

# 産総研におけるマテリアルDXの取り組み

産業技術総合研究所 マテリアルDX研究センター  
三宅 隆

NATIONAL INSTITUTE OF  
ADVANCED  
INDUSTRIAL  
SCIENCE &  
TECHNOLOGY

- マテリアル研究開発へのデータ駆動手法の活用が産学官で浸透。
- 第一原理計算とAIを組み合わせた基盤モデル構築と物質探索が進展。ビッグテック企業が参入し、世界をリード。
- フィジカルAI、LLM、AIエージェント等の新たな技術の導入に大きな注目。
- 個別の課題に利用可能なデータが少ない。また秘匿性が高い。

Model	CPS ↑	Acc ↑	F1 ↑	DAF ↑	Prec ↑	MAE ↓	R <sup>2</sup> ↑	K <sub>SRME</sub> ↓	RMSD ↓	Training Set	Params	Targets	Date Added
PET-OAM-XL	0.898	0.977	0.924	6.075	0.929	0.019	0.864	0.119	0.060	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	730M	EFS <sub>0</sub>	2026-01-10
eSEN-30M-OAM	0.888	0.977	0.925	6.069	0.928	0.018	0.866	0.170	0.061	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+sAlex	30.2M	EFS <sub>0</sub>	2025-03-17
EquiFlash	0.888	0.975	0.919	5.983	0.915	0.019	0.871	0.158	0.060	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+sAlex	28.7M	EFS <sub>0</sub>	2025-06-23
Nequip-OAM-XL	0.886	0.971	0.906	5.869	0.897	0.020	0.872	0.125	0.063	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	32.1M	EFS <sub>0</sub>	2025-11-30
MatRIS-10M-OAM	0.877	0.976	0.921	6.039	0.923	0.019	0.871	0.218	0.060	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	10.4M	EFS <sub>0</sub> M	2025-10-29
SevenNet-Omni-112	0.873	0.971	0.906	5.954	0.910	0.021	0.868	0.192	0.062	243M COSMOSDataset	54.9M	EFS <sub>0</sub>	2026-01-12
Nequip-OAM-L	0.870	0.967	0.893	5.823	0.890	0.022	0.865	0.166	0.065	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	9.6M	EFS <sub>0</sub>	2025-09-08
TACE-v1-OAM-M	0.867	0.965	0.889	5.749	0.879	0.022	0.865	0.173	0.065	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	18.8M	EFS <sub>0</sub>	2026-01-06
GRACE-2L-OAM-L	0.865	0.964	0.883	5.840	0.893	0.022	0.862	0.169	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	26.4M	EFS <sub>0</sub>	2025-09-09
ORB v3	0.860	0.971	0.905	5.912	0.904	0.024	0.821	0.210	0.075	6.47M (133M) MPtrj+Alex+OMat24	25.5M	EFS <sub>0</sub>	2025-04-05
Allegro-OAM-L	0.840	0.966	0.895	5.674	0.867	0.022	0.868	0.319	0.065	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	9.7M	EFS <sub>0</sub>	2025-09-08
GRACE-2L-OAM	0.837	0.963	0.880	5.774	0.883	0.023	0.862	0.294	0.067	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj	12.6M	EFS <sub>0</sub>	2025-02-06
DPA-3.1-3M-FT	0.802	0.963	0.884	5.667	0.866	0.023	0.869	0.469	0.069	163M OpenLAM	3.27M	EFS <sub>0</sub>	2025-06-05
eSEN-30M-MP	0.797	0.946	0.831	5.260	0.804	0.033	0.822	0.340	0.075	146k (1.58M) MPtrj	30.1M	EFS <sub>0</sub>	2025-03-17
MACE-MPA-0	0.795	0.954	0.852	5.582	0.853	0.028	0.842	0.412	0.073	3.37M (12M) MPtrj+sAlex	9.06M	EFS <sub>0</sub>	2024-12-09



