

2023-07-21 @東北大学片平キャンパス知の館3階講義室

東北大学材料科学世界トップレベル研究拠点2023年度第1回セミナー×研究DX戦略セミナー第5回

# マテリアルDXプラットフォーム構想 実現に向けた取り組み

NIMS 出村雅彦

謝辞：

本研究の一部は、内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）「革新的構造材料」及び「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」（管理法人：JST）、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業JPMXP1122684766の助成によって実施されました。

感謝申し上げます。



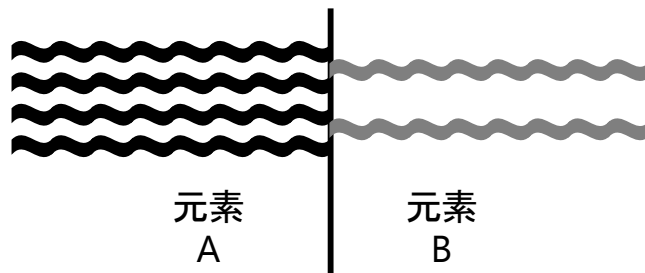
# 生成AIに材料設計をお願いできるか？



# 早速試してみよう：ChatGPTに以下のタスクを聞いてみる

タスク：異種元素の界面における熱抵抗の高さを利用して新規の熱遮蔽膜材料を設計する

熱抵抗の最も高いA/Bの組み合わせは？



質問

熱伝導率は異なる元素の界面で小さくなります。元素の組み合わせから界面における熱伝導率を予測するモデルを作成し、そのモデルから現在知られている元素について全ての組み合わせに対して界面における熱伝導率を計算し、熱伝導率の小さいと予想される元素の組み合わせTop10を教えてください。

ChatGPT

@2023/03/17

データが必要

申し訳ありませんが、私は与えられたタスクを完了するために**必要なデータとモデルを持っていません**。熱伝導率は物質の構造、温度、圧力などに依存し、**予測には複雑な物理学的モデルが必要**です。また、**熱伝導率に影響を与える因子は多岐にわたるため**、ある2つの元素の熱伝導率を単純に比較することはできません。

熱伝導率に関するより正確な予測をするためには、**物理学や材料科学の専門家による実験やシミュレーションが必要**です。また、**既存の文献やデータベースから熱伝導率に関する情報を収集することができます**。私が提供できるのはこの程度ですが、他に何かお力になれることがあればお知らせください。





# どこが難所か？さらに先をいくには？

## 論文データ再利用事例 & ChatGPT回答から学ぶ

論文からデータを抽出するのは手間

ネガティブデータは使えない

熱伝導の領域のデータに限定される



整理された形でデータをデジタル化

取得したデータはすべて蓄積

共通の情報（構造）で横串をさす

▶ **マテリアルDXプラットフォーム構想**

# 研究DXの推進

NIMSを砂場とした社会実験から得たDXのレシピをフル活用



# NIMSが提供する世界最大級の材料データベース



MatNavi 専門家がキュレーションした12のデータベース  
NIMS物質・材料データベース

## 無機材料



世界最大の無機材料データベース

	Atom Work	Atom Work Adv.
結晶構造	82,000	364,668
状態図	15,000	46,607
特性	55,000	459,238
更新	なし	年1回



## 高分子



49万物性  
(2023.3月現在)

国産高分子データベース

- ・ 学術論文からの精選データ
- ・ **人手による高品質**データ
- ・ 過去**25**年以上の蓄積 (**12**人体制)

