベース連携の可能性を協議したところ、複数の企業から前向きな回答を得た。

ここではその一例として、JXTG エネルギーが保有するデータを上記データベースへ連携した結果を示す。具体的には、JXTG エネルギーに蓄積しているイオン伝導性ポリマーに関する実験結果より、データ数が約 800 のデータベースを作成した。過去のデータは紙ベースおよび光ディスクに保存されているため、今回、関連する実験データを担当者が全て手作業で読み取った。続いて、早稲田大学でのデータベース構築のルールに基づきデータを整理し、種々の温度条件下での約 100 個のデータを用いて機械学習（ランダムフォレスト、Gradient Boosting、DNN、SVM）を行った。さらに、温度を 20~30℃に限定したデータで、機械学習の精度向上を試みた（図 12）。その結果、ランダムフォレストを用いることで、高い学習精度が得られた。また伝導性に寄与する重要な特徴量は、早稲田大学での結果と異なり、新しい構造・組成の姿が示唆された。

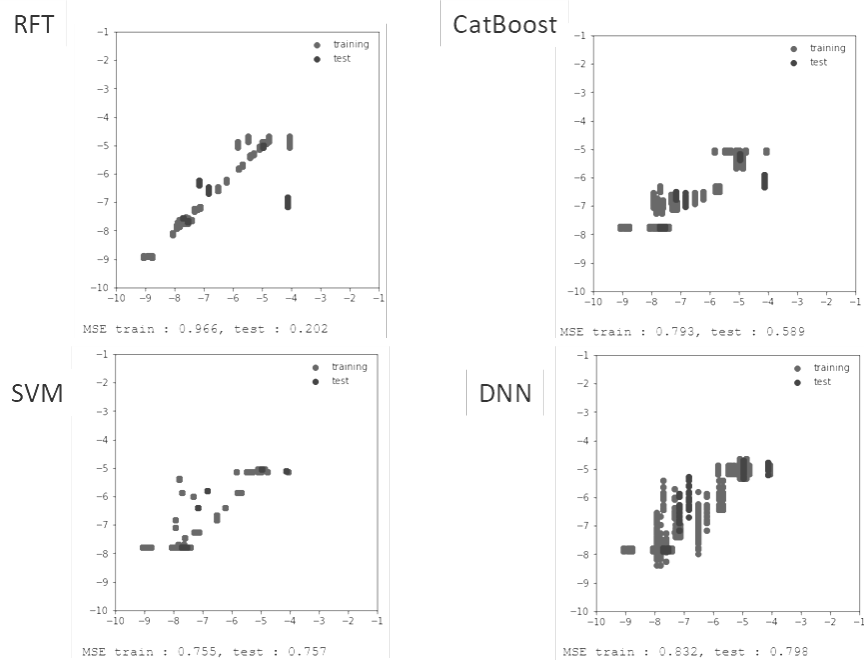


図 12 産業界データを用いたイオン伝導性ポリマーに関する機械学習結果

今後は本プロジェクトのデータベースに JXTG エネルギーのデータ（特性の経時変化、温度特性、化審法適合性等の製品化データを含む）を統合し、拡張したデータで機械学習を再度実施することで、公開データと企業が保有するデータを連携させた際の有効性を示す予定である。今回のデータベース連携の試行を通して抽出された利点と課題を以下に示す。