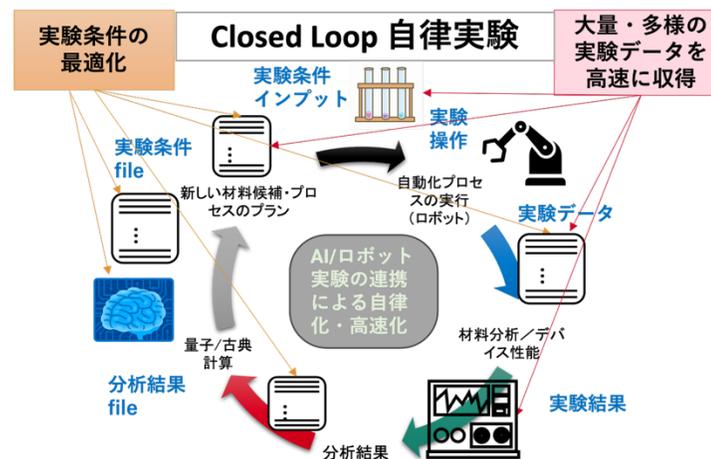
第一原理計算データに基づいた機械学習ポテンシャルのベンチマーク  
(Matbench Discovery)  
<https://matbench-discovery.materialsproject.org>

Cederグループ (Berkeley) の自動実験システムA-lab  
(<https://ceder.berkeley.edu/contact-us/openings/>)

- NEDO・超超プロジェクト(2016-2022年度)でマテリアルズ・インフォマティクスを推進。有機系機能性材料を対象とし、試作回数・開発期間を従来比1/20に短縮する基盤技術を開発。
- 企業の製造プロセスの高度化を目的に、3カ所の産総研地域センター（つくば、中部、中国）を拠点とするマテリアル・プロセスイノベーション（MPI）プラットフォームを構築。
- ファインセラミックスのプロセス・インフォマティクス技術確立するため、NEDO・ファインセラミックスの革新製造プロセスPJ（2022-2026年度）を実施中。
- マルチモーダルAIや「AUTO実験工房」など、高度AIや自動・自律実験の研究開発を組織的に推進。

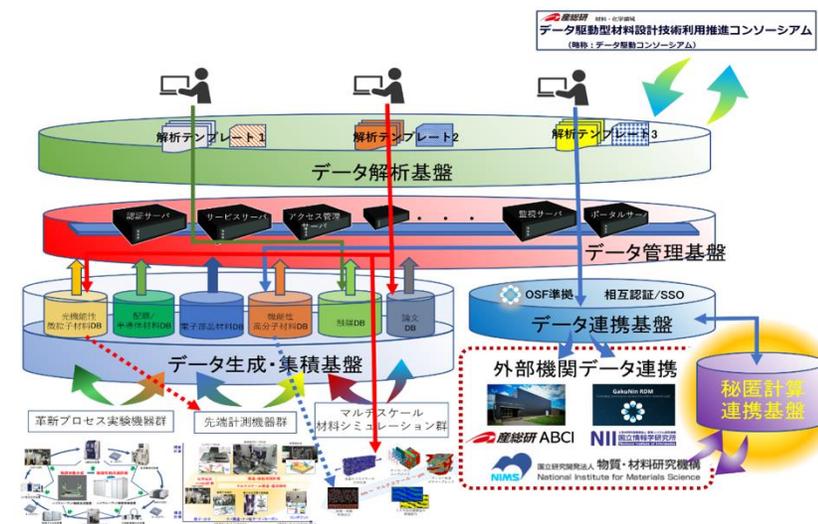
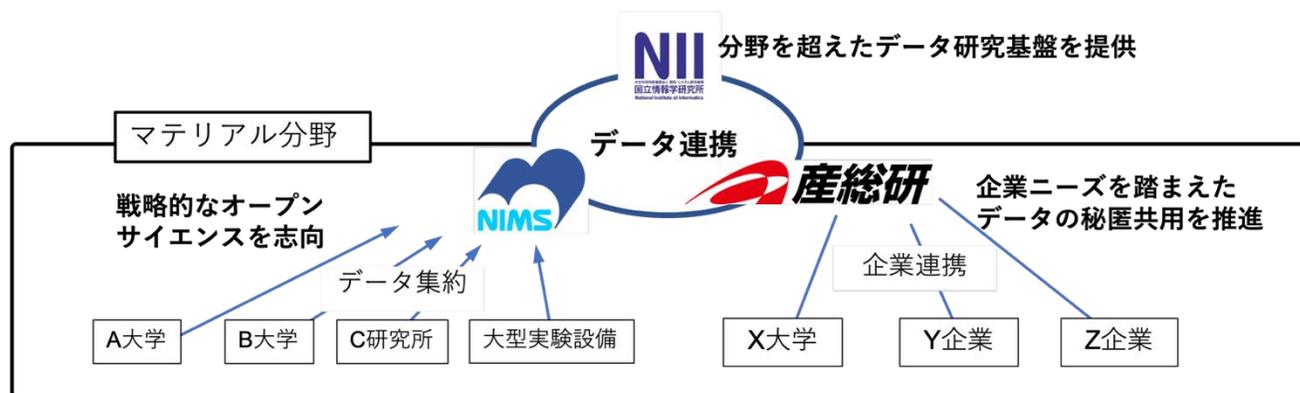