## 金属・合金



500種以上の鉄鋼材料の  
機械的性質、クリープ、  
疲労：82,700以上



CCT曲線図: 214; 硬度:  
2213; 金属組織図: 627

材料データをめぐる国際競争が激化：学会、出版社等



研究機関の特長を活かした戦略へ



# 材料研究所としての特長を活かしたデータ戦略

つくる

高品質の実験・計算データを  
日々、創出

世界最大級の  
材料データベース資産

IoT      データ構造化

  
世界に類のない高分子DB

  
世界最大無機化合物DB

ためる

実験データを再利用できる形  
で自動的に蓄積

  
40年以上の破壊寿命測定も！

機械学習に活用

つかう

データの再利用率を高めて研究加速





# NIMSで実践してきたマテリアル研究DX



世界最大の  
無機材料データベース



材料データリポジトリ

比類なき  
高分子データベース



研究データ構造化・蓄積・  
共用化システム

信頼性を支える  
金属試験データベース



ための  
材料データ  
プラットフォーム



材料設計  
産学プラットフォーム

データ

データ  
AIツール

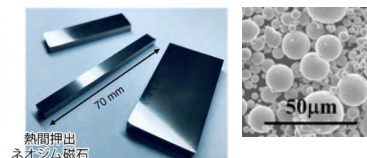
つくる  
スマート  
ラボラトリ

高速検証

つかう  
データ駆動  
材料研究



ハイスループット  
自動・自立実験



# 文献からだけでなく、日々の研究からデータを直接蓄積

- 文献データ
- 成功データ
  - 加工されたデータ

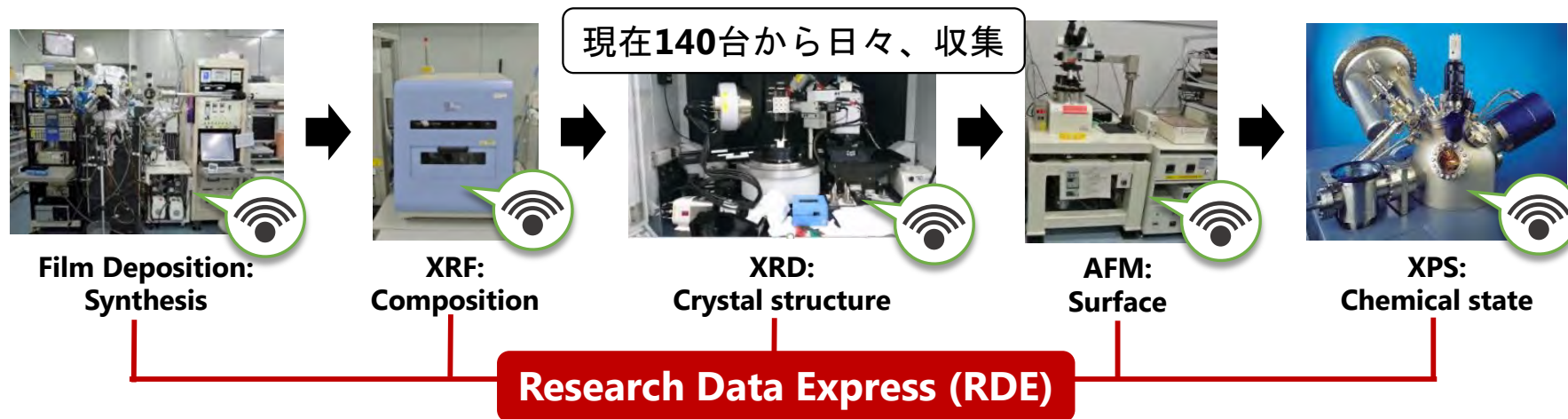


- 日々の研究で生まれるデータ
- 失敗データも含まれる
  - リッチな情報を持つ生データ

文献からのデータ抽出は人手がかかる



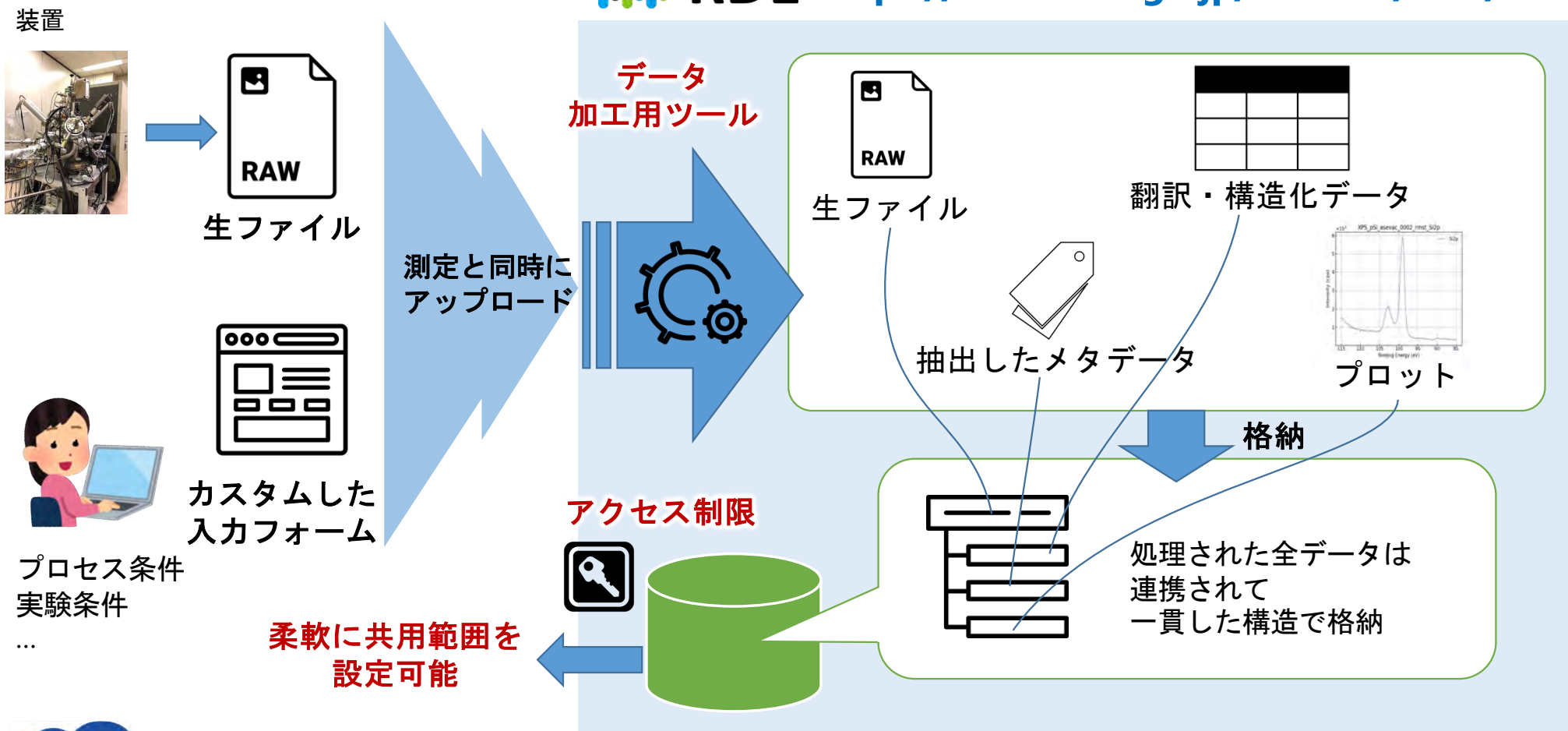
## NIMSは独自にデータ構造化・収集システムを開発



# Research Data Express (RDE)

2023.1.17リリース

 RDE <https://dice.nims.go.jp/services/RDE/>



# データ駆動による材料研究事例

過去の論文データを再利用  
世界成功性能の熱遮蔽膜

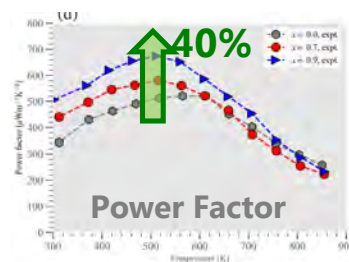