① JXTG エネルギーにおける機能に特化したスモールデータベースの構築

《利点》

- ・ 十分に追実験された信頼性のあるデータ、またネガティブデータを活用
- ・ 研究テーマのリバイバルに因るデータの再価値化

《課題》

- ・ 過去のデータ収集には多くの作業量の負荷、また散逸の可能性あり（企業内の保管データ場所が担保されていること、それを知っている人材が残っていることが重要）

② 連携へのフォーマット統一

《利点》

- ・ 機能に特化した統一フォーマットの利用（早稲田大学で作成したデータベースのフォーマットを活用）

《課題》

- ・ 今後のナショナルデータベース連携に向けた取組み（NIMS・PoLyInfo との連携）

③ 連携による効果、新しく見えてきたこと

《利点》

- ・ 産は官学の基礎を活用
- ・ 学は産の工業化を見据えた質の高いデータを活用

- ・ 産学データ連携による実用性の高い高分子機能材料のハイスループット開発

3-3. データ科学の素養もつ材料科学者の育成

(1) 材料開発でのデータ技術者の育成に向けた大学院科目の設置

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、実際の材料に落とし込むためには、ものづくり（材料科学・有機合成化学等）との融合が不可欠である。一方で、フィジカルな材料研究に従事してきた研究者が情報科学を学ぶのが良いのか、情報科学を習得した後に材料科学でスキルを活用するのが良いのか、に関しては、国レベルでも議論しており、マテリアルズ・インフォマティクスに資する材料データベースのビッグデータ化の進捗と併せて引き続き検討していく必要がある。一般論として、データ精度の目利きができる、背景にある理論の仮説を立てることができる、データ量を補完するためのシミュレーション等の知見を有し、しかも材料科学、化学、物質工学の専門性を兼ね備えた人材が望まれることは間違いない。

早稲田大学では、以下の通り、既に実務型データ科学者育成プログラムを実施している。

《高度データ関連人材育成コンソーシアム》

- ・ 8大学6機関10企業の参画組織を束ね、高度な専門性の上にデータ関連技術を駆使できる博士人材を発掘・育成・活躍促進するプログラム（2017年度～）
- ・ 例えば同プログラムが主催して博士学生、ポスドク、修士学生を対象にして早稲田大学にて開催（2019年1月）「マテリアルズ・インフォマティクス入門：実践セミナー」

《データ科学総合研究教育センター》

- ・ 理工系・人文社会科学系の研究者・学生が、データ科学を活用する手法と方法論を修得することを支援する組織「データ科学総合研究教育センター」を設置（2017年～）

本プロジェクトでは、早稲田大学における既存のプログラムとの融合も踏まえ、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、早稲田大学における、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M I（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、早稲田大学先進理工学研究科に次の新科目が、2019年度秋学期より開設されることになった（カッコ内は教育の主担当者案）。

➤ 『マテリアルズ・インフォマティクスα：M Iの基礎スキルを学ぶ』

1. Pythonを学ぶ1（早稲田大学）
2. Pythonを学ぶ2（早稲田大学）
3. ビッグデータの視覚化1（早稲田大学）
4. ビッグデータの視覚化2（早稲田大学）
5. M I 概論（NIMS）
6. M Iの基礎理論1（NIMS）
7. M Iの基礎理論2（NIMS）

8. M I のハンズオン (NIMS、早稲田大学)
- 『マテリアルズ・インフォマティクスβ：M I の応用を学ぶ』
1. データベースとA I を使った研究事例紹介 (産総研、早稲田大学)
 2. データベースとM I を使った研究事例紹介 1 (早稲田大学)
 3. データベースとM I を使った研究事例紹介 2 (理研)
 4. 産業界におけるM I の実践 1 (産業界)
 5. 産業界におけるM I の実践 2 (産業界)
 6. M I の実践理論 (NIMS)
 7. M I のハンズオン 1 (NIMS、早稲田大学)
 8. M I のハンズオン 2 (NIMS、早稲田大学)

(2) 卓越大学院プログラムでの産学協働の提示

「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、早稲田大学「パワー・エネルギー・プロフェッショナル育成プログラム」が採択された(2018年10月)。この卓越大学院プログラムは、i)早稲田大学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、等を目標としており、産学共同研究を通して、エネルギー・材料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。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材料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ΔkW 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改革し、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予備経験と方法論の修得が不可欠である。

3-4. その他

M I の推進に関して、プロジェクト会議やヒアリング等が出された代表的なコメントを以下に示す。

- ・ 早稲田大学が主体に、論文等公知データを使ってデータベースを作成したが、データベース連携を志向するにあたっては、自分達で新たに取得したデータを用いることになる。その場合、データの取り扱いに対するルール決めが必須となる。また、データベースのフォーマットを決める必要がある。一番大変なのは使えるデータにすることであ

り、そのためには、できるだけ早くフォーマットを統一した方が良い。

- ・ 企業が保有データをオープンにするにはハードルがある。ただ、本プロジェクトのように、ある目的で作ったパブリックデータベースの価値が十分あることが分かれば、社内を説得できる。つまり、データ提供に対しての社内ハードルを下げることができる。
- ・ 1社ならやりたいというところがあるので、まずは走れるところから走るのが良い。それに他社が乗りたいというのならベターで、そこから連携が始まる。1社でも2社でも良いので、こういうものを作りたいという企業が集まって、まずは活動をスタートすることが肝要。

4. 産業競争力強化のための提言

4-1. マテリアルズ・インフォマティクス推進に関する課題

(1) ハイスループット開発の実現

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を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、データベース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13)。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、合成ロボット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。

