



大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

統計数理研究所

The Institute of Statistical Mathematics

Data Science Center for Creative Design and Manufacturing

ものづくりデータ科学研究センター

2017年7月1日 発足

ものづくり＝ 創造的設計と製造

■ 過去10年でデータ科学を取り巻く環境は一変

- ビッグデータ解析やAI技術に対する社会からの期待
- データ科学自体が大きな進化（深層学習など）
- 今後このような動きは益々加速

■ 統計数理研究所の役割

- データ科学の学術基盤
- 戦略的応用分野“ブルーオーシャン”の開拓とイノベーションの実現
- そのひとつが「ものづくり」

データ科学がもたらす「ものづくり」革新 - 創造的設計と製造 -

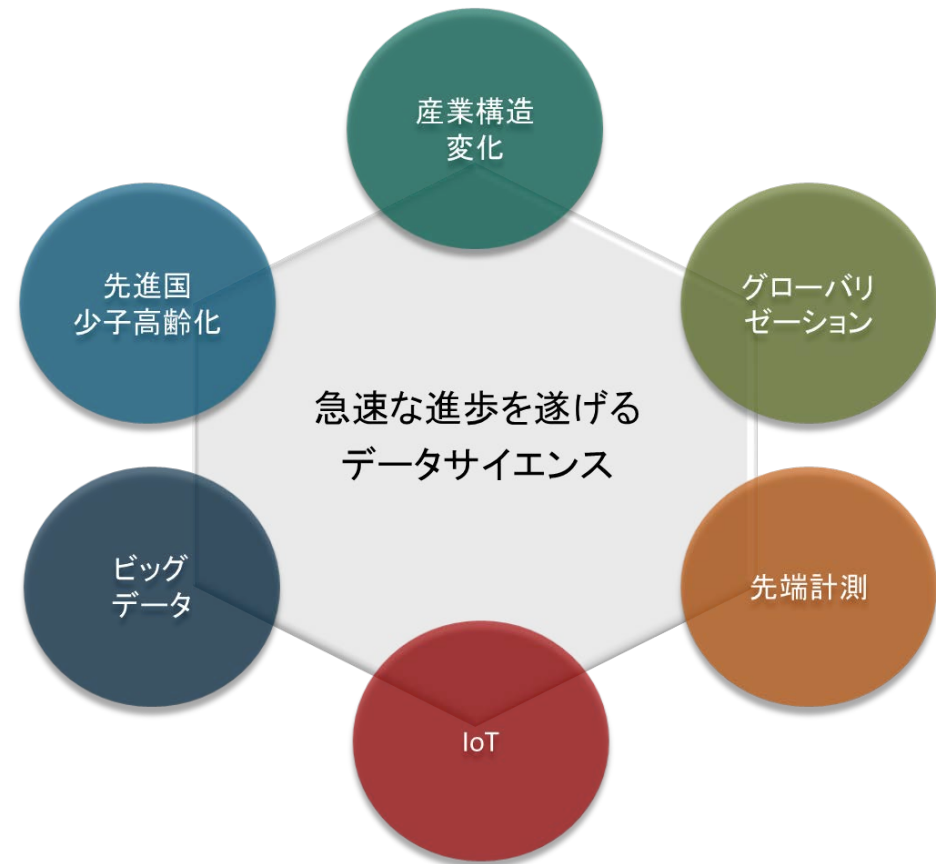
(2017年6月15日開催 オープンハウス連携イベントより)

欧米・アジア諸国：データ科学やAIを
中心に据えた国家成長戦略

個の力が切り拓くデータ科学は、パワー
ゲームに対抗する有効な手段

データ科学がもたらす二つの可能性

- スマート化（コストの削減）
- 他の追従を許さない革新（創造）



ミッション定義

- ものづくりデータ科学の学術基盤と革新的アルゴリズムの創出
- 中長期的構想に基づくグランドチャレンジ型研究を中心に
- データ科学のユニークな観点から、次世代ものづくりの在り方を示す
- 産学の価値共創による“実践・実証”。これにより“データ駆動型ものづくり”の社会実装を加速

