

【産業競争力懇談会 2013年度 研究会 最終報告】

【シミュレーション応用による新材料設計手法】

2014年3月3日

産業競争力懇談会 **COCN**

【エグゼクティブサマリ】

1. 本研究会の基本的考え方

現在、計算科学シミュレーション技術(以下シミュレーション、解析、CAE技術)は産業界のものづくりの実際の現場に普及しており、その技術は大規模化、高度化しつつある。しかし、大規模・高度シミュレーション技術を駆使できる企業はまだ少なく、また、産業分野や企業規模によって大きな差が存在している。さらに、シミュレーション環境の構築や解析技術ノウハウ蓄積にも課題が多く、特に、シミュレーションや解析情報データと思考(設計)をうまく繋げたものづくりへの活用、すなわち、シミュレーションをうまく活用するための「知識、知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)」がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成が重要だが、それと共に新たな視点へのシミュレーション技術の研究と方法論の進展が必要である。

今年度は昨年度に引き続き、材料シミュレーション分野に関して、以下の主旨で検討した。

■テーマ化の目的：

新しい材料の設計開発において、大規模高精度計測(Spring8等)やスパコン解析等から得られる新しい物性や現象知見のデータベースとマルチスケール材料シミュレーションを情報科学により連携させる新材料設計手法のあり方や材料設計者と解析手法の連携、実現のための産学連携の仕組みを探索し、新材料設計を活性化するための材料産業化における競争力強化の仕組みを構築する

■テーマ設定の背景：

産業界における材料シミュレーション活用の現状を把握し、将来のあるべき姿を検討するために、企業アンケートやヒアリング、材料分野における先端シミュレーション技術の調査、分析等を行い、新材料設計における材料シミュレーション技術活用の課題を明確にしてきた。

その結果、あるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料シミュレーションの高精度化と大規模化、および材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。

2. 検討の視点と範囲、対象分野

具体的な材料課題に対して、材料の製造プロセスから設計までを一貫して俯瞰し、特に以下の視点を重点的に検討した。

- 1) 材料設計と情報科学の連携(「マテリアルインフォマティクス」)への取り組みの重要性は、アカデミアや国の独立行政機関等においても強調され始めている。また、米国ではすでに「Materials Genome」というプロジェクトがあり、現在、日本が強いと言われる材料分野においても情報科学的アプローチを考慮した新たな考え方が必要と思われる。
- 2) 昨年の研究会で検討したアイデアを具体化するため、特に対象として、産業界からの立場としてより実用に即した、新材料の特性を左右する材料界面(構造材料粒界や金属-樹脂界面等)に着目。構造材料、複合材料等を想定した場合の性能、信頼性における共通課題として情報科学と計算科学の連携の仕組みの可能性を検討する。

3. 昨年の研究会が提言した内容の概要

材料シミュレーション活用のあるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。その一例として「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」構想を提言した（昨年度最終報告を参照）。

4. 本年度の検討内容

4.1 対象分野の選定

産業界からの立場として、より実用に即した、特に対象として、新材料の特性を左右する材料界面（構造材料粒界や金属-樹脂界面等）に着目。構造材料、複合材料等を想定した場合の性能、信頼性における共通課題として情報科学と計算科学の連携の仕組みの可能性を検討する。

4.2 材料界面設計における現状の課題

現状の材料界面設計における多様な問題点について、共通課題と個別課題に分けて分析を実施。さらに、課題から見られる、材料界面設計を支配する重要因子を以下に検討した。詳細は省略（本文参照）。

4.3 材料界面設計における情報科学を活用した材料設計の考え方

情報科学と材料シミュレーションのあるべき連携の議論において、アナロジーとして活用、融合ができる他分野手法（創薬、Big データ、最適化手法、半導体製造分野他）のサーベイに基づき、新たな研究分野の追加や技術創出等、現状のモノづくりにおける実用化課題を抽出した。

4.3.1 新材料設計において情報科学の活用期待する点

解決すべき課題：

- ・ 具体的な例（粒界構造制御、金属-樹脂界面設計など）
- ・ 複合材料設計における界面強度支配因子の解明
- ・ 界面設計において着目すべき物性・指標の解明

上記に対して、材料界面設計に情報科学を活用することの上記課題の解決、メリット、期待される点を以下にまとめた。

- 1) 他材料（違う分野）の組み合わせデータが新しい材料設計のヒントになる（類似性）
- 2) 網羅的な検討が可能になる
- 3) 情報科学活用による開発の加速、物理・化学モデル構築の加速
- 4) 従来見過ごされていた重要因子の発見
- 5) 個々の材料の物性と界面物性との関係を網羅的に調べることにより、これまで気付かなかった界面物性支配因子が明らかになり、新たな設計指針が得られる
- 6) 界面シミュレーションのボトルネックである計算時間や計算アルゴリズムの効率化

- 7) ナノ～ミクロスケールでの分子挙動を理解した上でのプロセスの最適化
- 8) 3-D SEM や TEM 画像を用いた界面の可視化（立体化）
- 9) メソスケールの表面粗さやテクスチャ加工など表面フラクタルと界面特性（せん断、接着、親水、疎水）の関係を統計的理解。

4.3.2 情報科学的手法の世界レベルベンチマーク（詳細は省略、本文参照）

- ・ マテリアルインフォマテックス
 - 1) ハイスループット計算材料設計に関するレビュー
 - 2) 2元合金の融点をデータマイニングにより予測.
 - 3) 米国のマテリアル・ゲノム・イニシアチブ：
 - 4) QSPR
- ・ バイオ・創薬関係（QSAR、QSPR、ドッキングシミュレーション）
 - 1) 構造関連の手法の活用（by ウキペディア）：
 - 2) 材料界面設計とたんぱく質とリガンド化合物の最適設計は類似点を見出しうる.
 - 3) バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスの融合
 - 4) Deep Learning（深層学習）
 - 5) JST（CRDS）「課題解決型の新物質・材料研究」ワークショップ
 - 6) タンパク質の構造解析、機能理解の手法として SAXS 実験と MD シミュレーションを組み合わせた MD-SAXS 法
 - 7) 最適化手法：応答曲面法
 - 8) 創薬・品質工学利用の QSPR を吸着材デザインに適用
 - 9) 直交表（タグチメソッド）と分子シミュレーションの融合
の解析、製造プロセスの最適化、電子回路デザインの最適化等が実施され始めている
- ・ パターン認識、文字認識、画像処理

4.3.3 情報科学の活用における実用上の工夫すべき点

- 1) ベンチマークから得られる、情報科学活用のメリットと課題
 - ・ バイオの考え方の例→ケモインフォの「記述子」の考えかたの導入
 - ・ 演繹的思考から一旦離れて、入手可能な全てのデータを記述子として入力
 - ・ 主要な寄与因子を知る一方で、本来考慮すべき因子の見落としが発生（QSPR 等）.
 - ・ 金属組織や析出相など熟練者が画像から判断する情報の取り扱い.
- 2) 製造プロセス情報も考慮した（拘束条件）材料設計の考え方
 - ・ 現時の材料界面設計では、設計に大きく影響する製造プロセス因子も考慮した設計の考え方が大事である.
 - ・ 製造プロセスはノウハウ中心であり、メカニズム解明が難しく、情報科学的手法が有効
- 3) 多様な情報を含め一見意味のないものも含めたデータベースの構築（新しい発見に必要）
 - ・ ケモインフォでは「合成」因子までパラメータ化

- ・ 温度、湿度、圧力⇒粘度特性（樹脂）、析出・結晶粒径（金属）、酸化、劣化
- ・ ライン速度、プロセス時間（特に熱硬化樹脂の場合）
- ・ 樹脂フィラーの各種性質や相乗効果 ⇒適材・組合せ・添加量の探索

4.4 材料界面設計における計測データとシミュレーションの連携の考え方

多様な計測データ（Spring8 や J-PARC 等含む）とシミュレーションの連携により、特定の特性を実現する材料を発見・創成する新しい研究手法の開発、製造プロセス連携及び産官学連携の仕組み例をサーベイして、成功事例分析と実用化のための課題を抽出する。

現状の計測データ活用における課題、問題点を以下にまとめた。

4.4.1 主な課題、問題点：

- 1) 計測データとシミュレーションデータを単に比較する手法の限界
- 2) 計測自体の限界
- 3) 界面状態計測技術の課題
- 4) 材料界面データベースの課題
- 5) 材料中に存在する相の3次元情報を実験的に把握することは容易ではない
- 6) Spring8、J-PARC 等の大型共用施設活用したデータの有効活用

4.4.2 計測データ活用の事例ベンチマーク

- ・ Spring8、J-PARC 等の大型共用施設活用
 - 1) Spring8 による微細領域（はんだ接続部のボイド）の計測とエレクトロマイグレーションのシミュレーションの連携
- ・ データ同化手法（気象、流体・・・）
 - 1) 4次元同化（データ同化）

リアルタイム応力測定データと時系列構造解析を使った4次元同化による疲労予測
 - 2) 各種流れ場計測データをリアルタイムにCFD流体解析へフィードバックし、圧力分布などを可視化「Super-real-time medical engineering」
 - 3) 半導体製造プロセスにおけるポリマーと基板との界面のモデリング・シミュレーション
- ・ データベース活用
 - 1) リチウムイオン電池用カソード材料の設計において、無機化合物の知識データベースの活用により、ハイスループットDFT計算用入力構造を予測（MIT）
 - 2) ライフ系の問題として、糖鎖データベースを活用した診断技術一般
- ・ 計測データ活用：
 - 1) 基礎理論研究からデバイス設計に上手につなぐ、微視的な計測データ（走査プローブ等）との比較・チェック手法
 - 2) SOFCの多孔質電極の内部の3次元構造をFIB-SEMで分析計測し、得られた構造データでガスの拡散性をシミュレーション解析。

- ・蛋白質結晶構造解析（膜タンパク、リガンド結合状態での構造）

4.4.3 材料シミュレーションの高精度化、計測連携活用のための実用上の工夫すべき点

1) ベンチマークから得られる、計測データ活用のメリットと課題

- ・界面内部での物理的・化学的現象がオンタイムで可視化できるようになれば、界面モデリングやシミュレーションにとって大変役に立つ情報。
- ・高並列計算による計算モデル大型化
- ・実験と直接比較可能な物性量の出力（スペクトルなど）

2) 解析と計測データの比較手法

- ・各種スペクトル、パターン。また、特徴的ピークの圧力や温度による変化。
- ・解析品質の V&V 手法の構築
- ・データ同化手法の有効活用（限られたデータからシミュレーションと連携して実験値を予想）

4.5 材料界面設計における新機能、特性を産むための新しい取り組み、アプローチ

以上、議論してきた内容を俯瞰して、あるべき姿のイメージをまとめる。

4.5.1 従来と違うアプローチの在り方

- ・材料界面では複雑な現象が相互作用しており、多数の因子を考慮して新しい材料を設計するためには、新しいアプローチが必要と思われる。
- ・従来（演繹的アプローチ）：「メカニズム解明→解析→探索→実験」という形で研究開発が進められてきたが、バイオに分野のように、まず発見的なアイデアの知識にコンタクトすることから、後付でメカニズムを解明して材料を設計していくというアプローチも有効であると考えられる。特に、イノベーションを起こすようなアイデアは演繹的には起こりにくい。
- ・新しい発見的アプローチ：「探索→メカニズム推定→解析→実験」（図1）を考え、特にアイデアの元になる材料関連データベースのあり方、質を検討する必要がある。
- ・現実的には現象解明が大事であり、計算科学（演繹的）との両方の融合が最適だと思われる
- ・特に材料設計はバイオ分野に比べ、因子の数が多（図2）
- ・創薬設計における分子間ドッキングシミュレーションは界面設計にも有効と思われる。

