

材料イノベーションを加速する オープンサイエンスの動向

独立行政法人物質・材料研究機構
先端的共通技術部門 部門長

文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業
微細構造解析プラットフォーム 運営責任者

藤田大介

内容

- 材料イノベーションを牽引するオープンサイエンス
- マテリアルズインフォマティクス的重要性
- オープンなマテリアルズデータベースの構築
- オープンサイエンスの場としてのプラットフォーム
- オープンサイエンスの場としての国際標準化
- まとめと課題

材料イノベーションを牽引するオープンサイエンス

オープンアクセス Open Access

Database

Open Materials Database

ex. NIMS MatNavi

Open Source

Open Materials Simulation Codes

ex. RSS21 PHASE



オープンサイエンス Open Science

Open Innovation



Open Platform

Open Data

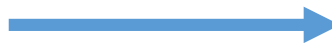


ex. TIANano



Nanotechnology Platform

Data Journal



Materials Informatics

Big Data

Global Collaboration

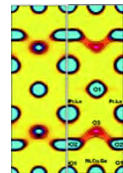
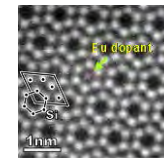
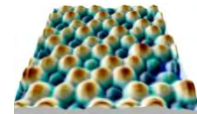
VAMAS / ISO

材料イノベーションの鍵：先端計測とオープンサイエンス

先進材料のための世界トップレベル計測技術

コア技術

- From Topmost Surface to Internal Bulk, **Depth-sensitive Analysis**
- From Nano- to Macroscopic, **Multi-scale Analysis**
- From Amorphous to Mono-crystal, **Versatile Atomistic Analysis**
- Ultrafast Femto-second Resolution **Dynamic Analysis**
- Electronic and Spin **State Characterization**
- In-situ Nanoscale Analysis under **Controlled Environments**....



ターゲット

計算科学・先進材料プロセス・インフォマティクス
Plan-Do-Seeサイクルの構築

科学と社会への貢献

先端計測技術をコアとするオープンプラットフォーム@NIMS

国際標準化の国内拠点



産学官の研究連携拠点



先端ナノ計測施設の外部共用拠点



コアコンピタンスに立脚する先端計測

マテリアルズインフォマティクスの重要性 技術革命の流れ

技術開発の歴史とは？

→人間の能力を代替し強化する技術の歴史

産業革命(18世紀後半～19世紀前半)
エンジンや機械の発明
→人間の腕力・脚力に代わるもの



IT革命(20世紀後半)
コンピューターや通信技術の発達
→人間の頭脳・言語力に代わるもの



センシング革命(21世紀以降)
センサーや計測器の発達とITとの融合
→人間の五感に代わるもの

マテリアルズインフォマティクス的重要性 ITの限界

IT革命(20世紀後半)