統計数理研究所が有する「創造的設計と製造のデータ科学」を結集

機械学習

最適化

不確実性下
の意思決定

データ同化

HPC

製造，バイオ，マテリアル，化学，エネルギー等

センターの特色

- 中長期的ビジョンに基づくグランドチャレンジ型研究の中心に

産学から多数の研究者が参画

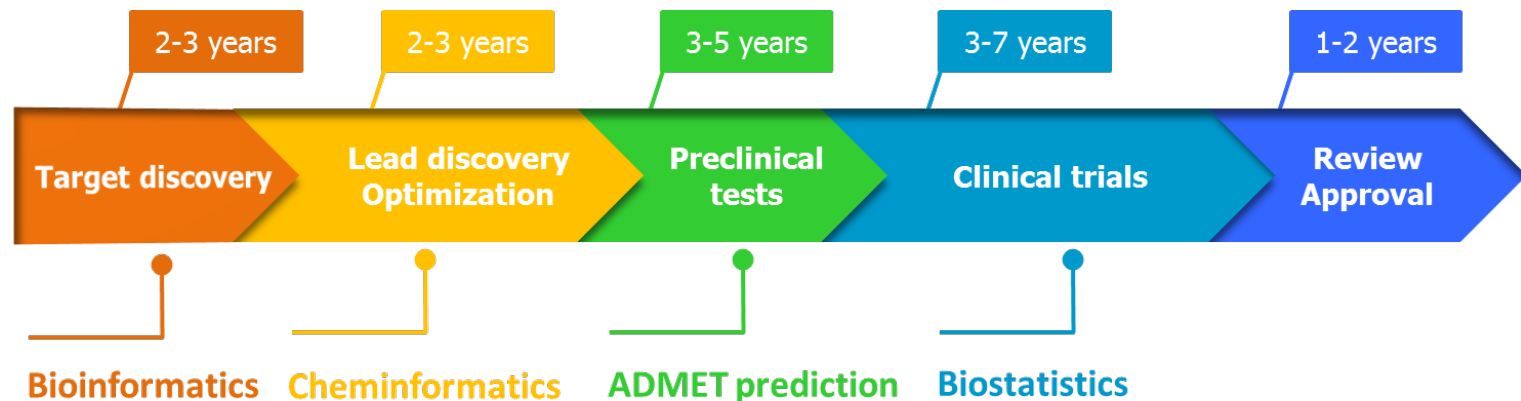
グランドチャレンジの立案から研究体制の構築（産学の価値共創）

- 「超」学際性

ものづくりは“超学際領域”：データ科学単独では“革新的なものづくり”は実現不可能
革新を起こすには、利用可能なありとあらゆる技術を投入する必要がある

統計数理研究所のカルチャーが強みに（世界的に極めてユニークな研究拠点）

【創薬の場合】 バイオインフォマティクス, ケモインフォマティクス, 臨床統計, 実験計画, 製造のデータ科学, 計算科学(シミュレーション)など, 幅広い分野の専門家を有する.



“ALL-IN-ONE DATA SCIENCE RESEARCH INSTITUTE”