実験とデジタル技術を融合し、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料予測からプロセス・インフォマティクスによる製造プロセス設計・最適化まで対応。



AUTO実験工房では、自律実験のためのモジュール開発、装置間の連携、データの循環、オーケストレーションシステムの共通化を推進。

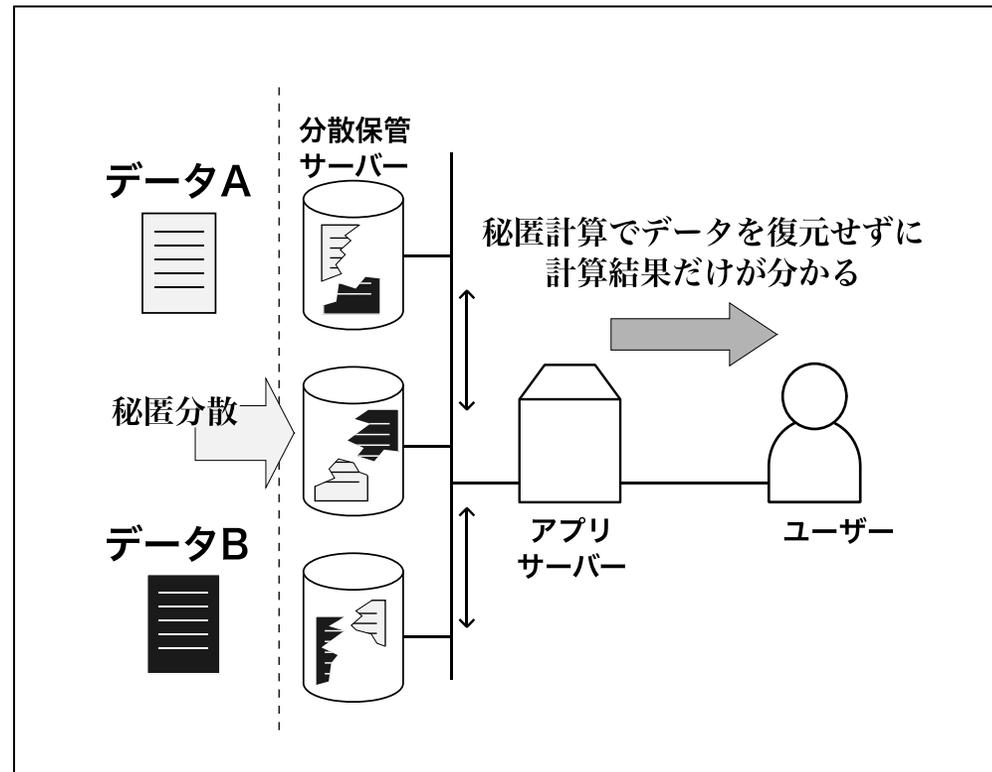
- 素材群ごとに大別してデータを構造化したAIST Materials Gateデータプラットフォームを開発。これに加えて、計算シミュレータ、実験装置、AI利用技術を含めた材料設計プラットフォームを構築。
- 実材料開発に必要なオンデマンドデータの創出技術や秘匿共用を実現するための基盤技術とインフラ整備を推進。



