

A1-07 データ駆動科学が切り開く新時代の材料研究・開発

安藤康伸（産総研 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター）

ハードウェア・ソフトウェア機能の急激な進展や日本における研究・開発人口の減少、研究管理業務の増加、ライフ・ワークバランスなどの理由により、材料に関する研究・開発はこれまでの進め方からの大きな変革を求められている。特に、情報インフラ・データ活用による、国際競争力の強化に加えて材料研究・開発の効率化や持続可能な研究運営・知識継承を目指す、いわゆる「研究 DX」は今後避けることができない課題である。

講演者は、材料分野におけるデータ駆動科学であるマテリアルズ・インフォマティクスの枠組みから研究 DX に向けた具体的なシステム作りに関する検討を推し進めている。例えば、NEDO 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクトの成果として報告をした「情報・計算・計測を連携した不均質触媒の機能予測」¹⁾の成果では、材料データの特徴である高コスト・少数データの利用のための処方箋を示した。また計測ハードウェアの進展に伴う計測データ爆発への対処策として、「機械学習を駆使したスペクトルの高速自動解析技術」の提案²⁾をおこなった。加えて、材料に関する実験に対する DX を実現するため、JST 未来社会創造事業及び CREST プロジェクトに参画し、「ハードウェアとソフトウェアの綿密な連携による自律的な研究・開発ツールの開発」³⁻⁵⁾にも貢献している。

研究 DX の波は、基礎科学分野にとどまらず民間サービスとしても高い注目を集めている。例えばトヨタ自動車株式会社が展開する WAVEBASE⁶⁾、Preferred Computational Chemistry が提供する機械学習ポテンシャルプラットフォームである Matrantis⁷⁾、研究データマネジメントに対するソリューションを提供するランデフト⁸⁾のサービス等が挙げられる。しかしその一方で、研究・開発の現場はその高い専門性から極めてニッチな市場であることは否めず、広く普及させるには産学官が強く連携して、コミュニティ形成やサービス開発を行なっていく必要がある。その意味では、研究者も根幹をなすソフトウェアバックエンドを中心とした研究・開発にとどまらず、産業利用・普及を念頭に置いたフロントエンド開発に関わる知見も重要視されるものと考えられる。

本講演では、これまでに講演者が実施してきた研究の概要を紹介して材料科学における研究 DX の具体的なイメージを共有するとともに、民間サービスとの連携可能性や産学の垣根を超えた社会実装への課題についても議論する。

- 1) A. Yada, Nagata, Y. Ando, T. Matsumura, S. Ichinoseki, K. Sato, *Chem. Lett.* **2018**, 47, 284.
- 2) T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata, Y. Ando, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2019**, 20, 733.
- 3) R. Shimizu, S. Kobayashi, Y. Watanabe, Y. Ando, T. Hitosugi, *APL Materials* **2020**, 8, 111110.
- 4) JST 未来社会創造事業 共通基盤領域「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」
- 5) JST CREST 未踏物質探索 「CREST_2 次元ホウ素未踏マテリアルの創製と機能開拓」
- 6) <https://www.toyota.co.jp/wavebase/>
- 7) <https://matlantis.com/ja/>
- 8) <https://www.randeft.jp>

PROFILE

安藤 康伸（国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 主任研究員）

2012 年 東京大学大学院理学系研究科 物理学専攻博士後期課程修了。博士(理学)。同年 産業技術研究所 産総研特別研究員。2013 年 東京大学大学院 工学系研究科マテリアル工学専攻 助教を経て 2016 年より産業技術総合研究所 研究員。2018 年より同所 主任研究員。日本表面真空学会理事、同学会データ駆動表面科学研究部会 部会長。STAM methods 誌 Best Contribution Award 2021 受賞。専門は計算物質科学、マテリアルズ・インフォマティクス。