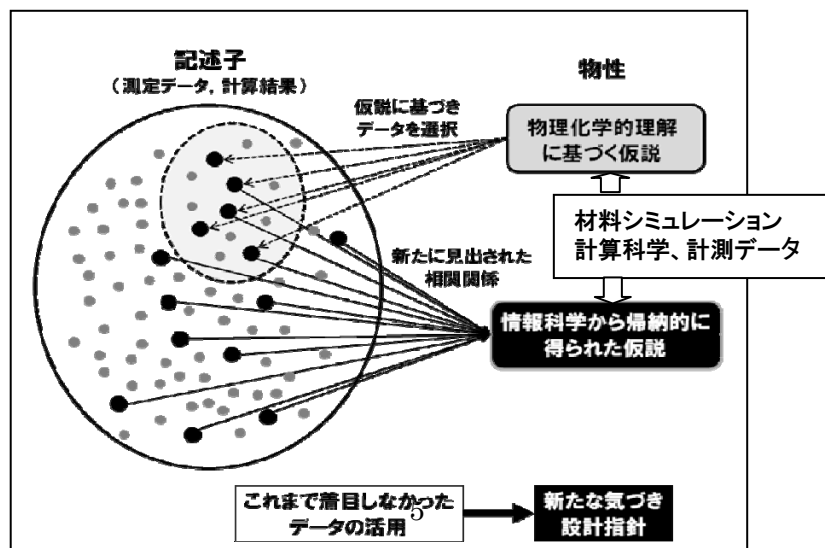


図1 材料設計における新しい考え

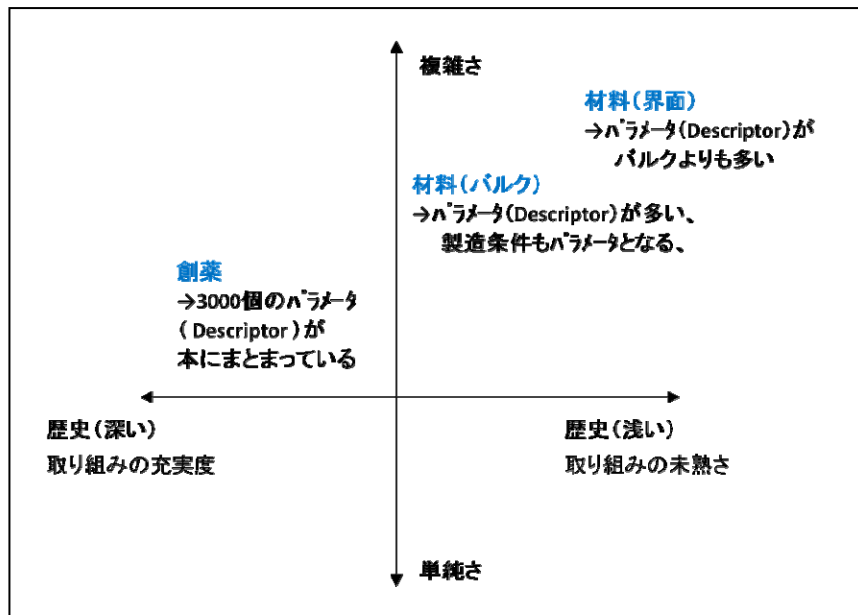


図2 界面材料設計と他分野の比較

4.5.2 データ基盤の整備と柔軟性

多様なデータ基盤の構築には課題が多い。

1) 材料データの収集・加工・管理・運用を継続的に取り行う仕組みの設置

精緻なマイクロ物理化学分析結果 DB、シミュレーション結果 DB のみならず、経験的な製品特性評価試験の DB（企業からは無理か）などもセットで揃え、更に基本的なデータ解析ツール（可視化等も含む）等も管理運用を行う、包括的なデータ管理運用センターの設立。

2) 界面物性と個別の材料物性を包括する網羅的データベースの構築

3) 産官学が連携してデータベースを構築、メンテナンスを継続できる仕組み作り

4) データ科学と材料科学分野の交流の促進

5) 製造との連携：アイデアを早く試行（製造と性能確認）できる、製造プロセスの仕組み（3Dプリンタ等の活用）

4.5.3 関連技術の研究開発

1) 異なる計測データと解析データの V&V プロセスを効率的に行えるデータ連携、情報照合ネットワークの仕組み

2) ミクロな物性からマクロな材料特性発現までをつなぐマルチスケール学の強化

3) データ同化手法（逆問題的）や第一原理計算や現象理論モデル（順問題的）の融合によるシミュレーション技術の高度化（バイオは理論・モデルが不足していたため、逆にインフォマテックスが発達した）と新材料特性予測技術

4) 新しい特性や物性などに気がつくためのマテリアルインフォマテックス可視化技術

5) 演繹的な手法と新しい探索的手法の融合及び、対応する将来の計算機技術、ソフトウェア

4.5.4 必要な研究開発とデータ基盤の整備（まとめ）

材料界面の新機能を産み出すための仕掛けとして、以下の点が考えられる。

- ・材料データの収集・加工・管理・運用を継続的に取り行う組織
- ・界面物性と個別の材料物性を包括する網羅的データベースの構築
- ・産官学が連携してデータベースを構築、メンテナンスを継続できる仕組み
- ・データ科学と材料科学分野の交流の促進
- ・アイデアを早く試行（製造と性能）できるクイック製造の仕組み（3D-Pr 等）
- ・計測データと解析データの Verification& Validation (V&V) プロセスを効率的に行える
データ連携、情報照合ネットワークの仕組み
- ・データ同化手法（逆問題的）や第一原理計算や現象理論モデル（順問題的）の融合による
シミュレーション技術の高度化と新材料特性予測技術
- ・新しい特性や物性などに気がつくためのマテリアルインフォマテックス 可視化技術
- ・演繹的な手法と新しい探索的手法の融合及び、対応する将来の計算機技術、ソフトウェア

今回、この中で特に、1) 界面におけるコアとなる要素技術、2) 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、維持管理のための仕組み作り、に関して重点的に検討した内容を以下、5章に示す。

5. 今後望まれる材料界面設計技術の構成要素テーマ

5.1 要素技術

シミュレーションを応用して材料を設計する理想的技術の構成要素を考えると、次のような要素技術の研究が必要となる。

A 材料物性の実験結果やシミュレーション結果のデータベース

- A-1 必要な記述子（説明変数）を漏れなく含んだデータベース形式
- A-2 既存のデータベースを最新のデータベース形式に変換する技術
- A-3 TEM データ等の画像データから特徴を記述子として抽出する技術
- A-4 界面に特有な記述子（格子ミスマッチ等）を扱う技術

B データベースを基に材料物性を記述子の多変数関数として表現する回帰分析技術

- B-1 多変数関数を可視化して支配的な記述子を気づかせる技術
- B-2 得られた多変数関数の信頼度を表示する仕組み
- B-3 得られた多変数関数の信頼度が低い場合の理由表示（データ不足、ばらつきの大きさ等）
- B-4 記述子空間のデータが不足している領域を表示する仕組み
- B-5 少ないデータでも効率良く多変数関数を得ることができる技術

C 多変数関数から記述子の満たすべき数値範囲を決定して表示する技術

D 記述子の満たすべき数値範囲から最適材料を表示する技術

- D-1 既存の材料から最適材料を選定して表示する技術
- D-2 これまでに無い最適な新材料を記述子で構成する技術（記述子から材料への変換技術）

E 記述子空間に実在材料が網羅されていない場合に仮想材料で補完するシミュレーション

上記の内容を組み込んだ仕組みを図にすると以下ようになる（図3）

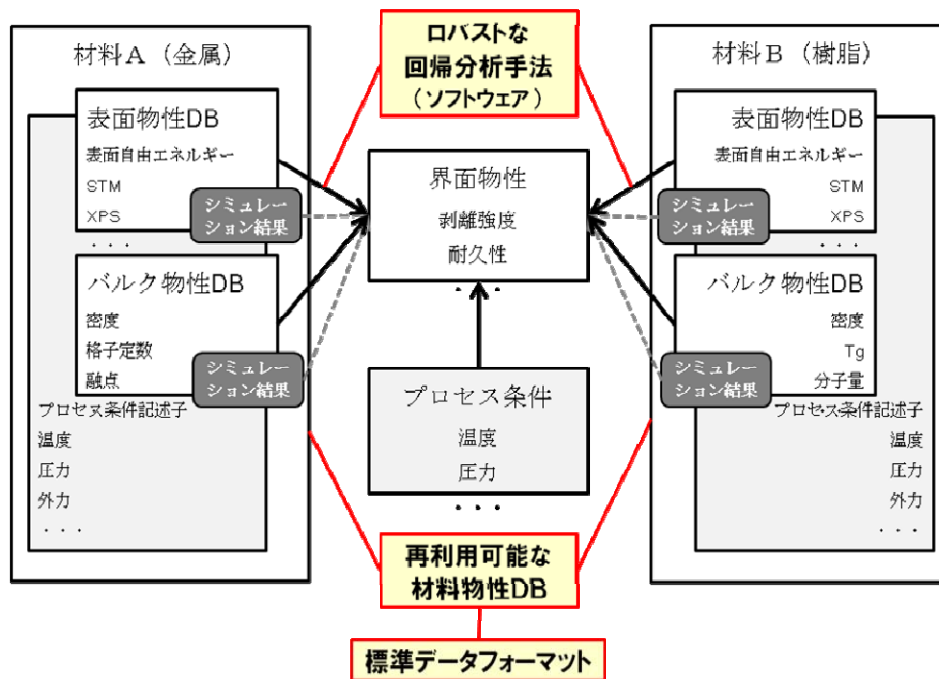


図3 材料界面設計技術の構成要素

5.2 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、維持管理のための仕組み作り

本研究会にて昨年提示した、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」を具現化するために、下記のような機能を有し、かつ、それら機能の連携の中心となる“戦略的拠点”が必要と考える。

- ①材料データの生成(計測)、収集(文献値)機能
- ②データベース構築・管理(データ共有)機能
- ③モデル化、シミュレーションソフト開発機能
- ④データ解析・二次加工ツール開発機能
- ⑤人材の確保・育成

但し、戦略的拠点の必要性は、既に数年前から指摘されており、例えば、国機関による調査報告にて、次のような現状課題認識^{[1][2]}が報告されている。

- ・現状、①～④の機能が、国内研究機関に散在し、かつその研究開発における成果は個別プロジェクト依存性が高いため、共用・連携やその継続性において非効率を生じている。
- ・その結果、①～④の機能向上のための研究開発や、整備運用に携わる人材の正当な評価やキャリアパスを築くことが困難で、⑤の人材確保・育成の障害となっている。

今回は、本研究会以前に提唱されてきた“プラットフォーム”、“戦略的拠点(司令塔)”構築などの取り組みについて分析し、本研究会についての提案について述べる。

5.2.1 連携システム構築のための「プラットフォーム」の役割

本研究会にて昨年に提示した「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」は、関係する基礎科学、応用・実用化のための要素技術、インフラ（ハード／ソフト、データベース、計測施設）、ステークホルダーが広範囲に渡る分野横断的なイノベーションシステムであり、また、基礎科学研究や要素技術開発にとどまらず、新たな材料界面設計手法を産み出すエンジンとして、我国の産業競争力低下という現実課題の解決が必達目標とされる。

上記のようなイノベーションシステム構築の手順としては、例えば、JST-CRDSにて提唱されている課題解決型の「システム構築型イノベーション」^[3]によれば、3つのフェーズから構成され、特にその中で、関連知識の結合を行うためにフェーズ1にて構築される「プラットフォーム」が重要な役割を演じる。ここでは前記5.2で示した①～⑤の機能が必要となる。

5.2.2 「知的基盤」としての「プラットフォーム」の現状課題とこれまでの対応策

上述のようなプラットフォームは、国家的な「知的基盤」^{[注]参照}たる資格を有すると考えられ、適切なファンディング、スキームによる継続的な国家予算投入が妥当と考える。しかしながら、例えば技術情報データベースに関して、H24の知的基盤整備特別委員会による知的基盤整備・利用促進プログラムに関する中間報告^[4]にて指摘されるように、未だ各種データベースが散在し利用し辛い状況となっている。このような状況を生む一因として、国、公的機関のみによる知的基盤の整備・提供が、予算上、実施困難な状況にあり、また、今後10年、予算・人員の増加が見込めないことなどを挙げている。したがって、この中間報告では、現在のリソースを最大限、有効活用できる以下のような新たな対応を求めている。

- ① 整備機関は、普遍的対応、重要課題、長期課題におけるリソースの最適化を図った上で、利用者を含む他機関との協力・連携を拡大し、知的基盤の整備・提供を行う。また、国は、知的基盤の整備機関と関係機関とのパートナーシップの構築の支援を行う。
- ② 整備機関は、限られたリソースを有効に活用するため、これまでの整備方法、ルール等を積極的に見直し、整備等業務の合理化、効率化等を図る。

5.2.3 本研究会における「プラットフォーム」構築の考え方

プラットフォームに関しては、最終的には適切なビジネスモデルを築き、国や公的機関からの資金に大きく依存しないで、維持・整備されることが望ましい。

したがって、司令塔たる“戦略的拠点”を置き、この拠点が、産業界での利用の便に耐えるよう、DBデータフォーマットの共通化、汎用化や、シミュレーションやデータ解析・加工ツールとDBとの連動などを実現する「高付加価値化された共通プラットフォーム」の開発、仕様決定を行い、これのユーザー利用環境を一元的に維持・整備・管理するものとする。また拠点内に、“ビジネスセクター”を置き、プラットフォームの利活用によるビジネスモデルについて検討を行い、ユーザーからの声をフィードバックし、プラットフォームの利便性をさらに高め、高付加価値化を推進することで、自立的運営のPDCAを回す。

6. 本研究会からの提言

6.1 今後産官学で推進すべきテーマ

シミュレーション技術や情報科学を新材料設計開発に活かしていくための 土台、環境としての産官学の役割分担の考え方を以下に示す。

■官学の役割：

- ・新材料発見の気づきとなる材料データの活用、情報科学活用分野を想定した研究開発の強化（次世代計算機、ソフトウェア研究含）、人材育成
- ・一見意味のないものも含めた網羅的データベースの構築、使い勝手向上、データ収集・加工・更新・管理・運用を継続できる仕組み作り

■産業界の役割：

- ・自社が持つ材料データの適切レベルでのオープンへのルール化
- ・材料設計への積極的な材料シミュレーション活用の気運創生
- ・新材料設計における多様な現場ニーズ、課題の情報公開

■産官学連携を活用した仕組み作り

- ・データ、情報科学と材料科学分野、数学、データサイエンス分野の交流の促進
- ・計測と解析データのV&Vプロセスを効率的に行えるIT活用仕組み作り
- ・新材料分野の市場創生の仕組み、活性化モデルの検討