多彩かつ世界最高峰のデータ科学が集結

産学連携による“次世代ものづくり”の共創の場

センター長：吉田 亮（モデリング 准教授）

副センター長：藤澤 洋徳（数理・推論 教授）

福水 健次（数理・推論 教授）

武田 朗子（数理・推論 教授）

持橋 大地（数理・推論 准教授）

中野 慎也（モデリング 准教授）

Stephen Wu（モデリング 助教）

Guillaume Lambard（データ同化研究開発センター 特任助教）

山田 寛尚（データ同化研究開発センター 特任研究員）

特任研究員

技術補佐員

機械学習

最適化

位相データ解析

ベイズ推論

Uncertainty Quantification

時空間データ解析

データ同化

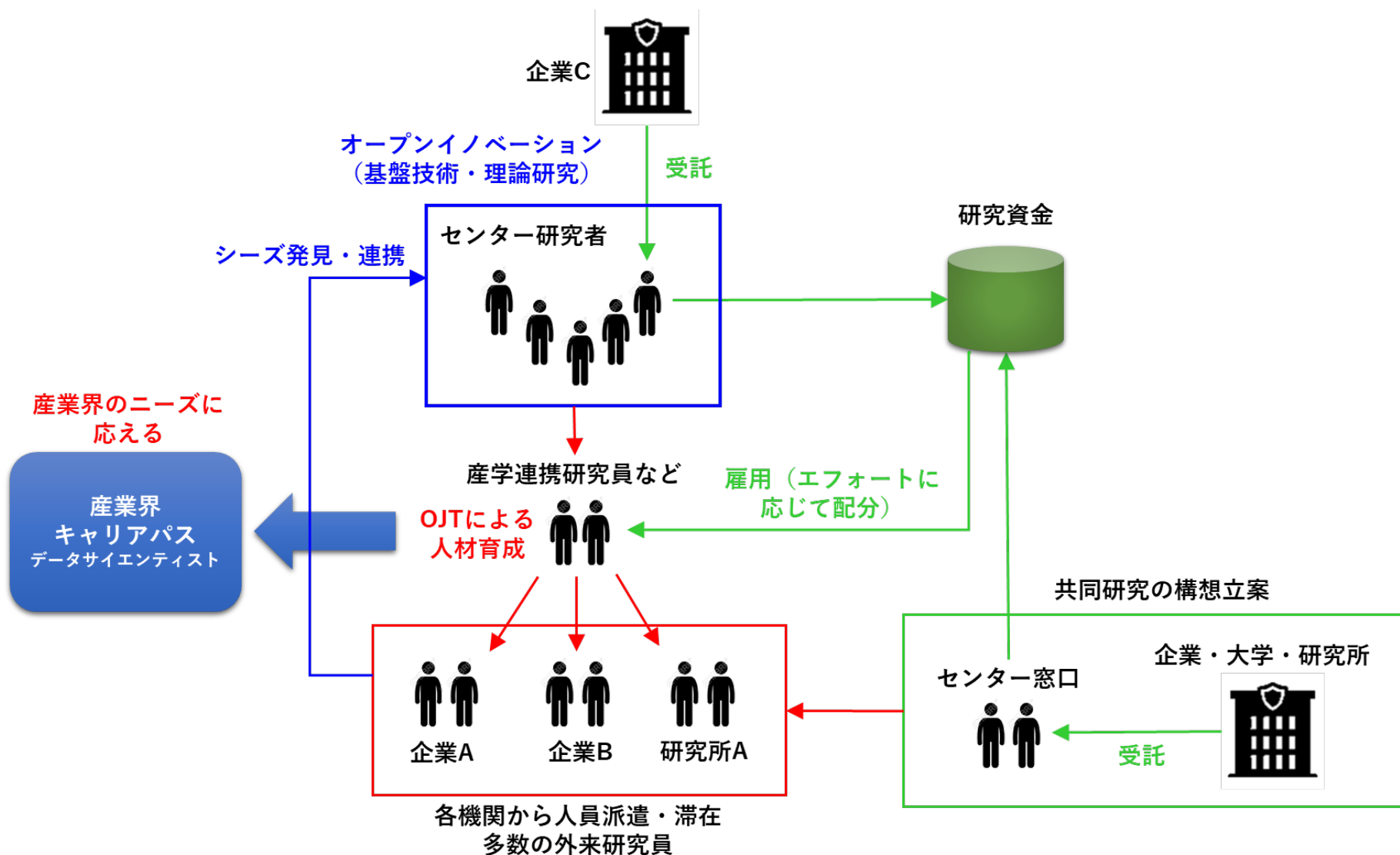
物理シミュレーション

HPC

材料インフォマティクス



共同研究の仕組み：イメージ図





大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

統計数理研究所

The Institute of Statistical Mathematics

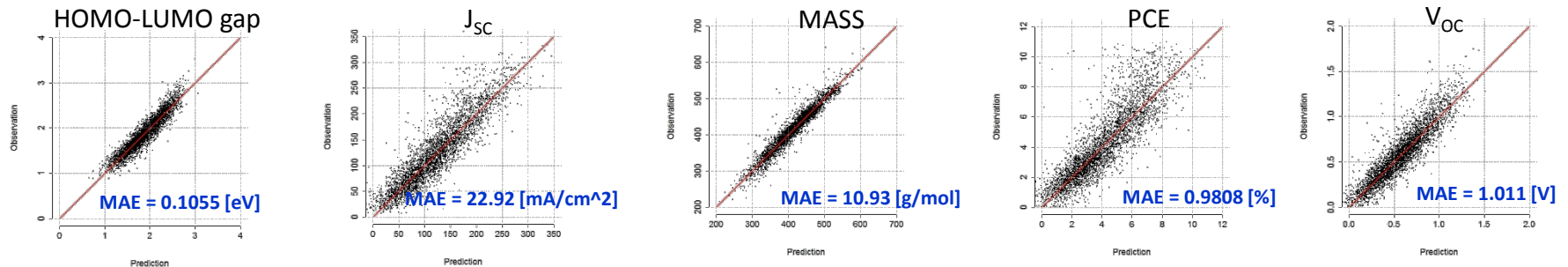
Data Science Driven Innovative Materials Design

事例：材料研究における取組み

“スマート化” 実験やシミュレーションを加速