コンピューター・通信技術の発達→人間の頭脳・言語力の代替

問題点



コンピューターの性能が上がっても入力する情報量が限定されていると、正しい解は得られない。

対策



少ない情報量を補うためにモデルを立てて現象を理解。

モデルに依存した研究開発。

限界



モデルが間違っていると誤った解を得る。

モデルを越えた現象の理解ができない。

モデルの有効性は、発案者の洞察能力や経験に強く依存する。

モデル依存からモデルフリーの技術開発へ

少ない情報量を補うためにモデルを立てて現象を理解。
モデルに依存した研究開発。



情報量を増大させ、モデルに頼らない研究開発へ。

- ・網羅的な現象の理解。
- ・開発者の洞察能力や経験にあまり依存しない開発。



情報量の増大には、センシング・計測技術の発達が不可欠。

センシング・計測技術の発達とは、センシング・計測技術の高速化、高機能化、自動化、標準化、ビッグデータ化を意味する。

技術革命の波及効果と課題

	波及効果	課題
産業革命 (エンジンや機械の発明)	<ul style="list-style-type: none"> ・商品生産性の向上、農業生産性の向上 ・巨大構造物の建設 ・高速移動体(鉄道、車など)の実現 ・エネルギー物質の生産・貯蔵・運搬・消費のサイクルを実現 	<ul style="list-style-type: none"> ・大量生産・大量消費による資源枯渇や環境破壊の問題 ・試行錯誤による技術開発(多くの事故を経て技術が発展する)
IT革命 (コンピューターや通信技術の発達)	<ul style="list-style-type: none"> ・機械の最適設計 ・商品の最適生産・最適輸送 ・技術伝達の効率化(発展途上国への技術移転を容易にした) ・金融工学の発達 ・インターネットの普及 	<ul style="list-style-type: none"> ・最適化の作業がモデルに基づくため、最適化の解がモデルに依存した局所解に過ぎない。(例:金融工学の失敗、実用後に発覚する機械の基本設計の誤り、想定外の事象が起こったときの事故)
センシング革命 (センサーや計測器の発達とITとの融合)	<ul style="list-style-type: none"> ・モデルに縛られない科学技術開発 → 網羅的で見落としを激減させる科学技術開発 → 開発者の能力以上の開発を可能にする ・資源やエネルギーの消費の最小化 ・巨大構造物の疲労診断、トラブル診断 ・高速移動体のフェイルセーフ機能の強化 ・医療における未病状態の検知と早期治療 ・自然災害および人工災害における災害の前駆現象の検知と巨大災害の発生予測 → 国土強靱化 ・社会科学研究的精度の飛躍的な向上 ・防犯技術の進歩 	<ul style="list-style-type: none"> ・ビッグデータ技術が不可欠。 ・大量の計測データを合理的に解析するための高速データ処理アルゴリズムの開発が不可欠。 ・技術伝達の効率化が更に加速し、後進国による技術のキャッチアップが容易になるため、先導開発国としてはOPEN戦略/CLOSE戦略の使い分けが必要。