Bi/Si  $\lambda = 0.16 \text{ W/mK}$

Wu et al. npj comp. mater. **5**, 56 (2019).  
Zhan et al. Sci. Rep. **7**, 7109 (2017).  
徐ら、特開2019-119652.

熱制御

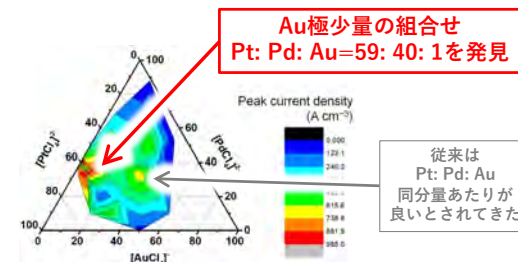
高品質実験データ+機械学習  
熱電特性をアップ



Hou et al. Acs Appl Mater Inter **11**, 11545 (2019).

小型電源

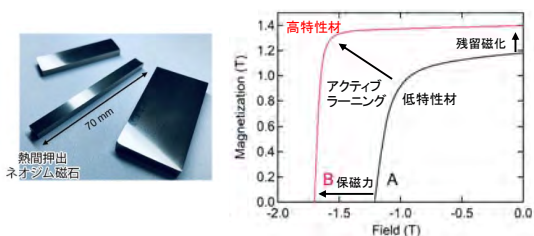
わずか1%の回数の実験で  
意外な触媒成分を発見



Nugraha et al. J. Mater. Chem. A **8**, 13532 (2020).

燃料電池

アクティブラーニングで  
ネオジウム磁石性能を1.4倍向上



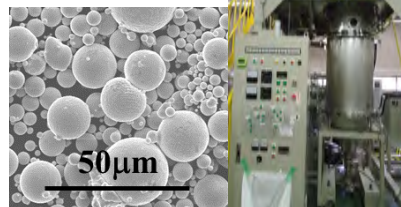
6,600万通りから40回の追加実験で最適化

G. Lambard, et. al., Scripta Materialia, **209**, 114341 (2022).

モータ

わずか6回の実験で  
72%製造コスト削減

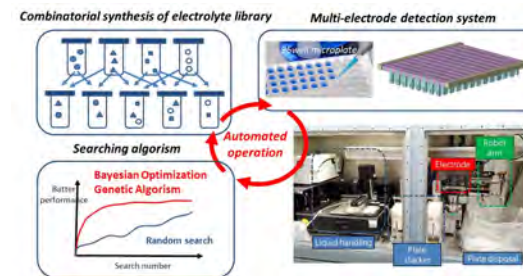
金属3Dプリンタ用  
金属粉末



Tamura et al. Materials & Design **109290** (2020).

耐熱

自動実験とAIを連結  
リチウムイオン電池の電解質の探索



Matsuda et al. Scientific Reports **9**, 6211 (2019).

電池

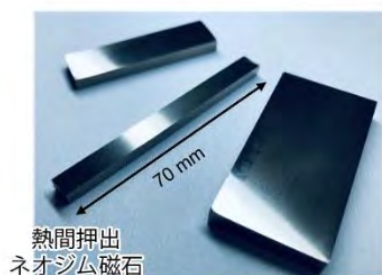


# 少数の実験回数でネオジウム磁石を高特性化！



G. Lambard

熱間押出ネオジウム磁石の作製条件をアクティブラーニングにより最適化し、少ない実験回数で磁石特性向上に成功。**18点の初期実験データから、40点の追加実験**を行うことで、初期条件に比べて保磁力を1.4倍ほど向上させた。同じ組成を有する磁石の中では**最高クラス**の特性に相当