マテリアルズ・インフォマティクスの手法としての究極の目標は、目的性能から材料を設計するという「逆問題」の解であり、理論・実験両面から、現在各種の取り組みが開始されている。例えば、本年度開始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年度～)では、主に無機系構造材料に対して、逆問題マテリアルズ・インフォマティクスの開発が目標にあげられている。本プロジェクトでの提言を踏まえた今後の進むべき方向は、世界でも未着手な高分子機能材料に対する逆問題マテリアルズ・インフォマティクスの開発に、機能材料での我が国の先導データ蓄積を糾合し、挑戦することである。試行錯誤の煩雑と時間・経費の消耗多かつた新規機能材料開発の短縮は間違いない。

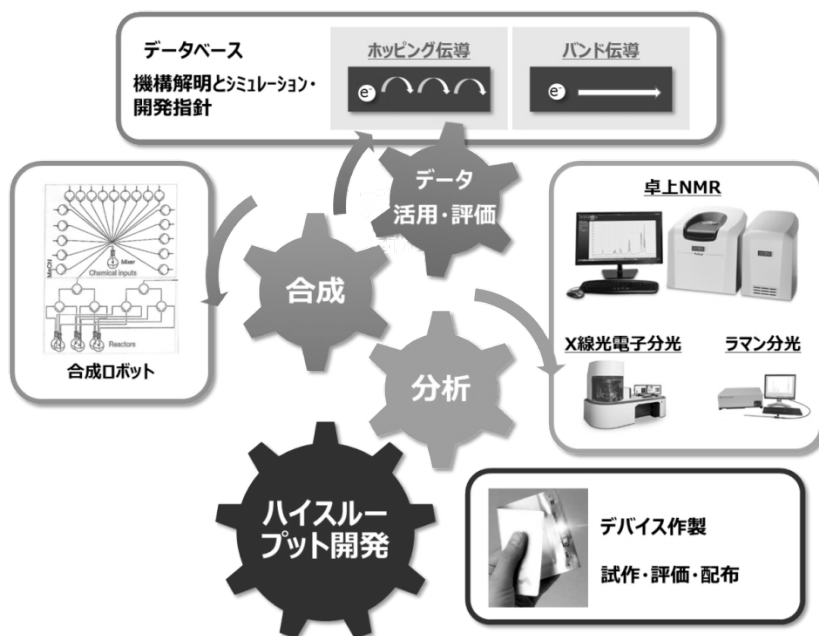


図13 ハイスループット開発

(2) さらなるデータベース連携に向けて

マテリアルズ・インフォマティクスを波及させるための核心は、データベースのビッグデータ化であり、これは Society 5.0 の“Cyber Physical System”を実現するための肝となる。材料分野においては、NIMS の化学 MOP、NEDO 超超プロジェクト、経産省 Connected Industries 素材分科会（日化協）等で、マテリアルズ・インフォマティクスを活用した材料開発は推進されているものの、これまで産業界が蓄積してきた材料開発に関する、個社が保有するデータを連携させるための取り組みの促進は、これからの課題と言える。各社が保有するデータをパブリックデータベースに提供するためには、データ提供に際するインセンティブの設計や、データベースに蓄積されたデータの2次利用に対する責任問題・データ囲い込みが起こらないような制度設計等のルール・制度課題、データベース間の相互運用性の確保・セキュリティ観点からの適切なアクセス制御等の技術的課題に関する検討が必要となるが、これらを事前設計した上で、各社の連携を模索するのは現実的とは言えない。今後は、まずはパブリックデータの信頼性の担保の意味でも、フラットなプラットフォームを提供可能な大学が共通基盤となるデータベースを構築・管理を担った上で、産業界が「我が国の材料開発の産業競争力強化」という俯瞰した立場のもと、本プロジェクトで検討したように、個別産学連携を起点として、産業界が保有するデータを融合することで共通基盤のデータベースを拡充しつつ、効果的な機械学習の実行のために、データフォーマットの統一を図っていくことが重要と考える。我が国として、協調領域で一般ユーザーが利便性に優れた高分子機能材料開発のためのデータベースの完成を目指す。

なおデータ数が多いという課題を踏まえ、転移学習の手法（少ないデータを、それと関連のある多量に入手容易なデータで代替する手法）等を活用し、ビッグデータ化を試行する。データの種類によっては、スパコン京によるシミュレーションを最大限活用する基礎検討の推進も不可欠である。