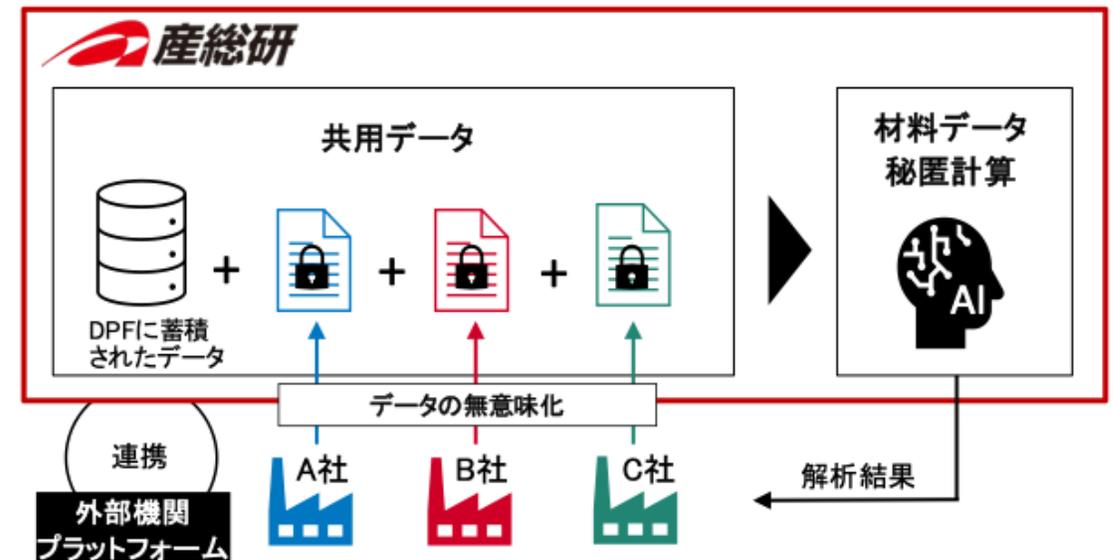
マテリアル分野のデータ中核拠点としてプラットフォーム構築を推進

産総研が開発する材料設計プラットフォーム

- データの中身を隠したまま計算する秘匿計算（秘密計算）が注目を集めている。金融・医療分野などで応用例が報告されている。科学技術計算の研究開発も進展し、社会実装に近づいている。
- 産総研は秘密分散方式に基づいた材料データ秘匿計算の社会実装に向けて基盤技術を開発。



秘密分散方式による秘匿計算。T.Fukazawa et al., J.Phys.Soc.Jpn. 94, 013801(2025)の図を改変。



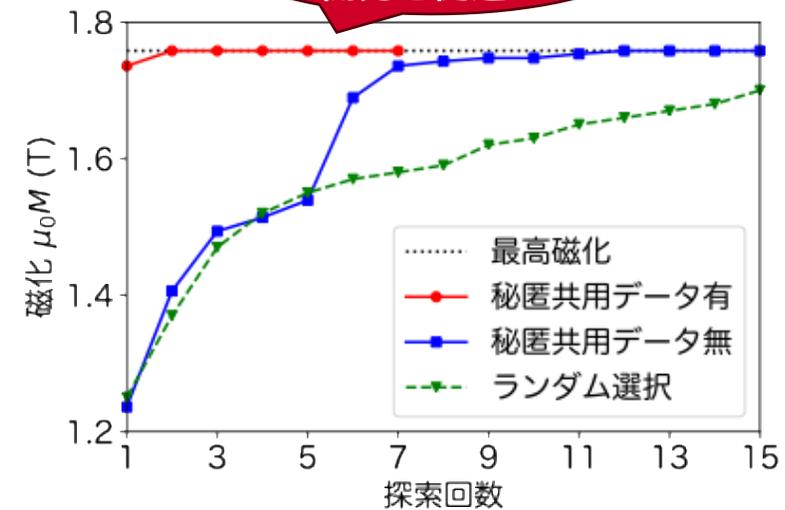
材料データ秘匿計算の社会実装イメージ。自社データの中身を隠したまま他社データと連携し、AIを活用した材料設計を行うことができる。