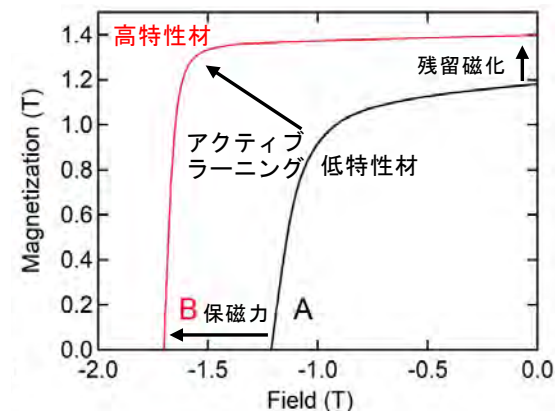
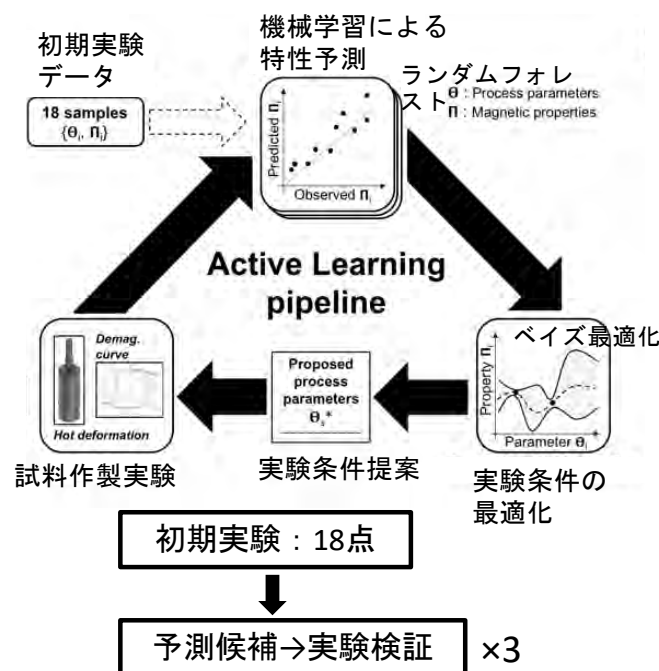


熱間押出  
ネオジウム磁石

MQU-F:  $\text{Nd}_{13.6}\text{Fe}_{75.7}\text{Co}_{4.6}\text{B}_{6.0}\text{Ga}_{0.5}$

- ・ Hot press時の温度
- ・ Hot press時の荷重
- ・ 押出時の温度
- ・ 押出時のram速度
- ・ 押出時の荷重
- ・ 押出出口の形状

6種：**6600万通り**の組合せから最適解を探す



初期実験値(保磁力1.2T、残留磁化1.2T)から、アクティブラーニング後(保磁力1.7T、残留磁化1.4T)に高特性化

G. Lambard, et. al., Scripta Materialia, 209, 114341 (2022).

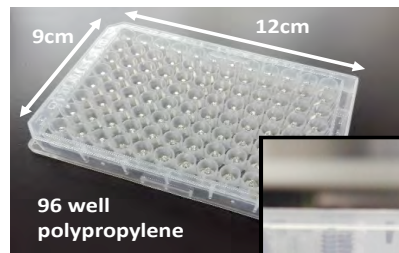
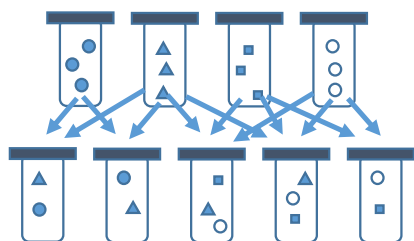