6.2 研究・開発すべき要素技術

シミュレーションを応用して材料を設計する理想的技術の構成要素を考えると、次のような要素技術の研究が必要となる。

■材料物性の実験結果やシミュレーション結果のデータベース

■データベースを基に材料物性を記述子の多変数関数として表現する回帰分析技術

■多変数関数から記述子の満たすべき数値範囲を決定して表示する技術

■記述子の満たすべき数値範囲から最適材料を表示する技術

■記述子空間に実在材料が網羅されていない場合に仮想材料で補完するシミュレーション

6.3 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、プラットフォームのあり方

本研究会にて昨年提示した、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」を具現化するために、下記のような機能を有し、かつ、それら機能の連携の中心となる“戦略的拠点”の必要性を提言する。

- ①材料データの生成(計測)、収集(文献値)機能
- ②データベース構築・管理(データ共有)機能
- ③モデル化、シミュレーションソフト開発機能
- ④データ解析・二次加工ツール開発機能
- ⑤人材の確保・育成

本研究会にて提案する戦略的拠点は、上記機能連携の中心となるべく、次に示すような事業を行うものとする。

■「高付加価値化された共通プラットフォーム」の開発、仕様決定を行う。

■国内研究機関における、上記機能連携を実現する環境を一元的に維持・整備・管理する。

■上記のような高付加価値共通プラットフォーム開発や環境の一元管理は、

1) 材料データや関連するシミュレーションツール群における**デファクトスタンダード化**、例えば、DB共通フォーマット化（投稿論文等も含む）、データの精度を担保するために、複数の研究機関からの同じ対象物のデータを比較検証する仕組み、など。

2) それによる材料データインフォマティクス分野でのコンサルティングやツール開発などを主要業務とする企業や個人などからなる、**新しいビジネスエコシステムの形成**^{※1}、の促進により、運営を国資金にのみ頼ることなく、自立し得るビジネスモデルを獲得する最初のステップとなる。

■確固たる自立への道筋のかじ取りを行うべく、ビジネスモデルを検証、発展させ自立的運営を確立し得るPDCAを回すために、戦略的拠点内には、研究開発部門と密接に連携する“**ビジネスセクタ**”を置く。

■データの記述や活用を想定して、今後、数学研究者も入れた技術交流の促進、データエンジニアリング、サイエンス研究の評価、価値の向上の仕組みが必要。

※1：データベースプロバイダなどによる、材料データインフォマティクス分野でのコンサルティングやツール開発を主要業務とする企業や個人の形成

【目 次】

1. 本プロジェクトの基本的な考え方
2. 検討の視点と範囲、対象分野
3. 昨年の研究会が提言した内容の概要
4. 本年度の検討内容
 - 4.1 対象分野の選定
 - 4.2 材料界面設計における現状の共通課題
 - 4.3 材料界面設計における情報科学を活用した材料設計の考え方
 - 4.4 材料界面設計における計測データとシミュレーションの連携
 - 4.5 材料界面設計における新機能、特性を産むための新しい取り組み、アプローチ
5. 今後望まれる材料界面設計技術の構成要素テーマ
6. 本研究会からの提言

【はじめに】

世界経済のグローバル化が進み、海外企業も含めた企業間の競争が急激に高まっている中で、今後とも産業競争力を維持していくためには、技術イノベーションによるものづくり生産性向上を図ることが不可欠である。このグローバル化の動きの中で、ものづくりの変革も少しずつ起こりつつあるが、その中で、従来の試行錯誤的なもの作りから、高精度なシミュレーション技術による効率的かつ高信頼に新しい材料や製品システムの開発が期待されている。さらに、最近世界一になった「京」コンピュータ開発や、各種スーパーコンピューティングの進化により、計算科学シミュレーション技術の大規模化、高度化も進展しつつある。

しかしながら、その半面、産業界で分野に違いはあるが、大規模、高度解析活用ができる企業は現実にはまだ少なく、解析環境やノウハウ蓄積には課題が多く、実際のものづくりにおいて、必ずしも計算科学が産業界に十分普及しているとは言えず、また、普及はしている場合でも、実際のものづくりとの連携が十分とは言えない状況と思われる。

すなわち、シミュレーションをうまく活用する知識・知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)、施策がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成と共に新たな視点として、理解のための解析技術から、活用するための解析知識への進展が必要である。

このような中で、産業競争力懇談会では、計算科学が広く産業界のものづくり現場に普及していくための施策として、広い意味での解析品質向上の手段、人材育成の仕組み、解析モデリング&シミュレーションの解析情報データベースの有効活用やデータベースとのインタラクションの方法論、産業界がアクセス、試行できる解析情報共有のありかた等の検討を行い、具体的なものづくり連携のあり方を模索して提言に繋げる活動を行っている。本報告が、産官学の垣根を越えた、より活発な議論の一助となることを願うものである。

産業競争力懇談会
会長（代表幹事）
西田 厚聡

【研究会メンバ(順不同)】

□リーダー：佐々木直哉(日立) 事務局：三好一義(日立)

□構成メンバ

・COCN 会員(16名)

澤田有弘(産総研)

関口智嗣(産総研)

手塚 明(産総研)

茂本 勇(東レ)

相賀史彦(東芝)

景山正人(新日鐵住金)

澤田英明(新日鐵住金)

小野寺拓(日立製作所)

浅井美博(産総研)

石田豊和(産総研)

小山田耕二(京都大学)

中村佳正(京都大学)

信時英治(三菱電機)

松崎洋市(新日鐵住金)

岩崎富生(日立製作所)

富永哲雄(JSR)

・オブザーバ

島津博基(JST CRDS)

・COCN 実行委員

清水一治(東レ)

・COCN 事務局長代理

金枝上 敦史(三菱電機)

【本 文】

1. 本研究会の基本的考え方

現在、計算科学シミュレーション技術(以下シミュレーション、解析、CAE技術)は産業界のものづくりの実際の現場に普及しており、その技術は大規模化、高度化しつつある。しかし、大規模・高度シミュレーション技術を駆使できる企業はまだ少なく、また、産業分野や企業規模によって大きな差が存在している。さらに、シミュレーション環境の構築や解析技術ノウハウ蓄積にも課題が多く、シミュレーションの信頼性や結果解釈等、実際のものづくりとの連携が十分にできているとは言えない。

特に、シミュレーションや解析情報データと思考(設計)をうまく繋げたものづくりへの活用、すなわち、シミュレーションをうまく活用するための「知識、知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)」がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成が重要だが、それと共に新たな視点として、シミュレーション技術の研究と方法論の進展が必要である。

今年度は昨年度に引き続き、材料シミュレーション分野に関して、以下の主旨で検討した。

■テーマ化の目的：

新しい材料の設計開発において、大規模高精度計測(Spring8等)やスパコン解析等から得られる新しい物性や現象知見のデータベースとマルチスケール材料シミュレーションを情報科学により連携させる新材料設計手法のあり方や材料設計者と解析手法の連携、実現のための産学連携の仕組みを探索し、新材料設計を活性化するための材料産業化における競争力強化の仕組みを構築する

■テーマ設定の背景：

産業界における材料シミュレーション活用の現状を把握し、将来のあるべき姿を検討するために、企業アンケートやヒアリング、材料分野における先端シミュレーション技術の調査、分析等を行い、新材料設計における材料シミュレーション技術活用の課題を明確にしてきた。

その結果、あるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料シミュレーションの高精度化と大規模化、および材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。

2. 検討の視点と範囲、対象分野

具体的な材料課題に対して、材料の製造プロセスから設計までを一貫して俯瞰し、特に以下の視点を重点的に検討した。

- 1) 材料設計と情報科学の連携(「マテリアルインフォマティクス」)への取り組みの重要性は、アカデミアや国の独立行政機関等においても強調され始めている。また、米国ではすでに「Materials Genome」というプロジェクトがあり、現在、日本が強いと言われる材料分野においても情報科学的アプローチを考慮した新たな考え方が必要と思われる。
- 2) 本研究会では、昨年アイデアを具体化するため、特に対象として、産業界からの立場としてより実用に即した、新材料の特性を左右する材料界面(構造材料粒界や金属-樹脂界面等)に着目。構造材料、複合材料等を想定した場合の性能、信頼性における共通課題として情報

科学と計算科学の連携の仕組みの可能性を検討する。

3. 昨年の研究会が提言した内容の概要

産業界における材料シミュレーションの現状を把握し、将来のあるべき姿を検討するために、企業アンケートやヒアリング、材料分野における先端シミュレーション技術の調査、分析等を行い、材料シミュレーション技術活用の課題を明確にした。その結果、あるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料シミュレーション技術の高度化によるシミュレーションの高精度化と大規模化、および材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。その一例として「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」構想を提言した。以下にその要旨を示す（図1）。

(1) システムの視点からみた材料機能要件の設計

材料に新たに求められる新機能を、材料が組み込まれるシステムやサブシステムからのニーズに対応して仕様（効果が高い）を探索する、いわゆる逆問題的設計の考え方の導入

(2) 情報科学と材料計算科学の融合（マテリアルインフォマテックス）

材料シミュレーションから算出される材料情報、材料データベース等の保有する膨大な材料情報に情報科学手法を適用することで、目標の材料構造や物性を効率的に探索できる新しいハイスループット材料設計手法の導入

(3) 新機能材料のアイデア創出のための材料物性・構造データの構築

新機能を創生する原理を作り出すための気づきを与える、材料・物性情報構築。

- ・ 1次情報（ミクロスケールの物性、構造、原子の組み合わせ等）の現象原理データ
- ・ 材料スケール間の階層相互作用における新規な特性や現象発現モデル
- ・ マクロ構造とミクロ構造の相関、計測データ等。

(4) 解析精度の向上（近似精度の向上、現実に近い忠実なモデルの構築）

- ・ 大規模計算機の利用：高度な近似理論の適用による精度向上、計算モデル大規模化、官学が有するソフトや技術を、産業における課題に適用するための産官学連携が必要
- ・ マルチスケール材料モデル：ミクロなシミュレーションに及ぼす実在の外力や環境等の境界条件（動的）を与えるためのミクロマクロ材料連携シミュレーション
- ・ 原子分子スケールの大規模モデルや、マルチスケール・マルチフィジクス材料モデルを構築するための、モデリング・可視化環境の整備

(5) 機能要件から製造プロセスまでの一貫したトータルシミュレーション

機能要件→材料設計→分子・素材設計→製造プロセス設計、という一連の流れに対応した情報とシミュレーション連携、プロセス全体統合解析シミュレーション

(6) 解析品質ルールの構築

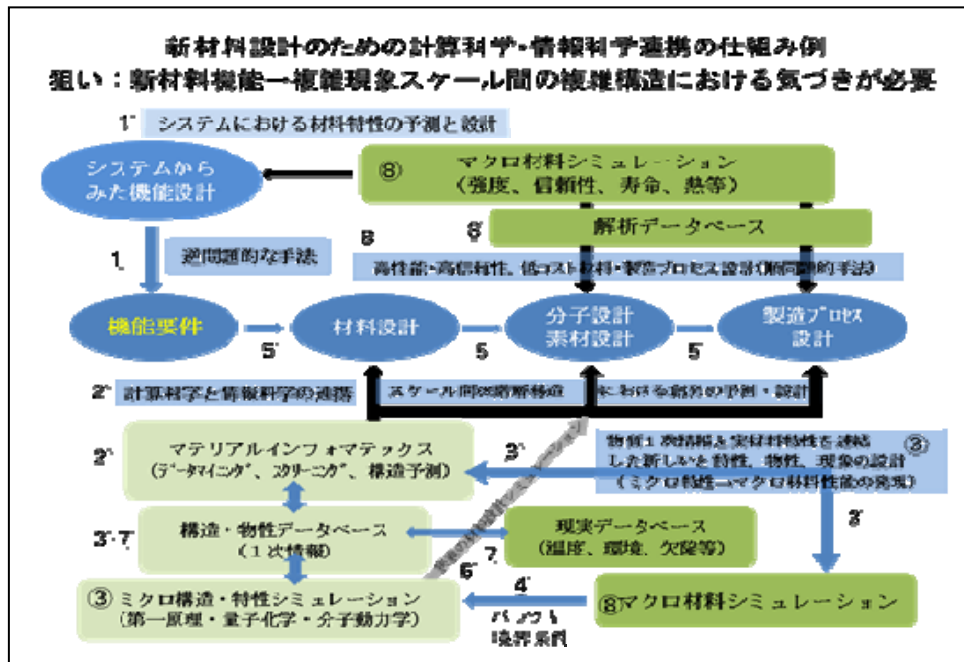
材料シミュレーションと計測データを常に比較、検証する仕組みの構築

(7) 材料実験データベース、計測データベース

常に新しい材料情報が蓄積され、活用時に変換容易、公開可能なプラットフォーム

(8) グローバルな材料開発に勝つためのマクロ材料シミュレーション

- 低コスト、ばらつき、軽量化等最適信頼性設計を実現するマクロシミュレーション
 (9) 上記項目を連携させるための省庁連携による、情報共有の仕組み、体制づくり



【図1】

4. 本年度の検討内容

昨年度提案した大規模高精度計測やスパコン解析等から得られたデータベースと材料シミュレーションを情報科学により連携させる新材料設計手法のあり方、実現のための産学連携の仕組みを探索するために、今年度は具体的な課題に対して検討する。

4.1 対象分野の選定

材料設計と情報科学の連携(『マテリアルインフォマティクス』)への取り組みの重要性は、アカデミアや国の独立行政機関等においても強調され始めている。本研究会では、産業界からの立場として、より実用に即した、特に対象として、新材料の特性を左右する材料界面(構造材料粒界や金属-樹脂界面等)に着目。構造材料、複合材料等を想定した場合の性能、信頼性における共通課題として情報科学と計算科学の連携の仕組みの可能性を検討する。