- 目的変数を秘匿する秘匿ベイズ最適化のアプリを開発し、希土類磁石化合物の組成最適化に応用。さらに、目的変数に加えて説明変数も秘匿する完全秘匿ベイズ最適化技術を開発。
- 材料データ秘匿計算の社会実装試験のため、産総研、NIMSなど複数機関にまたがる秘匿計算のためのテストベッドを構築。
- データ駆動コンソーシアムにおいて産業界への成果普及を実施。

データ共有で  
材料探索の高速  
開発を促進！

## 適用事例) 材料秘匿ベイズ最適化の性能評価

- 132個の候補からスコア（今回は磁化）の大きいものを探すタスクを設定（今回はスコアの計算に第一原理計算の利用）
- **データ秘匿共有のシナリオ**
  - A社、B社からそれぞれ3点の秘匿データを共有してもらえたと仮定（スコアは高くない）
  - 提供データをA社20通り、B社20通りの計400通りの場合を考慮し、統計的な性能評価を実施
- 秘匿共有データありシナリオでは、**全ての場合で**、8回以内の探索で最高性能の材料を発見



秘匿ベイズ最適化による組成最適化の応用例。それぞれの線は90%の試行でデータがこれより高いスコアを得たことを表す。  
T.Fukazawa et al., J.Phys.Soc.Jpn. **94**, 013801(2025)

- 産総研は、データ駆動型材料開発を推進し、マテリアルズ・インフォマティクスとプロセス・インフォマティクスの両方に取り組んでいる。
- マルチモーダルAI等の高度AI技術や自動・自律実験の研究開発を組織的に行なっている。
- データプラットフォームの構築と、データ創出のための計算シミュレータ等やデータ解析のためのAI利用技術の開発を進めている。
- データの秘匿共用のため、秘密分散方式に基づいた秘匿計算の基盤技術開発とインフラ構築を推進している。

	秘匿技術	課題	展望	組織
準同型暗号	<ul style="list-style-type: none"> <li>データを暗号化したまま処理。</li> <li>結果のみ復号化。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>計算コストが膨大。</li> <li>材料データの処理演算は困難</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>基礎研究段階。</li> <li>基盤研究として継続。</li> </ul>	(開発) AIST、東京大学、早稲田大学、NICT等
秘密分散方式 Multi-party computing	<ul style="list-style-type: none"> <li>データをソフトウェア的に無意味化。</li> <li>無意味化されたデータを汎用計算機上で処理。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>認証等、周辺インフラ技術整備。</li> <li>成果普及。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>社会実装の試験段階。</li> <li>基盤技術とインフラの高度化を予定。</li> </ul>	(開発) AIST、NTT、Meta、Google等 (利用) AIST、NIMS、レゾナック等
Trusted Execution Environment (TEE)	<ul style="list-style-type: none"> <li>データ処理領域がハードベースでセキュアに隔離化。</li> <li>データ処理は平文で実行。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>安全性 (root of trust) を特定企業 (ハード提供社) に依存。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>応用展開段階。</li> <li>小規模データでは高速計算が可能。直近で応用事例が多く出る見込み。</li> </ul>	(開発) NEC、Google、Intel、AMD等 (利用) NEC、旭化成、日本ゼオン等