# AI駆動ロボット電気化学自動実験システム



松田翔一

電解液のコンビナトリアル合成 マイクロプレート型電気化学セル



実験結果の自動転送



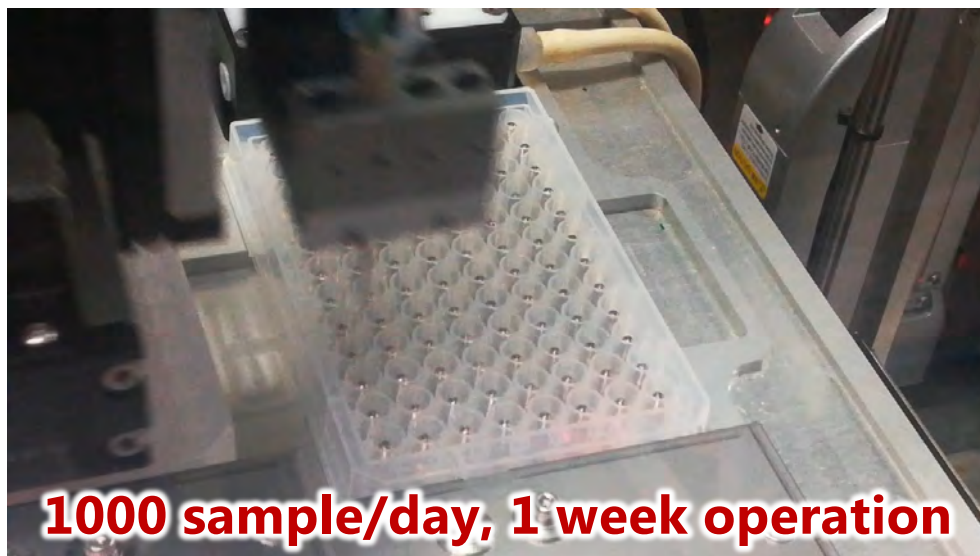
実験実施



データ蓄積 & 解析

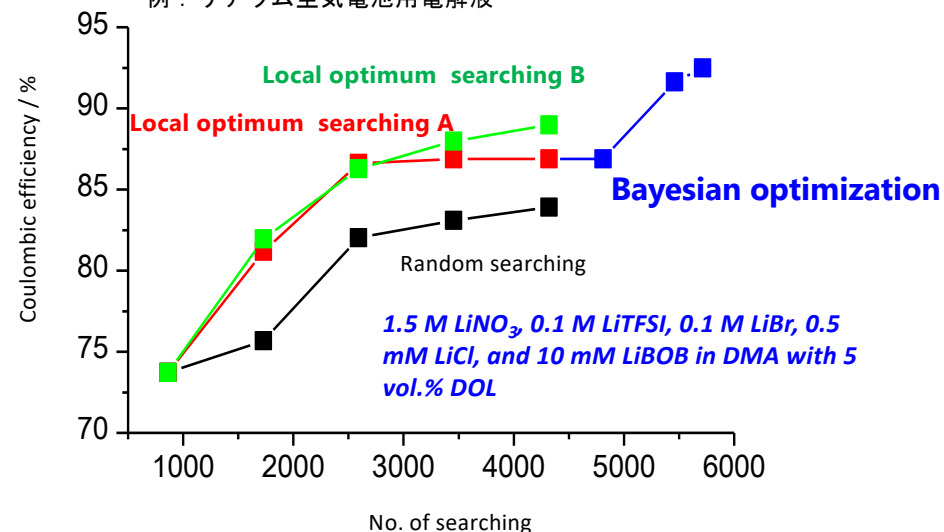


実験計画の提示



## 探索過程における電解液性能の推移

例：リチウム空気電池用電解液



S. Matsuda, et al. Scientific Reports, 2019, Cell Reports Phys. Sci. 2022

© Masahiko Demura, 2023. 無断転載厳禁

# MInt : 産学連携のデジタルプラットフォーム



# 研究開発のDX化が急務

社会課題

カーボンニュートラル

持続可能性

国土強靱化

豊かさの実現

材料課題

強度

軽量

腐食

疲労

加工性

3D積層性

リサイクル性

ユビキタス性

靱性

耐熱性

延性

水素脆化

低温脆化

溶接性

省エネプロセス

コスト

産

材料開発

従来：個別の課題ごとに、各プレイヤーが個別に対応

- 全て自前で開発するため、課題解決のノウハウが蓄積しない
- 様々なアカデミアの知恵を総動員できず、国際競争力低下
- 部分最適で骨太の学問テーマにつながりにくい

**DX!**

分節化すると共通性の高い課題に

材料学  
ツール

電子論

熱力学

拡散

電気化学

転位論

弾塑性力学

組織学

強度理論

損傷力学

破壊力学

第一原理計算

分子動力学計算

計算熱力学

有限要素解析

結晶塑性

フェーズフィールド法

学

データ科学

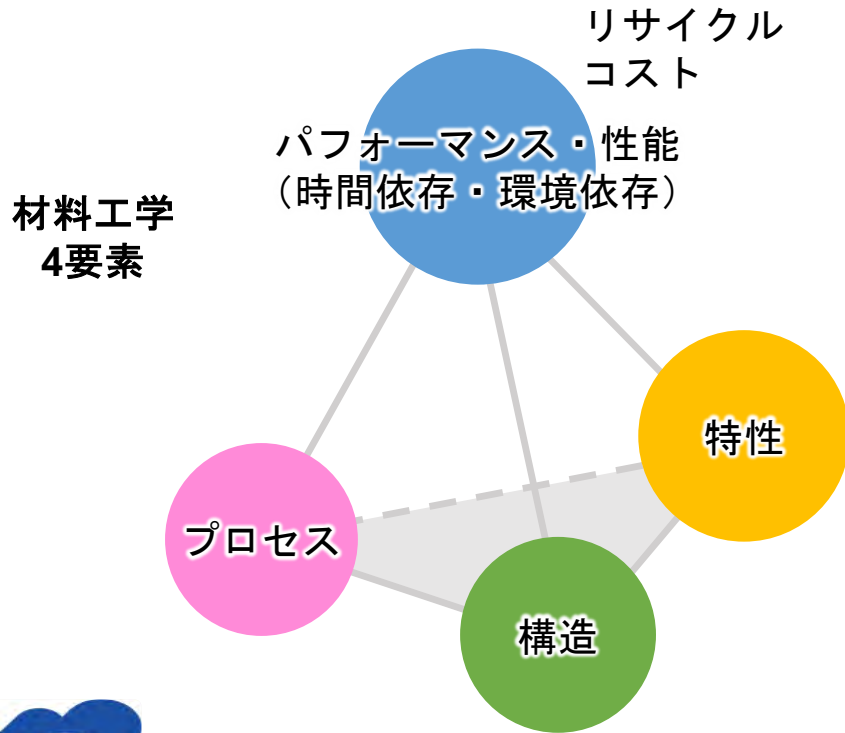




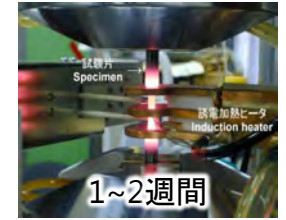
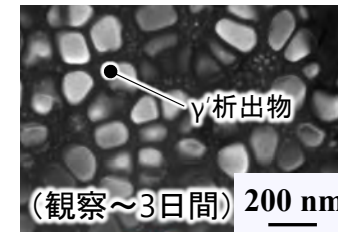
# マテリアルズインテグレーションとは