背景としては、現在我が国では、自動車、列車、飛行機等の輸送システムにおいて高度な技術/製品開発が進んでいるが、これら輸送システムの更なる高効率化、省エネ化を進めるにあたっては、構造材料の高機能化を進める事が有効であり、中でも構造材料の軽量化は重要な検討課題である。そしてこの目的の為に、新規な複合材料の導入が必須であるが、新規材料の信頼性、高機能性の確保にあたっては、異種材料間の接合部位の界面制御が重要なキーワードである。しかし現在においても、異種材料間の界面接合の制御、強度確保等の基本的な課題に関しては、未だ多くの研究課題が残されており、基礎的な研究から実用材料の開発に渡って、今後の更なる取り組みが求められる状況にある。

4.2 材料界面設計における現状の課題

現状の材料界面設計における多様な問題点について分析を実施した。

共通課題：

- 1) 接着強度や剥離強度といった界面物性を支配する科学的要因は必ずしも明らかではなく、経験と試行錯誤に基づいた界面設計に頼らざるを得ない。
- 2) しかし、実験的な界面構造解析は非常に難易度が高く、組成分布や原子・分子スケールでの詳細構造を得るには至っていない。
- 3) そのため、例えば分子シミュレーションによる界面構造・物性解析を試みるとしても、妥当な初期構造や計算結果の検証ができない。
- 4) また、界面の複雑さをシミュレーションに取り込むには、バルク系のシミュレーションよりはるかに大きなモデルを用意する必要がある。
- 5) 界面の原子構造を実験的に観測することが困難な場合が多く、シミュレーションを実施するには界面構造を実験によらず仮定する必要がある。
- 6) 異種界面ゆえ相互作用が小さく、一般的には接合が困難
- 7) オンタイムでの界面現象（化学反応、物質拡散）の可視化が困難
- 8) 計測可能なマクロ物性（機械的強度、接合力など）と界面現象との繋がりが明確でない場合が多い
- 9) 例えば接着に対して、界面の化学的性質だけでなくメソスケールの表面粗さが寄与する場合が多い。原子・分子のミクロスケール解析だけでは解決できない課題。

構造材料界面（金属系）：

- 1) (鉄鋼のような古くからある材料においては)顧客に示される製品特性評価試験に関しては、まだ経験的なものも多く、試験の結果得られた量と、精緻でミクロなシミュレーション結果や物理化学分析結果から得られた物理量と直接的に関連付けられていない場合もある。従って、今後、情報科学と計算科学の連携を考える際、ものづくりの流れに沿って、経験的な製品特性評価試験のDBと精緻なミクロ物理化学分析結果のDB、更に物理モデル中の物理量との対応関係をバランスよく明らかにすることが必要。
- 2) 鉄鋼材料は複数の相から成っており、それぞれが各々の役割を果たしている。それらの相の間には界面があり、界面が果たす役割も非常に重要である。相変態や破壊の起点になるのは、こういった相の境界であり、界面性状、組成やそれに基づくエネルギーなどは、組織制御に非常に重要な因子である。しかし、界面性状、組成や界面エネルギーなどは実験的にも理論的にも調べるのが容易ではなく、課題となっている。
- 3) 界面の強度や機能には、化学結合からマクロ性状までマルチスケールの要因が関与し、物理化学分析やシミュレーションを困難にしている。
- 4) さらに加えて、製造時や製品の使用時における環境因子の多様性（乾燥、湿潤、温度、pHなど）も、困難さの一因である。→グローバル展開への困難さ（克服できれば強み）。
- 5) 設計したとしても、その通りの界面を作ることが困難

- 6) 物理化学分析による界面の原子レベル構造情報の不足
- 7) 複雑な界面形状 (3D) の迅速測定技術とその特徴数値化や指標抽出技術 (連結性、入り組み
度合いなど)

複合材料における樹脂-無機物 (金属含む) 界面 :

- 1) 樹脂の力学特性を向上させるため、母材 (マトリックス) となる樹脂に充填材もしくは強化材 (フィラー) を複合する手法が広く用いられている。代表的な複合材料の例として、航空機の 1 次構造材として用いられる炭素繊維複合材料や、タイヤに用いられるカーボンブラック添加ゴムが挙げられる。複合材料の物性・機能は、主としてマトリックスやフィラーに依存するが、狙い通りの物性を得るためには、界面の設計も重要である。例えば、界面の接着性が良くなければ、マトリックスからフィラー (強化材) への応力伝達がなされず、強化材による補強効果は期待できない。
- 2) 複合材料における界面設計の重要性は広く認識されており、マトリックスとフィラーとの濡れ性を改良する様々な技術が開発されてきた。極性の低いポリオレフィン樹脂に対する極性基の導入や、フィラーに対する種々の表面処理 (酸化・還元処理、プラズマ処理、カップリング材導入など) はその一例であり、いずれも界面強化に有効であることが経験的に知られている。しかし、これらの界面強化技術の作用メカニズムは、十分定量的に解明されたとは言えない状況である。
- 3) 界面設計の難しさは、分析・解析が困難であることに因る。そもそも、界面を単独で取り出すことはできないため、物理化学測定が極めて難しい。
- 4) また、界面近傍のマイクロ～メソ構造はバルク状態のマトリックスとは異なり、特定の官能基や添加剤が界面近傍に濃縮されていることが多い。従って、界面は「面」と考えるべきではなく、厚みと容積を持った界面「相」と捉えることが提唱されており、マルチスケールのアプローチが必要とされる。例えば、複合材料の破壊は、最も弱い界面で起こる。従って、界面相全体を見て弱い箇所を突き止めるとともに、その弱い箇所のマイクロ構造を解明するという両面のアプローチが必要である。
- 5) 界面構造や物性については、分子シミュレーションによるアプローチが試みられており、分子鎖の形態や添加剤の挙動など、界面測定結果を支持する計算結果も得られつつある。しかし、原子スケールのシミュレーションを実行するに当たって、モデルの検証ができる精度の構造情報はほとんど存在しない。
- 6) 金属の種類や表面状態 (酸化、純金属、不純物、吸着物) によって樹脂の密着性が異なる。ケースバイケースで接着剤を変える、表面を荒らす、めっきするなど一手間必要な現状。
- 7) 表面が活性であるが故、金属の触媒作用によって樹脂の劣化が起こることがある。

上記課題から見られる、材料界面設計を支配する重要因子を以下に検討した。

4.2.1 材料界面設計に影響を及ぼす因子

- ・ 界面の組成、表面形状 (界面形状)、粗さ、膜物性、

- ・ 2つの材料の各種特性
- ・ 界面への外力、環境条件（乾燥、湿潤、真空、温度、pHなど）
- ・ 界面の化学結合状態（共有結合、水素結合、分子間力結合）
- ・ 2つの材料の面方位（格子整合）、界面の原子構造、接合に伴う内部応力や欠陥の発生
- ・ 界面近傍の物質移動特性（濃化、吸着など、有害になったり新機能発現したり）
- ・ 表面物性（表面自由エネルギー、表面電位 など）
- ・ 表面処理条件（コーティング、酸化・還元処理、プラズマ処理 など）

4.2.2 材料界面の特性

- ・ 接着強度、剥離強度（垂直、剪断）、弾塑性変形特性、熱的安定性、
- ・ 化学的性質（触媒活性、腐食性など）
- ・ 熱伝導性、電気伝導性
- ・ 歪
- ・ 他元素の偏析特性
- ・ 破壊強度、靱性
- ・ 光学的特性（透過率、反射率、吸収率など *あまり接着には関係なさそうですが）

4.2.3 材料界面の加工、製造プロセス因子

- ・ 温度、湿度、圧力（雰囲気）
- ・ 成膜プロセス方式
- ・ 溶接方式
- ・ 製造過程における、加熱冷却速度、保定時間や与歪（変態や析出を左右する）
- ・ 前処理方式
- ・ めっき
- ・ 研磨加工

4.2.3 界面特性と各因子の関係モデル

- ・ 多入力と多出力
- ・ ばらつき
- ・ 用途と要求特性

以下の4.3章、4.4章では、それぞれ情報科学活用と計測データ活用の2つの視点で検討する。

4.3 材料界面設計における情報科学を活用した材料設計の考え方(提言3章の(1)(2)(3)(4))

情報科学と材料シミュレーションのあるべき連携の議論において、アナロジーとして活用、融合ができる他分野手法（創薬、Big データ、最適化手法、半導体製造分野他）のサーベイに基づき、新たな研究分野の追加や技術の創出等、現状のモノづくりにおける実用化の課題を抽

出した.

4.3.1 新材料設計において情報科学の活用に期待する点

解決すべき課題：

- ・ 具体的な例（粒界構造制御、金属-樹脂界面設計など）
- ・ 複合材料設計における界面強度支配因子の解明
- ・ 界面設計において着目すべき物性・指標の解明

材料界面設計に情報科学を活用することの上記課題の解決、メリット、期待される点を以下にまとめた.

- 1) 他材料（違う分野）の組み合わせデータが新しい材料設計のヒントになる（類似性）
- 2) 網羅的な検討が可能になる
- 3) 情報科学活用による開発の加速、物理・化学モデル構築の加速
- 4) 従来見過ごされていた重要因子の発見
- 5) 個々の材料の物性と界面物性との関係を網羅的に調べることにより、これまで気付かなかった界面物性支配因子が明らかになり、新たな設計指針が得られる
- 6) 界面シミュレーションのボトルネックである計算時間や計算アルゴリズムの効率化
- 7) ナノ～ミクロスケールでの分子挙動を理解した上でのプロセスの最適化
- 8) 3-D SEM や TEM 画像を用いた界面の可視化（立体化）
- 9) メソスケールの表面粗さやテクスチャ加工など表面フラクタルと界面特性（せん断、接着、親水、疎水）の関係を統計的理解.

4.3.2 情報科学的手法の世界レベルベンチマーク

・ マテリアルインフォマテックス

- 1) ハイスループット計算材料設計に関するレビュー

High-throughput computational materials design is an emerging area of materials science. By combining advanced thermodynamic and electronic-structure methods with intelligent data mining and database construction, and exploiting the power of current supercomputer architectures, scientists generate, manage and analyse enormous data repositories for the discovery of novel materials. In this Review we provide a current snapshot of this rapidly evolving field, and highlight the challenges and opportunities that lie ahead "The high-throughput highway to computational materials design" Nature Materials 12, 191 (2013). <http://www.nature.com/nmat/journal/v12/n3/abs/nmat3568.html>

- 2) 2元合金の融点をデータマイニングにより予測.

"Data mining for materials: Computational experiments with AB compounds" Phys. Rev. B 85, 104104 (2012). <http://prb.aps.org/abstract/PRB/v85/i10/e104104>

3) 米国のマテリアル・ゲノム・イニシアチブ：

- ・米国のマテリアル・ゲノム・イニシアチブは、以下のような内容を含んでおり、最も進んだ取り組みをしていると考えられる。
- しかし、実際は、第一原理計算によってデータベースを作成する点に偏重している上に、材料において最も重要な界面についての検討は充実していないと思われる
- ・ 化学空間の探査手法
- ・ 高速な第一原理計算等の計算によるデータの生成とスクリーニング
- ・ 実験によるデータの生成とキャラクタリゼーション
- ・ トポロジカルな記述子、化学的な記述子の同定、開発、ハンドリング、解釈
- ・ 既に存在するデータベースと新しいデータのインターフェース
- ・ 高速計算向けに最適化された数値の取り扱い手法
- ・ 高速解析、組織解析、最適化、分類のためのグラフ理論、群論、組合せ論
- ・ データマイニングと機械学習の方法論

4) QSPR

・ 薬物の構造と活性との間に何等かの因果関係を数値として求める方法として、定量的構造活性相関 (QSAR, Quantitative Structure-Activity Relationship) 法がある。

QSAR 法を用いることで、より高い活性を有する構造を予測でき、また薬物受容体の解析にも応用される。QSAR 法で解析するメリットは、例えばマトリックス表を埋める繰り返し実験を実施せずに有効化合物にあたりを見つけ、物理化学的性状や人体への有害性に関するデータを取得できることにある。

これに対し、一般的化学構造と物理的性質との因果関係を明らかにする手法として、定量的構造物性相関 (QSPR, Quantitative Structure-Property Relationship) 法がある。QSPR 法は創薬に限定せず、あらゆる材料の表面物性、バルク物性、力学物性、光学物性など幅広い構造相関予測を可能とする手法である。解析に用いる記述子には、上記に加え、対象とする材料物性に関連するパラメータを追加する必要がある。

以下、いくつかの最先端例を示す。

例えば、文献：

●H. Onuma, I. Yamashita, K. Serizawa, H. Tanno, A. Suzuki, H. Tsuboi, N. Hatakeyama, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, H. Kajiyama, and A. Miyamoto, Quantum Chemistry and QSPR Study on Relationship between Crystal Structure and Emission Wavelength of Eu²⁺-Doped Phosphors, Journal of the Society for Information Display, 18 (2010) 301-309. では、無機蛍光体の母材結晶構造・組成を変えることで、発光ピーク波長（発色）を予測している。このとき、発光中心周辺の原子構造を数値表現し、記述子として与えることで、結晶構造と発光特性との間に高い相関性を見出している。発光元素や母材の種類のみならず、発光中心周辺の母材構造制御の重要性が提言されている。

吸着や接着、摩擦といった表面・界面特性に対する QSPR 法の適用例はまだまだ少ないが、いく

つかの適用例を見つけ出すことができる

●M. Fernandez et al.、 Large-Scale Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) Analysis of Methane Storage in Metal-Organic Frameworks、 J. Phys. Chem. C、 117 (2013) 7681-7689.

