

数学協働プログラムワークショップ

MI²（情報統合型物質・材料開発）と数学連携による新展開

日時：2016年02月26日（金） 9時50分～18時

場所：JST 東京本部 B1 ホール

http://www.jst.go.jp/koutsu_map.html

【趣旨・目的】

物質・材料研究における効率化や、より系統的で、統一的な研究の進め方へと変革を実現するために、情報・数理の手法を駆使して、蓄積されたデータを有効に活用することを旨としたマテリアルズ・インフォマティクス（以後は情報統合型物質・材料研究（：MI²と略記）と言う）の推進が世界的な潮流となっている。

情報理論や数学の手法はこれまでの物質・材料研究の方法に新しい展開をもたらすことが期待される。しかし、実際にそれらの汎用手法を具体的な物質・材料の課題に適用するためには、物質・材料研究者の側から言えば、情報理論や数学の手法が何を可能とするのかを理解する必要があり、情報・数学の側から言えば、具体的な課題の目的や問題点を理解する必要がある。即ち、異なる分野の研究者間の情報交流、意見交換の場を設定することが求められる。

本ワークショップは、今後のMI²と数学との具体的な連携の可能性を開拓・追求するため、「情報統合型研究交流会」を主催しているMI²Iプロジェクト（物質・材料研究機構、科学技術振興機構）を中心に、文部科学省委託事業 数学協働プログラム（受託機関：統計数理研究所）、北陸先端科学技術大学院大学、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」とも協力し、異なる分野の研究者間の情報交流・意見交換の場として開催する。

【プログラム】

9:50 – 主旨説明 寺倉清之（物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点）

10:00 – ビッグデータ応用の展開と課題：ガンの個別化医療と都市除排雪への応用を事例として 田中 譲（北海道大学 知識メディア研究室）

10:40 – 簡便エミュレーションによる実験計画のスマート化
樋口知之（統計数理研究所）

11:20 – Natural processes and scientific reasoning R. Vestergaard

12:00 – 製造プロセスにおける数理的研究の現状と、数理科学と物質・材料の連携の展開について 中川淳一（新日鐵住金先端技術研究所 数理科学研究部）

昼食休憩 12:40 – 13:40

- 13:40 – 大規模数値シミュレーションによるものづくりの革新 ～京の成果と今後の展開～ 加藤千幸（東京大学生産技術研究所）
- 14:20 – 数学・材料科学連携による構造・機能・プロセスの理解への挑戦
小谷元子（東北大学 AIMR）
- 15:00 – 数値解析学から見た計算手法の高精度化・高効率化の取組み、および物質・材料との連携へ向けた展開 田上大助（九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所）
- 休憩 15:40 – 15:55
- 15:55 – マテリアルズ・インフォマティクス：分野の特色と課題
Dam Hieu Chi（北陸先端科学技術大学院大学）
- 16:35 – 人工知能技術の発展と最近の動向
麻生英樹（産業技術総合研究所 人工知能研究センター）
- 17:15 – 材料科学分野の数理との連携に関わる動向および潜在的可能性
松江 要（統計数理研究所 統計思考院 / 数学協働プログラム）
- 17:40 – まとめ 伊藤 聡（JST CRDS）

主催：情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

共催：科学技術振興機構（JST）

後援：統計数理研究所（※）

※本ワークショップは、文部科学省委託事業 数学協働プログラム（受託機関：統計数理研究所）に基づき企画・開催されています。

協賛：北陸先端科学技術大学院大学

*本ワークショップは、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」からの協力も得ています。

連絡先・問い合わせ先：

物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点

mi2i-adm@ml.nims.go.jp

ご案内：

<http://www.nims.go.jp/research/MII-I/event/20160226.html>

【趣旨・目的】

全文

物質・材料研究が扱う課題を、物質・材料探索から企業での適用研究開発までを次のように4つのステージに分類することができる。

課題はSTAGEで異なる

	STAGE I 新物質創成 <small>例) C₆₀</small>	STAGE II 物性極値化 <small>Materials Genome</small>	STAGE III 材料最適化 <small>Integrated Computational Materials Engineering</small>	STAGE IV 適用研究開発
内容	従来の特性限界超物質探索	結晶構造あり 元素置換 ドープ 極値を探す	材料化 プロセス・組織構造 の最適化	システム設計 試作実証 信頼性確保
ポイント	コンセプトひらめき 実験発見 Abduction	傾向予測と実験 Deduction Induction	実験検証 特性トレードオフ克服 Induction主体	Virtual Prototype シミュレーション Deduction
データ共有	Unknown OPEN 知識	OPEN 一部CLOSE 物質データベース	特性CLOSE/OPEN プロセスCLOSE	固有材料CLOSE 一般材料OPEN
MIの期待	逆問題 特性→構造予測	結晶構造・特性相関 QSPR	特性・組織相関 プロセス・組織相関	短期間化 (時間、費用)
課題	方法論研究	事例研究 手法選択	組織構造データ化 データ形式統一 (メタデータ)	各種シミュレーション