材料工学手法にデータ科学を活用して、計算機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システム

→材料工学をデジタル化

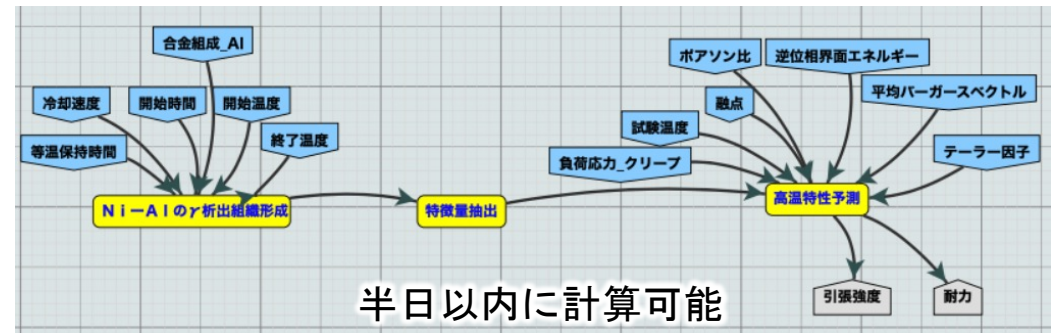


従来の実験中心の開発から



モジュール、ワークフローとしてデジタル化

計算機を活用した開発へ



**Mint**

主に金属を対象としたシステム  
Materials Integration by Network Technology



# 従来手法：実験検証に基づく試行錯誤

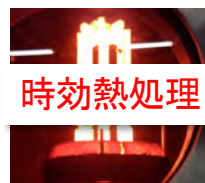
ニッケル基超合金の  
時効熱処理方案設計の例



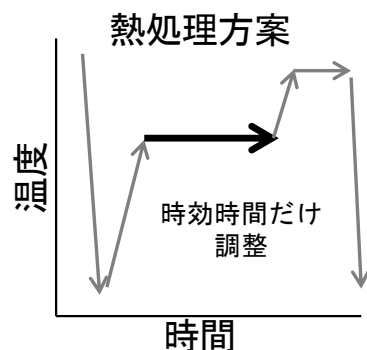
C1



C2



高温強度を決める重要プロセス



方案を提案

もう少し長めの時効時間が良い？  
しかし、あまり実験はできない。

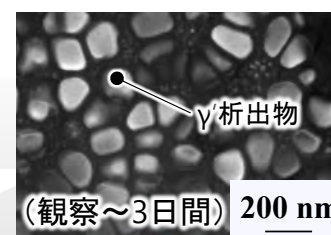


熱処理実験

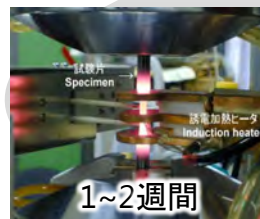


コストが高い  
時間がかかる

材料ミクロ構造



高温機械試験



高温強度特性



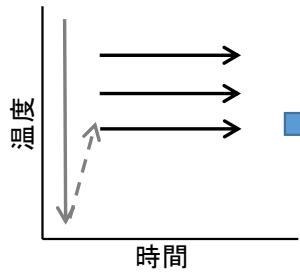
写真：長田・川岸提供



# MIntによる予測：半日以内に1条件を計算可能

小山 / 名古屋大  
長田・BULGAREVICH・出村 / NIMS

時効温度・時間



フェーズフィールド法



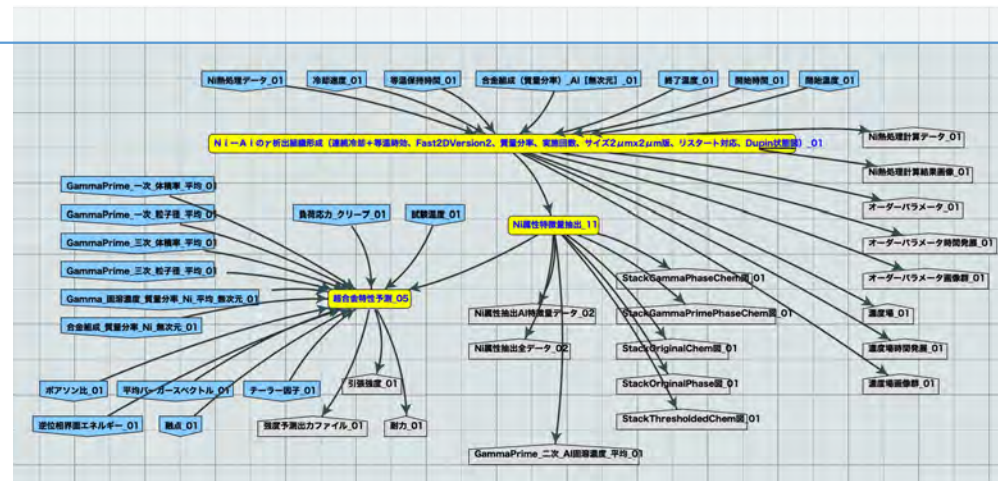
画像解析

- $\gamma'$ サイズ
- $\gamma'$ 体積率
- $\gamma$ 中Al濃度

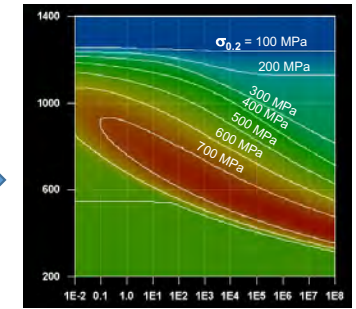
強度モデル式

- $\gamma'$ 析出強化
- $\gamma'$ 複合則強化
- $\gamma$ 固溶強化

MIntに実装したワークフロー



強度マップ



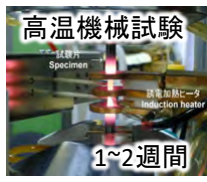
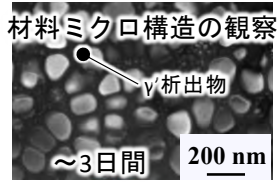
最適条件の推定