材料開発の課題を克服するためのマテリアルズインフォマティクス

現在の材料開発は、

- ・モデルや経験に依存した多くの試行錯誤を必要とする。
- ・多くの試行錯誤を経てもなお網羅的な材料探索が困難。

帰結

材料開発のイノベーションをセレンディピティに期待する

発想の転換

セレンディピティに頼らない系統的な材料探索へ
モデルに依存しない網羅的な材料探索へ

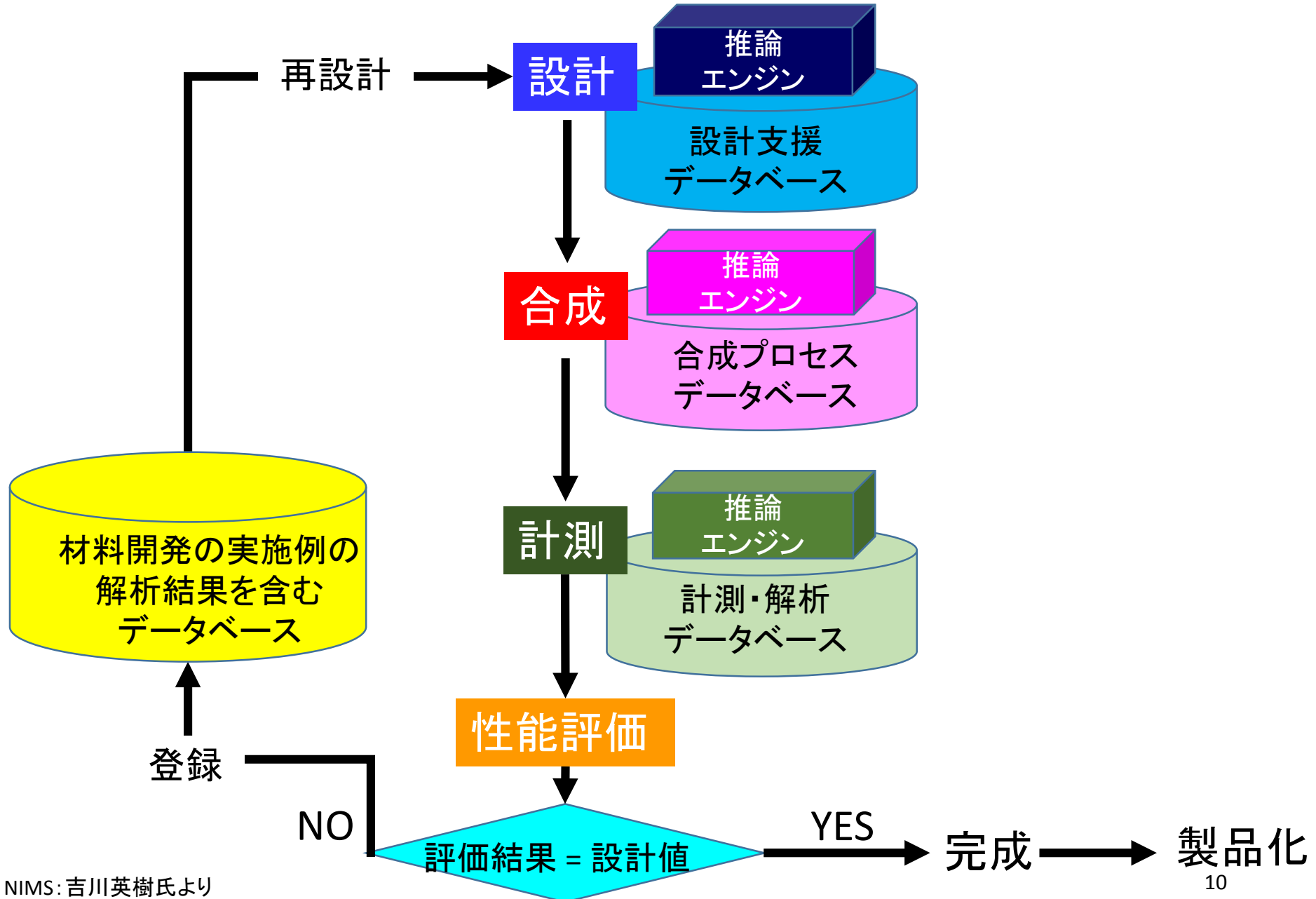
手段

材料開発におけるIT技術とセンシング技術の融合

マテリアルズインフォマティクス

材料特性や材料合成プロセスを網羅的に予測する自動理論計算技術とその予測の元に合成された多様な材料が予測とどのように異なるかを網羅的にかつ高度に計測するセンシング技術の融合

材料開発サイクルとマテリアルズインフォマティクス



オープンなマテリアルズデータベースの構築(米国)


the WHITE HOUSE PRESIDENT BARACK OBAMA

Contact Us | Get Email Updates

BRIEFING ROOM | ISSUES | THE ADMINISTRATION | PARTICIPATE | 1600 PENN

Search

Home • About the Materials Genome Initiative




Materials Genome Initiative

About | Goals | Examples | News & Announcements | Federal Programs | External Stakeholder Activities | Contact Us

To help businesses discover, develop, and deploy new materials twice as fast, we're launching what we call the Materials Genome Initiative. The invention of silicon circuits and lithium-ion batteries made computers and iPods and iPads possible -- but it took years to get those technologies from the drawing board to the marketplace. We can do it faster.

— President Obama, June 2011 at Carnegie Mellon University



About the Materials Genome Initiative

The Materials Genome Initiative* is a multi-agency initiative designed to create a new era of policy, resources, and infrastructure that support U.S. institutions in the effort to discover, manufacture, and deploy advanced materials twice as fast, at a fraction of the cost.

MATERIALS GENOME
INITIATIVE

Download the MGI White Paper