(3) MI に関する人材育成

早稲田大学においてこれまで検討してきたデータ科学人材育成プログラムに、本プロジェクトでのMI人材育成に関する提言を併せることで、データ科学とものづくりの両方の素養をもつ研究者の育成に関する土壌を形成することができた。これが実効的に機能していることを確認するためにも、早稲田大学に新設するMI科目を卓越大学院プログラムと連動させ、同プログラムへ参加する産学双方の人材のMI習熟状況をモニターすることで、より具体的なカリキュラムを提案していくことが今後の一つの課題である。

4-2. 提言実現に向けた展開

本プロジェクトで検討したMIに関するインテグレーションは、「社会ニーズと材料性能のインテグレーション」「インフォマティクス手法のインテグレーション」「データ科学とものづくりのインテグレーション（人材育成）」の3つである。このうち、インフォマティクス手法の整備と人材育成に関しては、フラットなプラットフォームを有する大学が核となり、その推進基盤を学内に整備し、それを複数の企業が個別産学連携を通して活用することで、我が国と

してMIを推進する土壌が形成され、さらにはそれを基盤とした産産学学連携体制が構築できると考えている（図14）。MI推進体制の運営スキームを含めた拠点整備構築に向けた必要事項を以下の通り整理した。



図14 3つのインテグレーションと大学への拠点構築

◇ 産の役割

- ・ 積極的な自社保有データの開示

過去に自社で蓄積した高分子機能材料のデータに関し、まずは大学との個別産学連携を通して、革新的な材料開発への適用の可能性を検討する。そのために、本プロジェクトで明示したような機能性を含めて、自社過去データをデジタル化すべく整備を進める。
- ・ 学を介した協調した材料開発体制の構築

データベース連携に関しては、スモールスタートでその効果を検証した結果としてビッグデータ化を目指すべきである。各企業においては、まずは自社の過去データ活用の観点で大学との連携を検討し、大学との間でデータベースの公開に関するルールを決めるのが現実的な進め方と考える。個別連携を通じたデータ量ははまだ精度高い解析には不足しているが、各企業は大学との連携を通じたデータ連携の有効性を認識した上で、他社とのより広いデータ連携を改めて検証していくのが実際の解と言える。

◇ 学の役割

- ・ マテリアルズ・インフォマティクスの外挿での予測に関する手法の確立（研究開発の

推進、大容量コンピュータやスパコン京・ポスト京の利用体制の整備を含む)

- ・ 最新の合成・分析設備・スペースとその運用支援、社会実装への関連施設の活用（例えば電池製造・評価センター）といった、産業界も活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（合成、分析）の整備と運営（後述の官の支援に基づき実施）。
- ・ 機能材料に関する公開データの追加実験による信頼性の担保
- ・ 大学のデータ科学センターも活用し、各社データの秘匿性の担保はもちろん、その後の国レベルのデータ連携までを視野に入れ、機能材料に適した共通フォーマットを提示
- ・ 大学における「ものづくりと融合したマテリアルズ・インフォマティクス科目」の実効性の担保と卓越大学院プログラムとの協働（引き続き産業界と連携）

◇ 官の役割

- ・ 各種データベース連携の支援・推進

国内でも SIP、NIMS の化学 MOP、NEDO 超超プロジェクト、経産省 Connected Industries 素材分科会（日化協）等で、マテリアルズ・インフォマティクスの推進に関する取り組みが行われているが、材料開発へのデータ科学の適用はいわば萌芽期とも言え、我が国の材料開発の強みをさらに強化するためには、引き続き機能性を含めた様々な視点からマテリアルズ・インフォマティクス駆動の材料開発の取り組みを推進し、我が国の材料開発での優位性を確固たるものにする必要がある。

- ・ 大学への M I 拠点形成に対する支援

マテリアルズ・インフォマティクスの手法に限らず、前述の通り機能材料開発において産業界の連携を促進するためには大学のフラットなプラットフォームを活用することが効率高い推進には極めて重要であり、産業界も活用できる最新の合成・分析機器等も整備するために、国家プロジェクトを通じた支援を要望する。

以上

[参考文献]