これまでの材料開発では、研究者の経験や勘に基づく材料設計、大規模シミュレーションと実験による物性評価、設計指針の見直しというサイクルが延々と繰り返され、一つの物質の発見から実用化までに膨大な時間と研究開発費が費やされてきました。これに対し、近年、実験やシミュレーションを大量データから導かれた統計モデルに代替させようという試みが行われています。これが実現すれば、超高速な物性評価試験を実施することができます。これまでは費用と時間の制約上、ごく少数の候補材料が評価対象でした。今後、データ科学によるスマートシミュレーションで大量の候補材料を高速にスクリーニングできる時代が来れば、多くの埋蔵物質が発掘されることが期待されます。ものづくりの様々な領域でこのようなアプローチを実装・実践し、研究開発期間の大幅な短縮と発見の機会費用の低下を実現する。これがデータ科学によるスマート化の基本コンセプトです。

機械学習による物性予測モデルの開発（例：有機太陽電池の新材料探索）



従来の材料性能の評価

- 実験と大規模シミュレーション
- 大量の「埋蔵物質」



マテリアルズインフォマティクスでは

- 超高速物性予測モデル（機械学習）
- 網羅的スクリーニングが可能に

スマート化がもたらす莫大な価値

ものづくりのあらゆる領域に“データ科学の予測モデルと意思決定”を
そのような社会が実現することを目指す

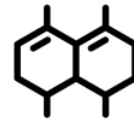
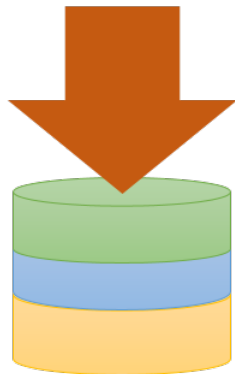
設備投資は実質ゼロ