レシピ+支配方程式

出口

それぞれのステージの研究開発において、これまでもより有効で効率的な研究手法の探索が行われてきたが、世界における研究の進展状況から判断して、我国での研究開発の一層の効率化が強く求められている。そのためには経験と勘に多くを頼る従来のやり方から、より系統的で、統一的な研究の進め方へと変革しなければならない。また、異なるステージの間では、扱う対象が大きく異なっており、空間スケール、時間スケールも大きく異なるため、異なるステージ間の交流が困難であることが、基盤研究と産業との間の情報交流を阻害する原因ともなっている。物質・材料研究におけるこうした困難を打開するために、情報・数理の手法を駆使して、蓄積されたデータを有効に活用することを目指したマテリアルズ・インフォマティクス（以後は情報統合型物質・材料研究（：MI²と略記）と言う）の推進が世界的な潮流となっている。

物質・材料研究では、従来の実験・理論・計算科学が強力な研究の手段であったため、殆どの研究者は情報理論や数学における進歩に注意を払わなかった。この状況は、MI²の概念が広まるにつれて大きく変わろうとしている。情報理論や数学の手法はこれまでの物質・材料研究の方法に新しい展開をもたらすだけでなく、その汎用性により4つのステージの共通基盤の役割を果たすことにより、異なるステージ間の交流を活性化することも期待される。しかし、実際にそれらの汎用手法を具体的な物質・材料の課題に適用するため

には、物質・材料研究者の側から言えば、情報理論や数学の手法が何を可能とするのかを理解する必要があり、情報・数学の側から言えば、具体的な課題の目的や問題点を理解する必要がある。即ち、異なる分野の研究者間の情報交流、意見交換の場を設定することが求められる。

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI²I）では、上述のような異分野間の情報交流を促進するために、「情報統合型研究交流会」と称するセミナーシリーズを頻繁に開催している。その内で、プロジェクト内に限らず、一般に広く公開するものを、年に数回開催する計画である。ただし、それらはMI²Iプロジェクトのそれぞれの時点でのスコープの枠内で行われる。本ワークショップ（WS）はそれらに対比すると、「一步先を見た」ものであり、今後の具体的な連携の可能性を開拓するためと位置付けている。本WSで得られる知見を吟味し、プロジェクトとの具体的な連携の可能性を更に追求するため、個別にMI²Iプロジェクト内公開の「情報統合型研究交流会」を活用して継続的に情報交流を行っていく。また、それらの情報交流の進展状況に応じて、一般公開版として講演会を開くことも検討する。

・解決すべき課題

MI²Iプロジェクトでは、以下に示すようにエネルギー問題の解決に重点をおき、社会的に重要な具体的な課題を設定している。

蓄電池（全固体・多価イオン）材料、磁石材料、スピントロニクス材料、伝熱制御材料、熱電変換材料

また、これらの具体的な課題の遂行を支援するとともに、物質・材料研究一般への適用も視野に入れて、情報理論、数学の考え方や方法を取り入れて、MI²の可能性を探求する活動も行っている。しかし、現在のプロジェクトの体制でカバーできる範囲は自ずと限定的であるため、プロジェクト外も含めたより広い研究コミュニティとの連携を図ることによって、情報統合型研究の物質・材料研究における可能性をより拡大し、深化させたい。数学協働における解決すべき課題は、次の2点である。

- 1) 既に設定されている課題を遂行するための、より有力な考え方や方法を探る。
- 2) 現時点でのプロジェクトのターゲットは「趣旨・目的」の冒頭に示したステージⅠから、せいぜいステージⅡの一部に絞られている。これを、ステージⅢに繋ぎ、ステージⅣへ進化させていくために有効な新研究要素を探る。

・考えられる数学・数理科学的アプローチ

- 不均質組織構造の概念化手法
- 統計的学習の新しい数理
- 逆問題アルゴリズム
- 数理論理学によるプロセスシミュレーション

具体的な研究要素、講演者らが所属する機関との関連を明記すると以下ようになる：

1. パーシステントホモロジー ガラス状態や液体状態の特徴を記述するための中距離秩序を表す手法（東北大）
2. 調和写像 物質の幾何学的特徴を統一的に記述するのに有効（東北大）
3. 機械学習の種々のアルゴリズム（統数研、産総研、九大）
4. 人工知能（産総研、国立情報学研究所）
5. System of systems, 統合プラットフォーム（北大）
6. 微分幾何 構造材料の種々のスケールでの画像データの解析への利用
7. 数理論理学 基礎方程式のない系のプロセスシミュレーションへの応用
8. パターン形成理論
8. データ同化、エミュレーション（統数研）
9. 大規模数値シミュレーション、数理モデル（東大生産研、九大）
10. 逆問題 データ（結果）をもとに観測できない物理量（原因）の予測（新日鐵住金）