では、中心金属・有機分子・官能基の組合せで 10 万通り以上の金属有機構造体 (Metal-Organic frameworks、MOFs) を作成し、メタンガス吸着をモンテカルロ計算している。孔径・空隙率・表面積などシンプルな構造パラメータを記述子とし、メタン吸着量との相関を重回帰分析し、吸着材構造をスクリーニングしている。簡単かつ少ない記述子で吸着特性予測しており、QSPR をうまく材料設計に応用した好例である。

●Xinlei Gao et al.、 The Application of Quantitative Structure Tribo-ability Relationship Model、 World Tribology Congress 2013、 Presentation# 208、 Turin、 Italy、 September 8 - 13、 2013.

●H. Koshima et al.、 Analysis of the Adsorption Structure of Friction Modifiers by Means of Quantitative Structure-Property Relationship Method and Sum Frequency Generation Spectroscopy、 Tribology Online 5、 (2010) 165.

では、QSPR 法を用いて潤滑剤の構造と摩擦・摩耗特性との相関を予測している。記述子は、分子投影面積の他、分子軌道法から得られる HOMO、LUMO や分極率など化学的パラメータであるが、荷重や速度など力学的実験的データも取り込んでいる。両文献とも、既知の材料を整理し、最も摩擦特性に効果のある記述子を絞っているが、最適な材料設計には至っていない。しかし、2 つ目の文献では、計測技術と連携した新しい試みとして、高度な界面光学分析から表面分子の被覆率や配向角なども考慮している。

以上、QSPR により材料の最適化や設計を行うためには、機能発現に効果的な記述子を見つけること、すなわち可視化が重要である。そのため、記述子データベースの拡充が求められるが、界面分野においては、創薬で用いられるような数千あるいは数万にも及ぶ膨大なデータベースは存在しない現状である。今後、材料最適化に重要なエッセンスを QSPR 法から直接見出すためには、高度な計測技術との連携で表面・界面特性に直接的に関与すると思われるパラメータを新たに記述子として加え、機能発現に重要な因子を見落とすことなく発見可能とすることが望まれる。

・ バイオ・創薬関係 (QSAR、QSPR、ドッキングシミュレーション)

1) 構造関連の手法の活用 (by ウキペディア) :

定量的構造活性相関(ていりょうてきこうぞうかつせいそうかん)は化学物質の構造と生物学的(薬学的あるいは毒性学的)な活性との間になりつつ量的関係のこと。これにより構造的に類似した化合物の「薬効」について予測することを目的とする。**QSAR**(=Quantitative Structure-Activity(または Affinity) Relationship の略)と呼ばれることもある。QSAR を英語では「クエイサー」、日本語では「キューサー」と発音することが多い。

それに対し化学構造と物理的性質との関係を定量的構造物性相関 (QSPR, Quantitative Structure-Property Relationship) という。両者は密接な関係があり方法論的にも共通する部分が多い。コーウィン・ハンシュによって研究が始められ、1964年にハンシュと藤田稔夫が発表した方法 (ハンシュ-藤田法) が代表的な方法として知られる。

方法としては、化合物の疎水性、対象とする化合物の構造を表現する数量 (幾何学的構造を表す記述子、HOMO や LUMO (フロンティア軌道理論参照) のエネルギー、あるいはハメットの置換基定数、電気陰性度といった電子的記述子など) を抽出し、構造的に類似する一連の物質に関してこれら数量と活性との関係を統計学的に (回帰分析などを用い) 検討する。

なお、記述子としては化合物に関するパラメータを使用しているが、基本的には薬物標的分子と化合物との相互作用を前提とした手法であり、実際に定量的構造活性相関研究の結果から薬物標的-化合物間の相互作用様式を推定するといった使用法もしばしば見られる。

研究例：量子化学計算と構造物性相関とによる蛍光体の結晶構造と励起・発光特性との因果関係の解明

・材料に応用する場合、上記の「類似性」をどういう基準、定義にするか課題。

2) 材料界面設計とたんぱく質とリガンド化合物の最適設計は類似点を見出しうる。

LBDD (ligand-based drug design) の考え方；既知の薬剤分子と似た分子は薬効を持ちうる
→類似性を数値化できれば、これまで気付かなかった組み合わせを発見できる可能性あり

3) バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスの融合

「バイオインフォマティクスとケモインフォマティクスの融合によるインシリコ創薬研究」
YAKUGAKU ZASSHI 128、1645 (2008)。

4) Deep Learning (深層学習)

分子の活性予測コンテスト*で、Deep Learning による予測が優勝。

Merck Competition Results - Deep NN and GPUs come out to play. Posted on October 31 2012 by Joyce Noah-Vanhoucke

(<http://blog.kaggle.com/2012/10/31/merck-competition-results-deep-nn-and-gpus-come-out-to-play>)

* Help develop safe and effective medicines by predicting molecular activity.
(<https://www.kaggle.com/c/MerckActivity>)

・標的タンパクとの結合自由エネルギーという絶対的な指標があるのに対して、材料は用途によって要求特性がバラバラなので、一筋縄ではいかない印象。

5) JST (CRDS) 「課題解決型の新物質・材料研究」ワークショップ

【データを活用した機能に基づく新物質・材料の設計

(マテリアルインフォマティクス)】分科会

(<http://www.mech.kagoshima-u.ac.jp/~adachi/MI-WS.doc>)

- 6) タンパク質の構造解析、機能理解の手法として SAXS 実験と MD シミュレーションを組み合わせた MD-SAXS 法の開発が進められている (日本結晶学会誌、55、24-31 (2013)).

溶液中でのタンパク質の構造ゆらぎを解析することで、タンパク質の機能を理解することができるとのこと。この手法は、バイオ分野において計測データとシミュレーションをうまく連携している例と言えると思います。

- 7) 最適化手法：応答曲面法

手法の文献調査 (逆方向シミュレーションによるパラメータ最適化)

https://www.jstage.jst.go.jp/article/tjsst/2/1/2_1_23/_pdf

- 8) 創薬・品質工学利用の QSPR を吸着材デザインに適用

金属有機構造体 (Metal-Organic frameworks、MOFs) へのメタンガス吸着を GCMC シミュレーション。中心金属・有機分子・官能基の組合せから 137、953 個の MOFs 構造を作成し、QSPR (w/ 重回帰分析・決定木・サポートベクタマシン) で構造と吸着の相関をスクリーニング。説明変数は孔径・空隙率・表面積など。孔径などの構造情報からガス吸着量の予測値を計算できるサイトを web 公開 <http://titan.chem.uottawa.ca/woolab/MOFIA/>

M. Fernandez、T. K. Woo、*“Large-Scale Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) Analysis of Methane Storage in Metal-Organic Frameworks”*、*J. Phys. Chem. C*、117 (2013) 7681-7689.

- 9) 直交表 (タグチメソッド) と分子シミュレーションの融合

(材料学会誌「材料」60 巻、第 9 号、856 頁、2011 年) →樹脂と金属の格子マッチングが密着強度を向上させる、という単純な設計指針が得られた。(単純な指針という意味でカギ・カギ穴と似ている)

最適化手法 (応答曲面法) と分子シミュレーションの融合 (日本計算工学会 Transaction of JSCEs、PaperNo. 20120009) →異種金属間の格子マッチングが界面強度を向上させる、という単純な設計指針が得られた。(単純な指針という意味でカギ・カギ穴と似ている)

- ・半導体製造分野の材料シミュレーション

最近、次世代の半導体製造プロセス材料として注目されているブロックコポリマーとシリコン基板との界面設計には、主にシミュレーションが用いられている。基板とコポリマーとの界面には欠陥構造が生じ安いが見え難い問題がある。すでに、シミュレーションによる欠陥構造の解析、製造プロセスの最適化、電子回路デザインの最適化等が実施され始めている

- ・パターン認識、文字認識、画像処理

- (1) 界面測定データ (特に画像) から情報を引き出す
- (2) 機械学習による良い界面/悪い界面の定量化

4.3.3 情報科学の活用における実用上の工夫すべき点

- 1) ベンチマークから得られる、情報科学活用のメリットと課題
 - ・ バイオの考え方の例→ケモインフォの「記述子」の考えかたの導入
 - ・ 演繹的思考から一旦離れて、入手可能な全てのデータを記述子として入力
 - ・ 主要な寄与因子を知る一方で、本来考慮すべき因子の見落としが発生 (QSPR 等)
 - ・ 金属組織や析出相など熟練者が画像から判断する情報の取り扱い
- 2) 製造プロセス情報も考慮した (拘束条件) 材料設計の考え方
 - ・ 現時の材料界面設計では、設計に大きく影響する製造プロセス因子も考慮した設計の考え方が大事である
 - ・ 製造プロセスはノウハウ中心であり、メカニズム解明が難しく、情報科学的手法が有効
- 3) 多様な情報を含め一見意味のないものも含めたデータベースの構築 (新しい発見に必要)
 - ・ ケモインフォでは「合成」因子までパラメータ化
 - ・ 温度、湿度、圧力⇒粘度特性 (樹脂)、析出・結晶粒径 (金属)、酸化、劣化
 - ・ ライン速度、プロセス時間 (特に熱硬化樹脂の場合)
 - ・ 樹脂フィラーの各種性質や相乗効果 ⇒適材・組合せ・添加量の探索

4.4 材料界面設計における計測データとシミュレーションの連携の考え方 (提言 3 章の (5) (6) (7) (8))

多様な計測データ (Spring8 や J-PARC 等含む) とシミュレーションの連携により、特定の特性を実現する材料を発見・創成する新しい研究手法の開発、製造プロセス連携及び産官学連携の仕組み例をサーベイして、成功事例分析と実用化のための課題を抽出する。

現状の計測データ活用における課題、問題点を以下にまとめた。

4.4.1 主な課題、問題点：

- 1) 計測データとシミュレーションデータを単に比較する手法の限界
 - ・ 多数の変数 (時空間) を比較、連携する方法がない
 - ・ 画像データからの特徴の抽出方法が確立されていない
- 2) 計測自体の限界
 - ・ 界面では現象の発現その場のデータはうまく測定できないことが多い
 - ・ 手法そのものがない、測定点が不足、測定時間の限界
 - ・ シミュレーションモデル作成に期待される、界面の原子配置までは測定できない
- 3) 界面状態計測技術の課題
 - ・ 一般的に非破壊計測技術がない
 - ・ 破壊測定の測定時間短縮、自動化
 - ・ 空間分解能、元素分析下限の向上
 - ・ 界面三次元形状の特徴の数値化
- 4) 材料界面データベースの課題

- ・ 界面エネルギーなどについての信頼のおけるデータベースはなく、データベース構築自体が課題である。
 - ・ 特定条件での計測データを如何に汎用化するか
 - ・ 統一フォーマット（形式と内容）
 - ・ 画像データの取り扱い
 - ・ 収録すべきデータの要件定義
 - ・ データベース構築・運用主体
- 5) 材料中に存在する相の3次元情報を実験的に把握することは容易ではない
- 6) Spring8、J-PARC等の大型共用施設活用したデータの有効活用
- ・ 大型共用施設活用したデータ（『京』等の計算結果も含まれる）は、研究者が目的とするデータに関しては、論文発表などで公開されるが、同時に採取された副次データは公開されずに埋もれてしまう場合があり、重複、抜け、研究者間でのばらつきなどに繋がる。

4.4.2 計測データ活用の事例ベンチマーク

- ・ Spring8、J-PARC等の大型共用施設活用
 - 1) Spring8による微細領域（はんだ接続部のボイド）の計測とエレクトロマイグレーションのシミュレーションの連携によるCuコアはんだボール製品の高マイグレーション耐性の実現（エレクトロニクス実装学会誌第15巻第7号）
→シミュレーションの結果検証のためにSpring8計測を用いている。（シミュレーションモデルの改善にSpring8が使えると思われる）
- ・ データ同化手法（気象、流体・・・）
 - 1) 4次元同化（データ同化）
リアルタイム応力測定データと時系列構造解析を使った4次元同化による疲労予測
<http://www.cs.kyoto-u.ac.jp/wp-content/uploads/2012/06/03ishikawa.pdf>
http://unit.aist.go.jp/msrc/ja/teams/03_advanced.html
 - 2) 各種流れ場計測データをリアルタイムにCFD流体解析へフィードバックし、圧力分布などを可視化「Super-real-time medical engineering」. 医療、電子デバイスの熱流解析などに応用.
- 超音波計測+流体解析（血流・血行）、管内動圧計測+流体解析（流れ可視化・熱流）
東北大流体研 早瀬教授 <http://www.ifs.tohoku.ac.jp/sme/index-j.htm>
 - 3) 半導体製造プロセスにおけるポリマーと基板との界面のモデリング・シミュレーション
- ・ データベース活用
 - 1) リチウムイオン電池用カソード材料の設計において、無機化合物の知識データベースの活用により、ハイスループットDFT計算用入力構造を予測（MIT）
Opportunities and challenges for first-principles materials design and

applications to Li battery materials, G. Ceder, MRS Bulletin, 2010, 35, 693-702.