データ科学のパッケージ化：最先端の
技術を誰もが使える時代に

あらゆる分野
に普及、R&D
における意思
決定に活用



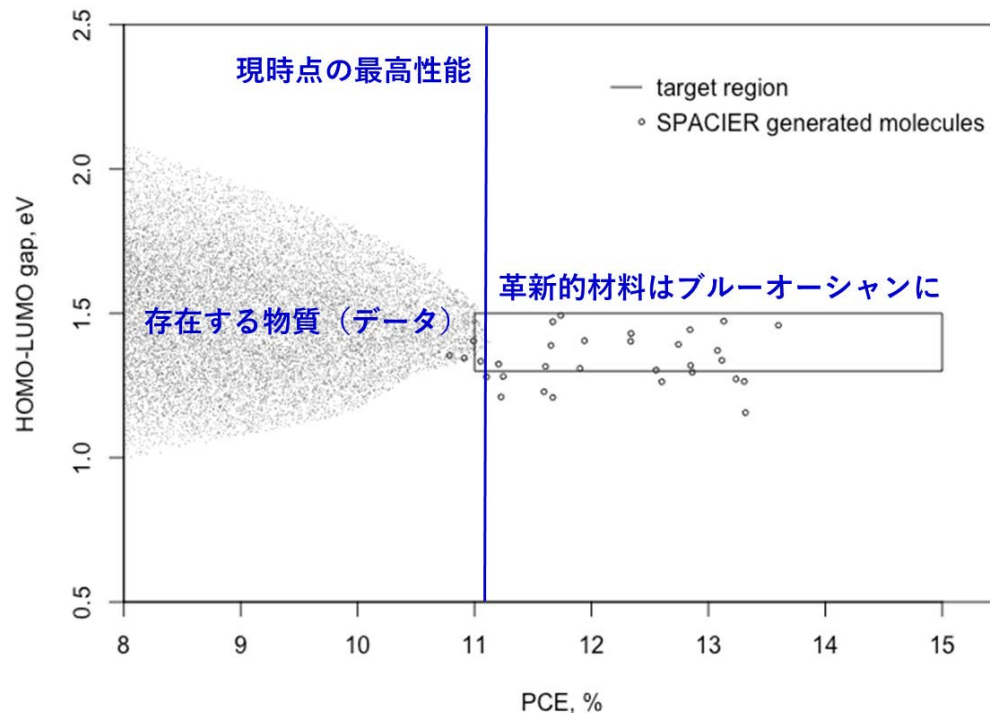
データ科学



VALUE
DATA SCIENCE
science and industry

“創造的設計と製造”のデータ科学

ものづくりで他の追従を許さないレベルの革新を起こす。一般には、データ科学単独でこれを実現することは不可能です。データ科学の解析手法の多くは、基本的に内挿的予測を行うためのものです。データ科学では、今手元にあるデータと予測対象のデータの類似性に基づき予測を行います。例えば、材料の物性評価では、物質の構造が近ければ物性も近いという原理に則って予測を行います。しかしながら、革新的材料は一般的に未踏領域に存在するため、その周辺にはデータは存在しません。この限界を突破するには、実験や理論とデータ科学の解析手法の融合が必要です。すなわち、実験やシミュレーションを用いて、実験計画法に則った合理的デザインのもとデータを追加しながら、統計モデルの予測可能領域を段階的に拡大していくというアプローチです。これまで我々は、物質・材料科学の分野でデータ科学による外挿的な予測手法を開発し、産学連携で革新的機能材料の発見を目指してきました。次のステップは、ものづくりの様々な領域で創造的設計と製造のデータ科学を実践していくことです。



- “革新的機能材料”の周辺にはデータは存在しない
- 「創造的設計と製造」＝「外挿」
- データ科学の予測は“内挿的”（材料研究者の経験に基づく予測も同様に）
- ソリューションは「実験・理論計算・データ科学」の系統的循環による内挿領域の段階的拡大

“創造的設計と製造” 実現に向けた取り組み

- 実験計画法に基づくデータ科学×実験（仮想/実空間）の系統的循環の構築
- 外挿性の獲得
- 産学連携プロジェクトを始動

②実験・計算・データ科学の循環

①実験・データ科学の循環