# ニッケル基耐熱合金の熱処理プロセスの設計：実験と比べ100倍以上高速

※ Ni基耐熱合金の熱処理プロセス最適化の事例

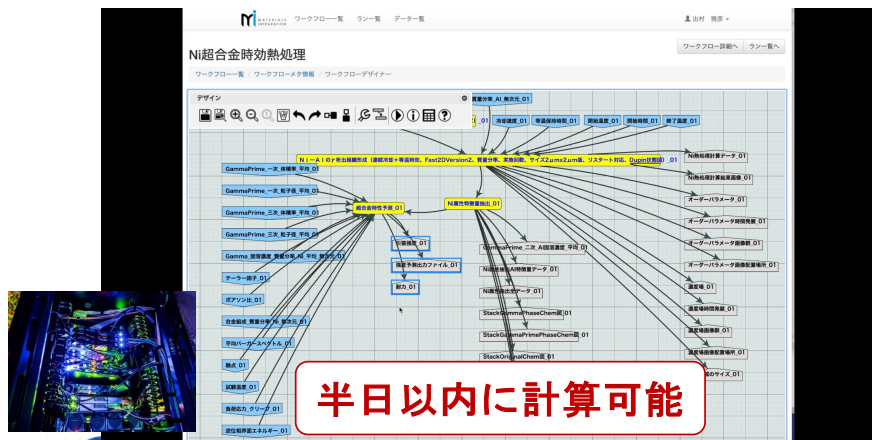
従来の実験中心の開発から



1つの条件下での特性評価に半月以上

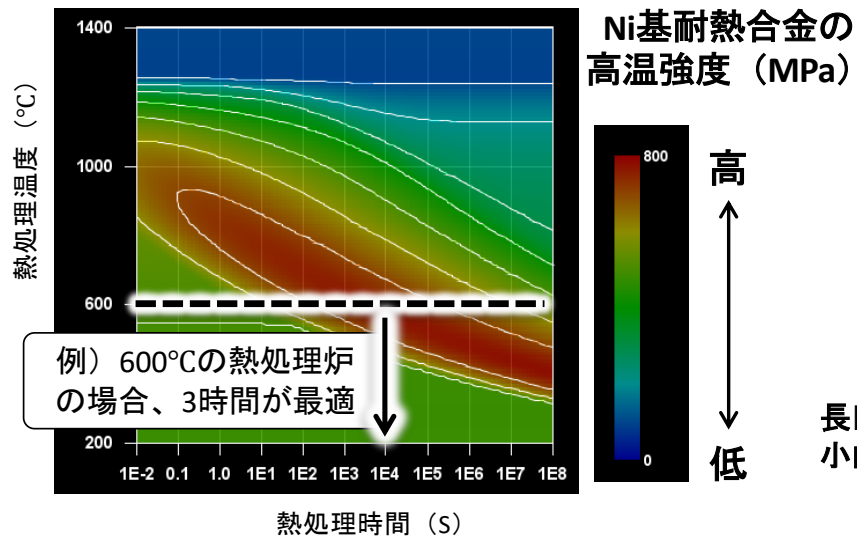
モジュール、ワークフローとしてデジタル化

計算機を活用した開発へ



- **プロセスマップ**を用いれば生産設備に合わせて製造条件を容易に最適化できる
- **実験では210条件の実施に5年以上の時間と膨大なコスト**がかかり事実上、プロセスマップの作成は困難。
- **MIntで製造工程をデジタル化して100倍以上高速化。**
- **熱処理プロセスマップの作成に成功。**