2) ライフ系の問題として、糖鎖データベースを活用した診断技術一般

(糖鎖関連疾患と原因遺伝子のデータベース化、糖鎖構造のデータベース、ターゲットレクチンおよびターゲット糖鎖のデータベース等一般)も重要かと思えます。個人的な意見ですが、計測データと計算科学の連携例として、現在進行形の課題の一つと思えます。

- ・糖鎖は一般に、ウイルス感染症、がん・腫瘍の転移などの鍵となっているため、レクチンと糖鎖の相互作用を種々のデータから理解する事が重要となっている。現状では糖鎖の構造を予測する事が困難なので(揺らぎの程度が大きく、普通は結晶構造で見えない。そこでNMRの構造解析から構造モデル化するのが一般的)、糖鎖をデザインにするにあたり、経験的なNMRデータベースを活用して分子設計するのが一般的なのが現状。(化学シフトの特徴的なピークは経験的なデータベースとして情報が蓄積されており、糖鎖の系に限っては、シミュレーションよりも有効に活用されているのが現状)

・計測データ活用:

1) ②Mathieu Luisier and Gerhard Klimeck, Phys. Rev. B 80, 155430 (2009).

②は基礎理論研究からデバイス設計に上手くつながっており、微視的な計測データ(走査プローブ等)との比較・チェックは比較的上手く行われている。定常解を相手に行っているので、データ同化手法の対象ではない。

2) SOFCの多孔質電極の内部の3次元構造をFIB-SEMで分析計測し、得られた構造データでガスの拡散性をシミュレーション解析。

”Three-dimensional reconstruction of a solid-oxide fuel-cell anode” Nature Materials 5, 541 (2006). <http://www.nature.com/nmat/journal/v5/n7/abs/nmat1668.html>

・蛋白質結晶構造解析(膜タンパク、リガンド結合状態での構造)

4.4.3 材料シミュレーションの高精度化、計測連携活用のための実用上の工夫すべき点

1) ベンチマークから得られる、計測データ活用のメリットと課題

- ・界面内部での物理的・化学的現象がオンタイムで可視化できるようになれば、界面モデリングやシミュレーションにとって大変役に立つ情報。
- ・高並列計算による計算モデル大型化
- ・実験と直接比較可能な物性量の出力(スペクトルなど)

2) 解析と計測データの比較手法

- ・各種スペクトル、パターン。また、特徴的ピークの圧力や温度による変化。
- ・解析品質のV&V手法の構築
- ・データ同化手法の有効活用(限られたデータからシミュレーションと連携して実験値を予想)

4.5 材料界面設計における新機能、特性を産むための新しい取り組み、アプローチ 以上、議論してきた内容を俯瞰して、あるべき姿のイメージをまとめる。

4.5.1 従来と違うアプローチの在り方

- ・材料界面では複雑な現象が相互作用しており、多数の因子を考慮して新しい材料を設計するためには、新しいアプローチが必要と思われる。
- ・従来（演繹的アプローチ）：「メカニズム解明→解析→探索→実験」という形で研究開発が進められてきたが、バイオに分野のように、まず発見的なアイデアの知識にコンタクトすることから、後付でメカニズムを解明して材料を設計していくというアプローチも有効であると考えられる。特に、イノベーションを起こすようなアイデアは演繹的には起こりにくい。
- ・新しい発見的アプローチ：「探索→メカニズム推定→解析→実験」（図2）を考え、特にアイデアの元になる材料関連データベースのあり方、質を検討する必要がある。
- ・現実的には現象解明が大事であり、計算科学（演繹的）との両方の融合が最適だと思われる
- ・特に材料設計はバイオ分野に比べ、因子の数が多い（図3）
- ・創薬設計における分子間ドッキングシミュレーションは界面設計にも有効と思われる。

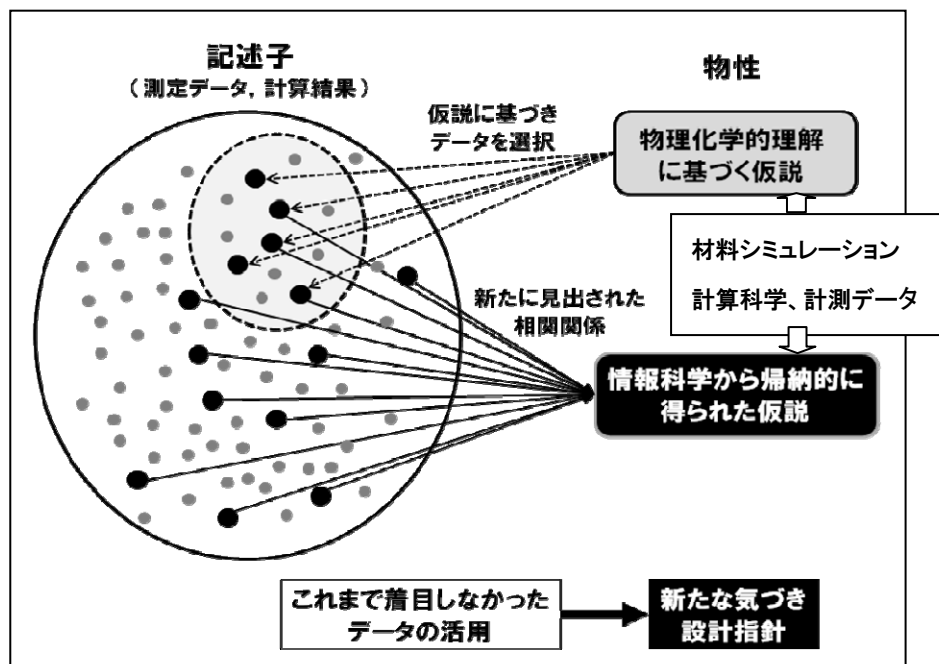


図2 材料設計における新しい考え

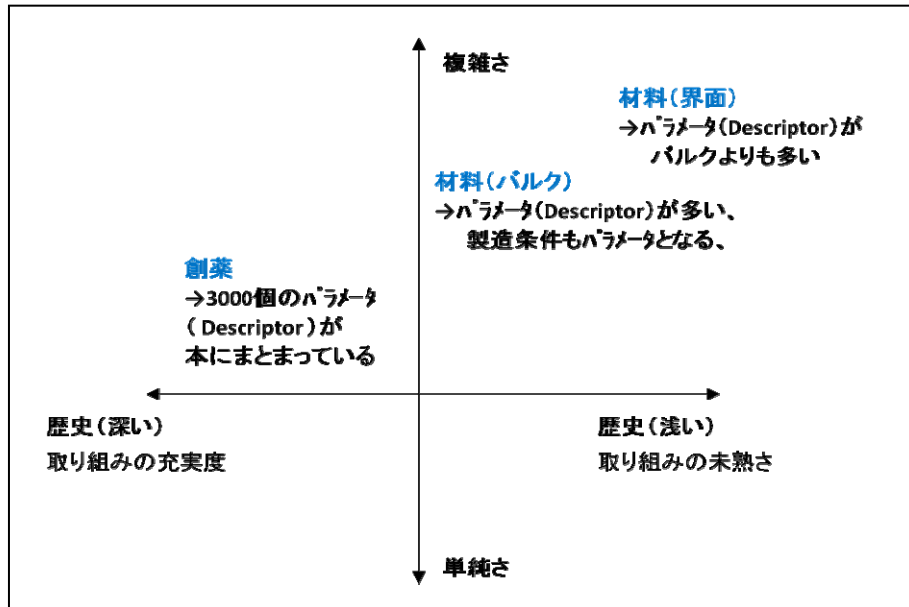


図3 界面材料設計と他分野の比較

4.5.2 データ基盤の整備と柔軟性

多様なデータ基盤の構築には課題が多い。

- 1) 材料データの収集・加工・管理・運用を継続的に取り行うセンターの設置
 精緻なマイクロ物理化学分析結果 DB、シミュレーション結果 DB のみならず、経験的な製品特性評価試験の DB (企業からは無理か) などもセットで揃え、更に基本的なデータ解析ツール(可視化等も含む)等も管理運用を行う、包括的なデータ管理運用センターの設立。
- 2) 界面物性と個別の材料物性を包括する網羅的データベースの構築
- 3) 産官学が連携してデータベースを構築、メンテナンスを継続できる仕組み作り
- 4) データ科学と材料科学分野の交流の促進
- 5) 製造との連携: アイデアを早く試行(製造と性能確認)できる、製造プロセスの仕組み(3Dプリンタ等の活用)

4.5.3 関連技術の研究開発

- 1) 異なる計測データと解析データの V&V プロセスを効率的に行えるデータ連携、情報照合ネットワークの仕組み
- 2) ミクロな物性からマクロな材料特性発現までをつなぐマルチスケール学の強化
- 3) データ同化手法(逆問題的)や第一原理計算や現象理論モデル(順問題的)の融合によるシミュレーション技術の高度化(バイオは理論・モデルが不足していたため、逆にインフォマテックスが発達した)と新材料特性予測技術
- 4) 新しい特性や物性などに気がつくためのマテリアルインフォマテックス可視化技術
- 5) 演繹的な手法と新しい探索的手法の融合及び、対応する将来の計算機技術、ソフトウェア

4.5.4 必要な研究開発とデータ基盤の整備(まとめ)

- ・材料界面の新機能を産み出すための仕掛けとして、以下の点が考えられる。

- ・材料データの収集・加工・管理・運用を継続的に取り行う組織
- ・界面物性と個別の材料物性を包括する網羅的データベースの構築
- ・産官学が連携してデータベースを構築、メンテナンスを継続できる仕組み
- ・データ科学と材料科学分野の交流の促進
- ・アイデアを早く試行（製造と性能）できるクイック製造の仕組み（3D-Pr 等）
- ・計測データと解析データの Verification & Validation (V&V) プロセスを効率的に行えるデータ連携、情報照合ネットワークの仕組み
- ・データ同化手法（逆問題的）や第一原理計算や現象理論モデル（順問題的）の融合によるシミュレーション技術の高度化と新材料特性予測技術
- ・新しい特性や物性などに気がつくためのマテリアルインフォマテックス可視化技術
- ・演繹的な手法と新しい探索的手法の融合及び、対応する将来の計算機技術、ソフトウェア

今回のこの中で、1) 界面におけるコアとなる要素技術、2) 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、維持管理のための仕組み作り、に関して検討した（5章）。

5. 今後望まれる材料界面設計技術の構成要素テーマ

5.1 要素技術

- ・シミュレーションを応用して材料を設計する理想的技術の構成要素を考えると、次のような要素技術の研究が必要となる。

A 材料物性の実験結果やシミュレーション結果のデータベース

- A-1 必要な記述子（説明変数）を漏れなく含んだデータベース形式
- A-2 既存のデータベースを最新のデータベース形式に変換する技術
- A-3 TEM データ等の画像データから特徴を記述子として抽出する技術
- A-4 界面に特有な記述子（格子ミスマッチ等）を扱う技術

B データベースを基に材料物性を記述子の多変数関数として表現する回帰分析技術

- B-1 多変数関数を可視化して支配的な記述子を気づかせる技術
- B-2 得られた多変数関数の信頼度を表示する仕組み
- B-3 得られた多変数関数の信頼度が低い場合の理由表示
（データ不足、ばらつきの大きさ等）
- B-4 記述子空間のデータが不足している領域を表示する仕組み
- B-5 少ないデータでも効率良く多変数関数を得ることができる技術

C 多変数関数から記述子の満たすべき数値範囲を決定して表示する技術

D 記述子の満たすべき数値範囲から最適材料を表示する技術

- D-1 既存の材料から最適材料を選定して表示する技術
- D-2 これまでに無い最適な新材料を記述子から構成する技術

(記述子から材料へ変換する技術)

E 記述子空間に実在材料が網羅されていない場合に仮想材料で補完するシミュレーション

この仕組みを図にすると以下のようなになる (図 4)

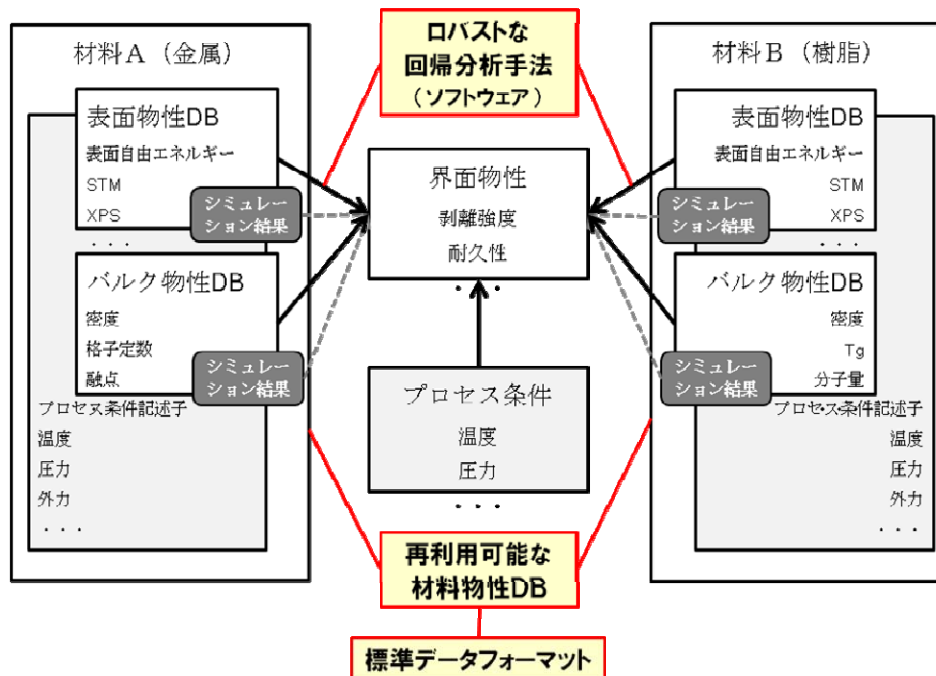


図 4 材料界面設計技術の構成要素

5.2 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、維持管理のための仕組み作り

本研究会にて先に提示した、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」を具現化するために、下記のような機能を有し、かつ、それら機能の連携の中心となる“戦略的拠点”が必要と考える。