1. IEA, Energy Technology Perspectives 2017 (ETP 2017)、 <http://www.iea.org/etp/>
2. ICEF (The Innovation for Cool Earth Forum) 2017 Roadmap: Energy Storage、
<https://www.icef-forum.org/>
3. NEDO 技術戦略研究センターレポート TRC Foresight、機能材料分野の技術戦略策定に向けて、2015年10月。
4. マテリアルズインフォマティクス—探索と設計—、石井 一夫訳、NTS(2017年)。
5. マテリアルズ・インフォマティクス～データ科学と計算・実験の融合による材料開発～、情報機構(2018年)。
6. 内閣府、日本経済2016—2017、第2章 新たな産業変化への対応
http://www5.cao.go.jp/keizai3/2016/0117nk/n16_2_1.html
7. MGI (Materials Genome Initiative)、 <https://www.mgi.gov/>
8. NOMAD (Novel Materials Discovery) Laboratory プロジェクト
<https://nomad-coe.eu/>
9. MatSEEC (Materials Science and Engineering Expert Committee)、
<http://archives.esf.org/hosting-experts/expert-boards-and-committees/materials-science-and-engineering.html>
10. 科学技術振興機構 (JST)、(戦略プロポーザル) データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進 (マテリアルズ・インフォマティクス) (2013年) /GRDS-FY2013-SP-01.
11. 科学技術振興機構 (JST) 事業「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)」、
http://www.nims.go.jp/MII-I/about/index_m.html
12. 科学技術振興機構 (JST)、さきがけ [マテリアルズインフォ] 理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築。
13. 科学技術振興機構 (JST)、CREST [革新材料開発] 実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新。
14. NEDO 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト
http://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html
15. D. J. Audus and J. J. de Pablo, Polymer Informatics: Opportunities and Challenges, *ACS Macro Lett.* 2017, 6, 1078–1082.
16. C. Kim, A. Chandrasekaran, T. D. Huan, D. Das, R. Ramprasad, Polymer Genome: A Data-Powered Polymer Informatics Platform for Property Predictions, *J. Phys. Chem. C* 2018, 122, 17575–17585.
17. 日経エレクトロニクス 2018年1月号、「全固体電池、いざEV/IoTへ」。
18. NEDO 先進・革新蓄電池材料評価技術開発 (第2期)

- https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100146.html
19. 科学技術振興機構 (JST)、研究開発の俯瞰報告書 エネルギー分野 (2017 年) /CRDS-FY2016-FR-02、Panoramic View of the Energy Field (2017).
 20. H. Shi, C. Liu, Q. Jiang, J. Xu, Effective Approaches to Improve the Electrical Conductivity of PEDOT:PSS: A Review, *Adv. Electron. Mater.* 2015, 1, 1500017.
 21. K. Hatakeyama-Sato, K. Oyaizu, Y. Nishikitani, H. Nishide, Materials Informatics for Energy-related Functional Polymers, Annual Fall Meeting of Polymer Society of Korea, Oct. 12, 2018, Gyeongju, Korea.
 22. K. Hatakeyama-Sato, T. Tezuka, Y. Nishikitani, H. Nishide, K. Oyaizu, Synthesis of Lithium-ion Conducting Polymers Designed by Machine Learning-based Prediction and Screening, *Chem. Lett.*, doi.org/10.1246/cl.180847.
 23. R package iqspr v2.3 @CRAN
<https://cran.r-project.org/web/packages/iqspr/index.htm>
 24. R package iqspr v2.3 @GitHub
<https://github.com/GLambard/inverse-moleculardesign>
 25. 吉田 亮、サイエンティフィック・システム研究会科学技術計算分科会、マテリアルズインフォマティクスの最前線 (2017) .
 26. R. Gómez-Bombarelli, J. Aguilera-Iparraguirre, T. D. Hirzel, D. Duvenaud, D. Maclaurin, M. A. Blood-Forsythe, H. S. Chae, M. Einzinger, D.-G. Ha, T. Wu, G. Markopoulos, S. Jeon, H. Kang, H. Miyazaki, M. Numata, S. Kim, W. Huang, S. I. Hong, M. Baldo, R. P. Adams, A. Aspuru-Guzik, Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a high-throughput virtual screening and experimental approach, *Nat. Mater.*, 2016, 5, 1120-1128.
 27. 文部科学省、卓越大学院プログラム (WISE Program (Doctoral Program for World-leading Innovative & Smart Education))
http://www.mext.go.jp/a_menu/koutou/kaikaku/takuetudaigakuin/index.htm
 28. 日本化学会「化学と工業」、特集 マテリアルズ・インフォマティクス、71 巻 8 号 (2018).
 29. 内閣府、戦略創造イノベーションプログラム (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
https://www8.cao.go.jp/cstp/gaiyo/sip/keikaku2/5_material.pdf

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