- ①材料データの生成(計測)、収集(文献値)機能
- ②データベース構築・管理(データ共有)機能
- ③モデル化、シミュレーションソフト開発機能
- ④データ解析・二次加工ツール開発機能
- ⑤人材の確保・育成

但し、戦略的拠点の必要性は、既に数年前から指摘されており、例えば、国機関による調査報告にて、次のような現状課題認識^{[1][2]}が報告されている。

- ・現状、①～④の機能が、国内研究機関に散在し、かつその研究開発における成果は個別プロジェクト依存性が高いため、共用・連携やその継続性において非効率を生じている。
- ・その結果、①～④の機能向上のための研究開発や、整備運用に携わる人材の正当な評価やキャリアパスを築くことが困難で、⑤の人材確保・育成の障害となっている。

したがって、本研究会にて提案する戦略的拠点は、これら課題を克服し上記機能連携の中心となるべく、次に示すような事業を行うものとする。

- ・「高付加価値化された共通プラットフォーム」（後述）の開発、仕様決定を行う。
- ・国内研究機関における、上記機能連携を実現する環境を一元的に維持・整備・管理する。
*「高付加価値化された共通プラットフォーム」とは、単なるDBのリンク集や、ポータルサイトと言うのではなく、DBデータフォーマットの共通化、汎用化や、シミュレーションやデータ解析加工ツールとDBとの連動などを容易にするライブラリ群といったものを示し、上記の各機能を効率的に連携し、また産業界での利用の便に供するものとする。

上記のような高付加価値共通プラットフォーム開発や環境の一元管理は、

- ・材料データや関連するシミュレーション、ツール群におけるいわゆるデファクトスタンダード化と、
 - ・それによる材料データインフォマティクス分野でのコンサルティングやツール開発などを主要業務とする企業や個人などからなる、新しいビジネスエコシステムの形成
- を促進することにより、各機能の連携効率化や継続性に対し効果があると考えている。すなわち、運営を国資金にのみ頼ることなく、自立し得るビジネスモデルを獲得する最初のステップとなると考える。さらに、
- ・そのビジネスモデルを検証、発展させ自立的運営を確立し得るPDCAを回すために、戦略的拠点内には、研究開発部門と密接に連携する“**ビジネスセクタ**”を置く必要があると考える。

以下に、まず本研究会以前に提唱されてきた“プラットフォーム”、“戦略的拠点（司令塔）”構築などの取り組みについて述べ、次に本研究会についての提案についてその詳細を述べる。

5.2.1 連携システム構築のための「プラットフォーム」の役割

本研究会にて先に提示した「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」は、関係する基礎科学、応用・実用化のための要素技術、インフラ（ハード／ソフト、データベース、計測施設）、ステークホルダーが広範囲に渡る分野横断的なイノベーションシステムであり、また、基礎科学研究や要素技術開発にとどまらず、新たな材料界面設計手法を産み出すエンジンとして、我国の産業競争力低下という現実課題の解決が必達目標とされる。

上記のような課題解決型イノベーションシステム構築の手順としては、例えば、JST-CRDSにて提唱されている課題解決型の「システム構築型イノベーション」^[3]によれば、図 5のような3つのフェーズから構成され、特にその中で、関連知識の結合を行うためにフェーズ1にて構築される「プラットフォーム」が重要な役割を演じる（図 6）。

本研究会にて提示した「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」において、このプラットフォームとは、②データベース構築・管理（データ共有）、③モデル化、シミュレーションソフト開発、④データ解析・二次加工ツール開発などの機能における、DBデータフォーマットの共通化、汎用化や、シミュレーションやデータ解析・加工ツールとDBとの連動を実現する共通的な技術群や、シミュレーションの物理化学モデルや記述子やデータ相関関係群である。

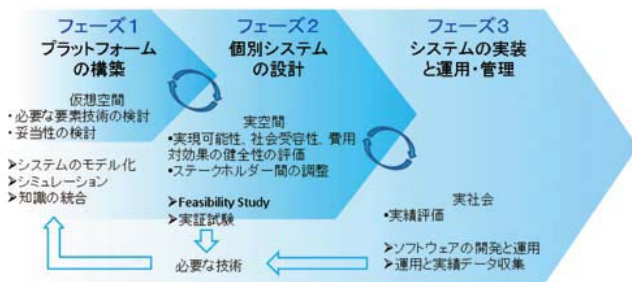


図5 システム構築の手順*

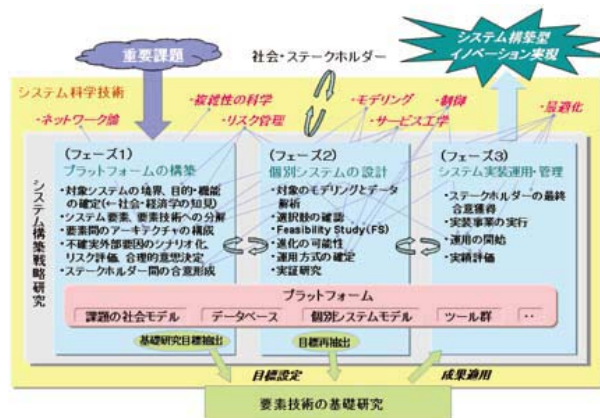


図6 「システム構築型イノベーション」におけるプラットフォームの役割*

*JST-CRDS フロクレスレポート (CRDS-FY2013-XR-03) [3]より抜粋

5.2.2 「知的基盤」としての「プラットフォーム」の現状課題とこれまでの対応策

上述のようなプラットフォームは、国家的な「知的基盤」^[注]参照たる資格を有すると考えられ、適切なファンディング、スキームによる継続的な国家予算投入が妥当と考える。しかしながら、例えば技術情報データベースに関して、H24の知的基盤整備特別委員会による知的基盤整備・利用促進プログラムに関する中間報告^[4]にて指摘されるように、未だ各種データベースが散在し利用し辛い状況となっている。このような状況を生む一因として、国、公的機関のみによる知的基盤の整備・提供が、予算上、実施困難な状況にあり、また、今後10年、予算・人員の増加が見込めないことなどを挙げている。したがって、中間報告では、現在のリソースを最大限、有効活用できる以下のような新たな対応を求めている。

- ① 整備機関は、普遍的対応、重要課題、長期課題におけるリソースの最適化を図った上で、利用者を含む他機関との協力・連携を拡大し、知的基盤の整備・提供を行う。また、国は、知的基盤の整備機関と関係機関とのパートナーシップの構築の支援を行う。
- ② 整備機関は、限られたリソースを有効に活用するため、これまでの整備方法、ルール等を積極的に見直し、整備等業務の合理化、効率化等を図る。

上記対応を進めるに当たって、国、整備機関、利用者等の協力・連携を促進する体制作りが必要不可欠である。そのため、対象となるプラットフォーム（知的基盤）は、ユーザーニーズに応え得る付加価値の高いものである必要があり、かつ、強力なリーダーシップ、マネジメントを必要とするため、果たすべき機能が明確化された中核機関等の“司令塔”（本研究会の“戦略的拠点”もこれに類する）の必要性を挙げている。ちなみに、この中間報告では、「ものづくり基盤プラットフォーム」の構築を提案している。

同様の提案は、先にあげた参考文献[1]、[2]においてもなされており、材料科学系のプラットフォーム候補としては、物質・材料研究機構のMatNavi^{[2][5]}や、産業技術総合研究所の研究情報公開データベース (RIO-DB) などが挙げられる。何れのプラットフォームも、単なるデータベースのリンク集ではなく、シミュレーションツールとの連動や、データ解析ツールも備え、そのプラットフォームとしての付加価値の向上を図りつつある。また、MatNaviの場合、司令塔としては、物質・材料研究機構の「材料情報ステーション」がその役割を担っていると思われる。

さらに、先にあげた参考文献[1]においては、DBデータフォーマットの共通化、汎用化に関する詳細な検討、および実際の複数のデータベースの連携のためのプロトタイプの開発などを行うほか、継続的なデータベースの維持管理のためのビジネスモデルや組織などについても検討がなされている。ビジネスモデルの事例としては、下記のようなものを挙げているが、実際に収益を得てビジネスとして自立するには、かなりの初期投資と長い期間を要するようである。

(材料データベース関連事業のビジネスモデル事例) ^[1]

- ・ポータルサイト運営、広告収入
- ・ポータルサイト運営、広告収入
- ・データベース利用料
- ・データベース販売、導入、コンサルティング
- ・データベース・システム（プラットフォーム）販売、導入、データベース構築
- ・材料データベースの運用支援、ホスティング・サービス
- ・書籍、ハンドブック、データシート販売データベース利用料

5.2.3 本研究会における「プラットフォーム」構築の考え方

本研究会における、プラットフォームに関しても、最終的には適切なビジネスモデルを築き、国や公的機関からの資金に大きく依存しないで、維持・整備されることが望ましい。

したがって、司令塔たる“**戦略的拠点**”を置き、この拠点が、産業界での利用の便に耐えるよう、DBデータフォーマットの共通化、汎用化や、シミュレーションやデータ解析・加工ツールとDBとの連動などを実現する「**高付加価値化された共通プラットフォーム**」の開発、仕様決定を行い、これのユーザー利用環境を一元的に**維持・整備・管理**するものとする。また拠点内に、“**ビジネスセクター**”を置き、プラットフォームの利活用によるビジネスモデルについて検討を行い、ユーザーからの声をフィードバックし、プラットフォームの利便性をさらに高め、高付加価値化を推進することで、自立的運営のPDCAを回す。

以下、本進め方による具体的イメージを持つために、期待されるシナリオを書き下し、そこに予想される課題について検討することで、「**新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム**」構築に向けての具体的な施策案と、その担当すべき機関、組織などについてイメージアップしてみた。但し、より詳細な検討は、今後、制度設計の専門家や法律家なども交えて行うべきと考える。

5.2.4 「高付加価値化された共通プラットフォーム」と一元的整備・管理により

期待されるシナリオと想定される課題、およびその施策案

【シナリオ】*シナリオは、並行して進むものもあるが、概ね下記項目の順番で進行するものと考えている。

- ①DBデータフォーマットの共通化、汎用化により、分散している各種データベースの統合を可能としその情報量を増大させ、そのこと自体が付加価値となる。

- ②また、学会など材料研究コミュニティとの連携により、投稿論文には**共通フォーマット**のデータを登録する事を義務付ける。あるいは、国資金による材料分野プロジェクトにて得られたデータは、一定の開示制約を設けるなどの配慮をして登録を義務付ける。といった、方策により、さらにデータ収集量の増大が図られる。
- ③DB登録の際、そのデータの精度を担保するために、複数の研究機関からの同じ対象物のデータを**比較検証**する期間を設ける。また、定期的にDB精度の検証を行う。これらの活動DBの維持管理を公費で行う仕組みを作る。これにより、登録データの信頼度をいっそう高めることができ、データベースの付加価値を高めることができる。
- ④さらに、シミュレーションやデータ解析・加工ツールとDBとの連動などの高付加価値化により、材料研究開発に携わるユーザー数の増大を促進できる。
- ⑤所属学会内部での情報交換、府省庁ごとに実施される個別プロジェクトの成果、情報交流の場を提供し、結果として、これまで接点の無かった異分野連携の機会を加速する効果も期待される。これによる、分野間に埋もれてしまっていた、データの潜在的なニーズや新たな価値が顕在化される可能性もある（ある分野では不要なデータでも別分野では宝）。
- ⑥一方、戦略拠点による、材料データベース等の一元管理は、データやシミュレーションソフト、解析ツールといった知的財産の公開、非公開をコントロールしやすくなり、産業利0用における“協調”と“競争”の線引きも容易になると期待される。さらに、海外DBとの連携や、DBビジネスにおけるコントロール可能レベルも高くなる。
- ⑦上記、情報量の増大とユーザー数の増大、さらには、ビジネス上の知的財産のコントロール性の増大などで、戦略拠点における高付加価値共通プラットフォームが、**デファクトスタンダード化**する事が期待でき、データベースプロバイダなどによる、材料データインフォーマティクス分野でのコンサルティングやツール開発など**新ビジネスエコシステム**の形成が期待される。
- ⑧このビジネスエコシステムからのニーズなどフィードバックは、拠点運営への評価として、反映される。したがって、戦略拠点には、新ビジネス支援のための**ビジネスセクター**を併設し、自立的運営にむけてPDCAを回す。
- ⑨戦略的拠点の初期の運用費用に関しては、上記のように、「高付加価値化された共通プラットフォーム」は、国家的な**「知的基盤」**たる資格を有すると認識されるに至り、適切な、ファンディング、スキームによる継続的な国家予算投入が妥当とされる。
- ⑩また、戦略拠点による、材料データベース等の一元管理は、研究開発プロジェクトの重複回避やリソースの有効活用も期待でき、節約できた予算は戦略的拠点の運用費用の一部に充てることも期待できる。
- ⑪上記のような継続的な拠点運用資金の存在や、新ビジネスチャンスの場の形成により、拠点運営に当たる人材のキャリアパスが多様化し、人材確保の機会増加、人材育成の充実が期待され、人材面でも本格的な自立運営の軌道に乗る。

【課題】

* ()内の○囲み数字は、下記の課題が懸念される上記シナリオを示す。

- 1) データベースにデータ供給するモチベーションを如何に持ってもらうか (①②)
- 2) 国や公的機関によるファンディングの課題 (③⑨⑩)
(現状では基礎研究から社会実装までシームレスに支援が困難?)
- 3) 関係各所との連携をとりつけ、強力に推進していくリーダーシップ人材が必要 (①~⑪)
- 4) そもそも戦略的拠点の具体的組織体制はどうあるべきか (①~⑪)
- 5) 知的財産権に関するルールの整備が必要 (②⑥⑦⑧)
- 6) 中小企業を含み、幅広く産業界に利用してもらうにはどうすればよいか (⑦⑧)
- 7) 人材、業種間交流を如何に有効に行うか (⑤⑪)

【施策案と産学官の役割】

上に示した、期待されるシナリオにおける課題に対し、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」構築に向けての施策案と、産学官のどこがリーダーシップをとるべきかなどについて、表1に整理して示す。

表1 期待されるシナリオにおける課題に対する施策案と産学官の役割

課題	施策案	主な担当
1) データ供給へのモチベーション	<p><貢献企業に対する特典> DB提供は知財登録済みのものもある。特許維持費の援助の特典をDB提供企業に与えるなど、民間企業からのDB提供の動機付けを行う。</p>	官
	<p><成功事例の収集> ・まずは、企業に連携システムのコンセプトを理解してもらうことが重要。例えば、SmartBusinessのように、「シミュレーションやデータベース化によって費用対効果が飛躍的向上した」という具体的な成功例を示すことが有効と考えられる。このような成功例は、(小規模であるかもしれないが)すでに「企業」と「大学」との共同研究で得られている可能性がある。大変な作業かもしれないが、「企業との共同研究」「シミュレーション・データベース化」「新材料設計」のキーワードに関連する全ての材料分野の研究室から情報を引き出し、有用な事例をまとめておくことは重要と考える。</p>	産・学・官
2) 国や公的機関によるファンディング	<p><プロジェクト体制の見直し> ・各省庁が独自に(重複した)プロジェクトを複数並行して実施する体制を見直し、研究開発プロジェクトの整理・一体化を実現する。その上で、府省庁連携で一体として(大きな)プロジェクト予算を確保し、学術的研究(主として文科省?)と事業化研究(例えば経産省?)を一体的に実施する。この省庁連携プロジェクトを推進する統括機関として、各府省庁からの担当、アカデミア、企業サイドからなる運営委員会を設置し、プロジェクトを一元管理する仕組みを設ける。</p>	官
	<p>・これに関連し、例えば技術戦略マップ(経産省)の様な、個別省庁の政策に沿った研究開発マップのあり方を見直し、国として取り組むべきより大きな戦略マップを策定・作成することで、各省庁の役割/戦略を個別ツールとして国家開発戦略に盛り込み、プロジェクト立案およびファンディングの意義を明確にする。</p>	官
	<p><国際提案などの国家的意味付け> ・異なったデータベースを管理・運営する為の効果的な手法が提案でき、共通フォーマット等の国際提案を我が国が先導して行えば、共通プラットフォームに関する一種の「標準化」に積極的に貢献でき、国費を投じて継続的にプロジェクトを進めるに足る理由付けもあると考えられる。</p>	官
3) リーダーシップある人材	<p><戦略的拠点トップの人選およびサポート体制の確立> ・戦略的拠点のトップには、関係各所との連携を強力に推進できる人材として、材料関連学協会会長経験者クラスにその任に当たってもらう。また、そのサポート役として、産・官(現役、OB)より適正規模の人材を配置する。</p>	産・学・官
4) 戦略的拠点の具体的な組織体制	<p><コンソーシアムの設立> ・アメリカではよく主要メカと国が共同でコンソーシアムを設立して、「今後ニーズが高まるであろう研究分野」を支援している。企業側は大枠での研究支援分野は決定し、具体的な提案や研究は大学の研究室が行うというスタンスである。企業側のメリットとしては、1) 先攻研究への投資を分担で行えること、2) 定期的に研究グループと意見交換が行えること、3) 優秀な人材の確保が出来ること、等が挙げられる。大学側も、1) 中期(3~5年)のまとまった資金の援助、2) 実際のニーズを把握できた上での実践的な研究(工学向け)、3) 学生と企業とのネットワーク構築、等のメリットがある。今回提案する連携システムが実質的に稼働するためには、必ず企業側の参入と協力が必要となるので、お互いにWin-Winとなるべくコンソーシアムを設立することはメリットも多いと考えられる。</p>	産・学・官
5) 知的財産権に関するルールの整備	<p><国家レベルでの共通基盤管理> ・共通言語として英語や数式表現等を採用することにより、国内にとどまらず海外への情報発信および国際連携も期待されるが、その一方で、国内における知財/情報流失の危険性などが危惧される。故に、確固とした国家レベルでの共通基盤管理が求められる。</p>	産・学・官
6) 中小企業を含む幅広い産業界での利用促進	<p><無償の利用研修> ・中小企業向けにDB利用研修を若手技術者に対して行う(無償)。</p>	産・学・官
	<p><ニーズの把握> ・「新材料設計」の成功の鍵は、「いかに素早く的確に、将来の材料ニーズや業界トレンドを把握できるか」ということだと考える。これはビジネスにも直結しているため、企業の方が情報量は多いはずである。企業側がそうした情報を適時に大学にも配信できるようなシステムの構築が望ましい。</p>	産
7) 人材、業種間交流促進	<p><技術者、研究者登録制度> ・転職ルール(基盤技術領域に限り、技術者相互レンタル制度など)まで含めた行政側の政策が必要。E-RAD(*)の民間バージョンによる民間の技術者登録があつて良い。</p>	産・学・官

(*) 府省共通研究開発管理システム

<https://www.e-rad.go.jp/system/index.html>

(**) コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD[®]) ワークショップ

<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/>

(***) Computer aided Materials and Molecular design Forum = 略称 CAMMフォーラム

<http://www.camm.bri.or.jp/camm/>

6. 本研究会からの提言

6.1 今後産官学で推進すべきテーマ

・シミュレーション技術や情報科学を新材料設計開発に活かしていくための 土台、環境としての産官学の役割分担の考え方を以下に示す。

■官学の役割：

- ・新材料発見の気づきとなる材料データの活用、情報科学活用分野を想定した研究開発の強化（次世代計算機、ソフトウェア研究含）、人材育成
- ・一見意味のないものも含めた網羅的データベースの構築、使い勝手向上
データ収集・加工・更新・管理・運用を継続できる仕組み作り

■産業界の役割：

- ・自社が持つ材料データの適切レベルでのオープンへのルール化
- ・材料設計への積極的な材料シミュレーション活用の気運創生
- ・新材料設計における多様な現場ニーズ、課題の情報公開

■産官学連携を活用した仕組み作り

- ・データ、情報科学と材料科学分野、数学、データサイエンス分野の交流の促進
- ・計測と解析データのV&Vプロセスを効率的に行えるIT活用仕組み作り
- ・新材料分野の市場創生の仕組み、活性化モデルの検討

6.2 研究・開発すべき要素技術

シミュレーションを応用して材料を設計する理想的技術の構成要素を考えると、次のような要素技術の研究が必要となる。

A 材料物性の実験結果やシミュレーション結果のデータベース

- A-1 必要な記述子（説明変数）を漏れなく含んだデータベース形式
- A-2 既存のデータベースを最新のデータベース形式に変換する技術
- A-3 TEMデータ等の画像データから特徴を記述子として抽出する技術
- A-4 界面に特有な記述子（格子ミスマッチ等）を扱う技術

B データベースを基に材料物性を記述子の多変数関数として表現する回帰分析技術

- B-1 多変数関数を可視化して支配的な記述子を気づかせる技術
- B-2 得られた多変数関数の信頼度を表示する仕組み
- B-3 得られた多変数関数の信頼度が低い場合の理由表示（データ不足、ばらつきの大きさ等）
- B-4 記述子空間のデータが不足している領域を表示する仕組み
- B-5 少ないデータでも効率良く多変数関数を得ることができる技術

C 多変数関数から記述子の満たすべき数値範囲を決定して表示する技術

D 記述子の満たすべき数値範囲から最適材料を表示する技術

- D-1 既存の材料から最適材料を選定して表示する技術
- D-2 これまでに無い最適な新材料を記述子で構成する技術（記述子から材料への変換技術）

E 記述子空間に実在材料が網羅されていない場合に仮想材料で補完するシミュレーション

6.3 産官学連携による先進的な材料系データベースの構築、プラットフォームのあり方

本研究会にて先に提示した、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」を具現化するために、下記のような機能を有し、かつ、それら機能の連携の中心となる“戦略的拠点”が必要と提言する。

- ①材料データの生成(計測)、収集(文献値)機能
- ②データベース構築・管理(データ共有)機能
- ③モデル化、シミュレーションソフト開発機能
- ④データ解析・二次加工ツール開発機能
- ⑤人材の確保・育成

本研究会にて提案する戦略的拠点は、上記機能連携の中心となるべく、次に示すような事業を行うものとする。

■「高付加価値化された共通プラットフォーム」の開発、仕様決定を行う。

■国内研究機関における、上記機能連携を実現する環境を一元的に維持・整備・管理する。

■上記のような高付加価値共通プラットフォーム開発や環境の一元管理は、

- 1) 材料データや関連するシミュレーションツール群におけるデファクトスタンダード化、例えば、DB共通フォーマット化(投稿論文等も含む)、データの精度を担保するために、複数の研究機関からの同じ対象物のデータを比較検証する仕組み、など。
- 2) それによる材料データインフォマティクス分野でのコンサルティングやツール開発などを主要業務とする企業や個人などからなる、**新しいビジネスエコシステムの形成**^{※1}、の促進により、運営を国資金にのみ頼ることなく、自立し得るビジネスモデルを獲得する最初のステップとなる。

■確固たる自立への道筋のかじ取りを行うべく、ビジネスモデルを検証、発展させ自立的運営を確立し得るPDCAを回すために、戦略的拠点内には、研究開発部門と密接に連携する“**ビジネスセクタ**”を置く。

■データの記述や活用を想定して、今後、数学研究者も入れた技術交流の促進、データエンジニアリング、サイエンス研究の評価、価値の向上の仕組みが必要。

※1: データベースプロバイダなどによる、材料データインフォマティクス分野でのコンサルティングやツール開発を主要業務とする企業や個人の形成

【注】

<知的基盤とは>^[4]

「知的基盤」は、国民生活、社会経済活動を支える重要かつ不可欠な基盤として、社会資本の整備と同様、国が整備を行い、幅広く利用されている。

「知的基盤」は、法令等で以下のように定義されている。

①第4期科学技術基本計画（平成23年8月19日 閣議決定）

研究開発活動を効果的、効率的に推進していくためには、研究成果や研究用材料等の知的資産を体系化し、幅広く研究者の利用に供することができるよう、**知的基盤（*）**を整備していく必要がある。

（*）研究用材料、計量標準、計測・分析・試験・評価方法及びそれらに係る先端機器、関連データベース等

②研究開発力強化法（平成23年6月11日法律第63号）

（研究開発システムの改革の推進等による研究開発能力の強化及び研究開発等の効率的推進等に関する法律）

国は、研究材料、計量の標準、科学技術に関する情報その他の研究開発の推進のための知的基盤をなすもの（以下この条において「知的基盤」という。）の供用の促進を図るため、国、研究開発法人及び国立大学法人等が保有する知的基盤のうち研究者等の利用に供するものについて、研究者等が知的基盤を利用するために必要な情報の提供その他の知的基盤を広く研究者等の利用に供するために必要な施策を講ずるものとする。

【参考文献】

- [1] 独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 知的基盤創成・利用促進研究開発事業 「材料データベースの連携プラットフォームの構築に関する調査研究（平成19年度成果報告書）」（2008/3）
<http://www.codata.jp:8080/doc/nedo-report.pdf>
- [2] 独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター 戦略プログラム（CRDS-FY2013-SP-01） 「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」（2013/8）
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/SP/CRDS-FY2013-SP-01.pdf>
- [3] 独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター プログラムレポート（CRDS-FY2013-XR-03） 「システム構築型イノベーションの重要性とその実現に向けて」（2013/11）
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/XR/CRDS-FY2013-XR-03.pdf>
- [4] 産業構造審議会・日本工業標準調査会合同会議 知的基盤整備特別委員会 中間報告－知的基盤整備・利用促進プログラム－（平成24年8月）
<http://www.meti.go.jp/press/2012/08/20120815002/20120815002-3.pdf>
- [5] NIMS物質・材料データベース（MatNavi）のHP
<http://mits.nims.go.jp/>

産業競争力懇談会（COCN）

東京都千代田区丸の内一丁目 6 番 6 号 〒100-8280

日本生命丸の内ビル（株式会社日立製作所内）

Tel : 03-4564-2382 Fax : 03-4564-2159

E-mail : cocn.office.aj@hitachi.com

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

事務局長 中塚隆雄