MInt で求めたプロセスマップ

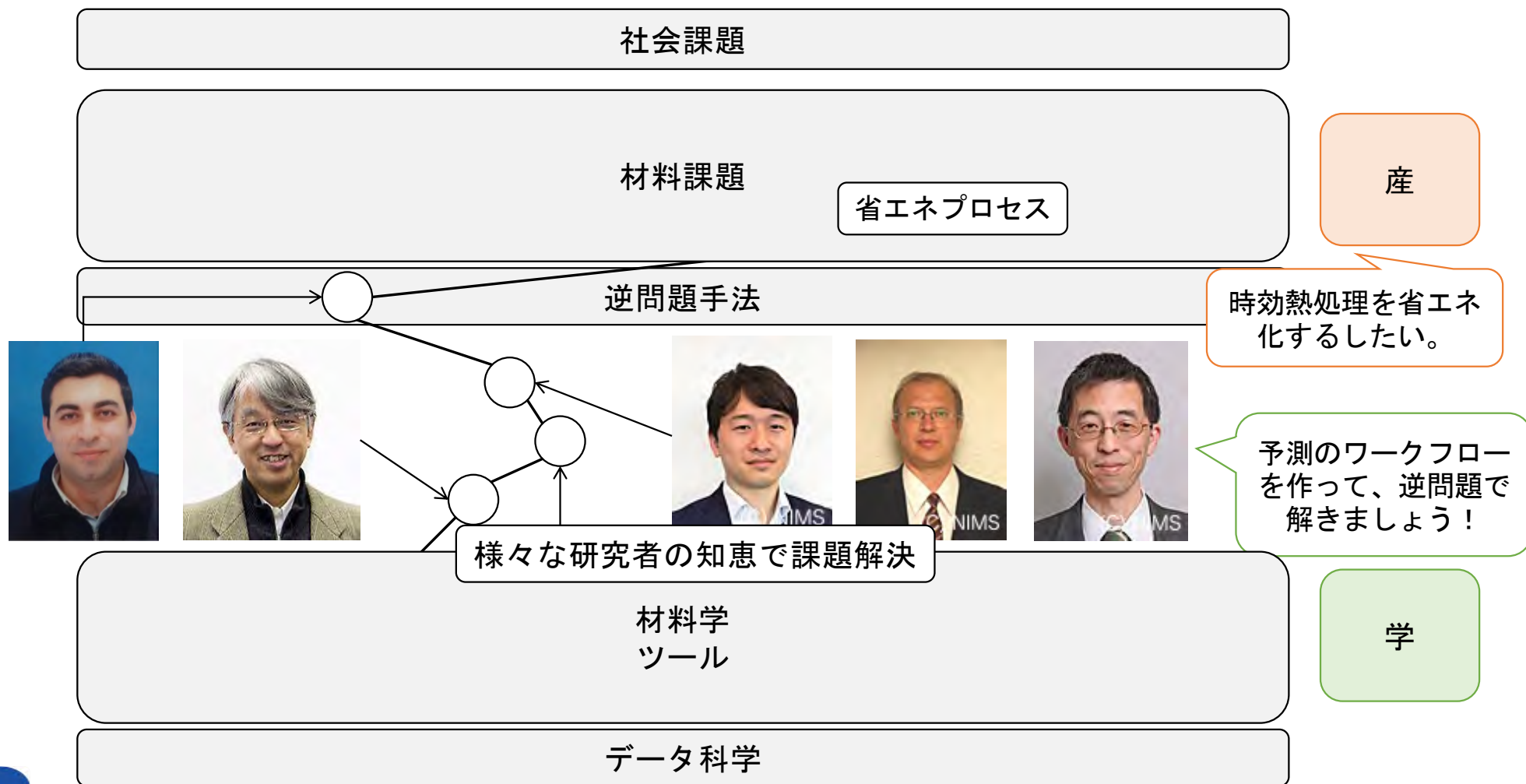


長田・出村ら/NIMS  
小山/名古屋大

Osada, et al. (2023). Materials & Design, 226, 111631. <https://doi.org/10.1016/J.MATDES.2023.111631>

© Masahiko Demura, 2023. 無断転載厳禁

# 「産（課題）」と「学」をつなぐマテリアルズインテグレーション

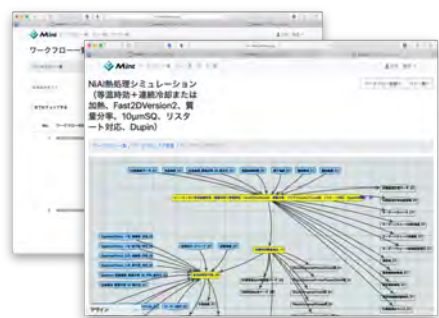


# MIntは「産（課題）」と「学」を結ぶデジタルレイヤー

材料開発



# 構造材料DX-MOPで産学デジタルプラットフォームの社会実装へ



## MIntシステムの開発

FY2014

SIP第1期「革新的構造材料」

コンセプト提案と実証

- 鉄鋼溶接部の組織・性能予測
- システム設計



2021.7よりインターネットでサービス提供開始

FY2018

SIP第2期「マテリアル革命」

社会実装

- 逆問題解析
- 先端材料・プロセスへの展開
- 実運用に向けたシステム高度化
- MIコンソーシアム設置

FY2021

MIコンソーシアム

社会実装に向けた体制の雛形

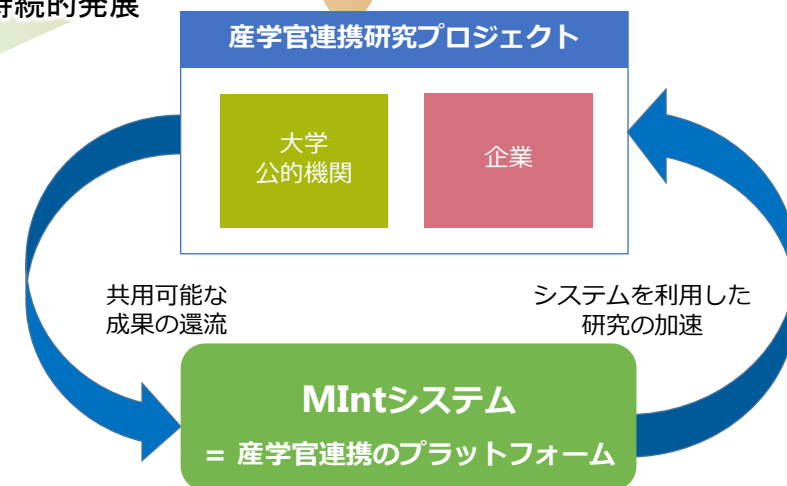
- 企業R&Dでの活用
- 産学官連携による持続的発展

2023.4.1発足予定

## 構造材料DX-MOP

産業界とアカデミアを結ぶ  
デジタルプラットフォーム

- 産学官連携による持続的発展
- 協調と競争の両立



\* MOP : NIMSをハブとして産業界とアカデミアを結ぶ領域別のオープンプラットフォーム

# マテリアルDXプラットフォームの構想





# 日本全国をDX化して、マテリアル革新力強化\*へ

\*マテリアル革新力強化戦略

2021年4月27日

内閣府統合イノベーション戦略推進会議決定

基本方針2：データ駆動型研究開発基盤の整備

目標「マテリアルDXプラットフォーム」整備

ためる

データ中核拠点  
クラウドデータ基盤  
DICE

つくる

マテリアル  
先端リサーチ  
インフラ事業  
ARIM

つかう

データ  
創出・活用型  
マテリアル開発  
プロジェクト  
DxMT

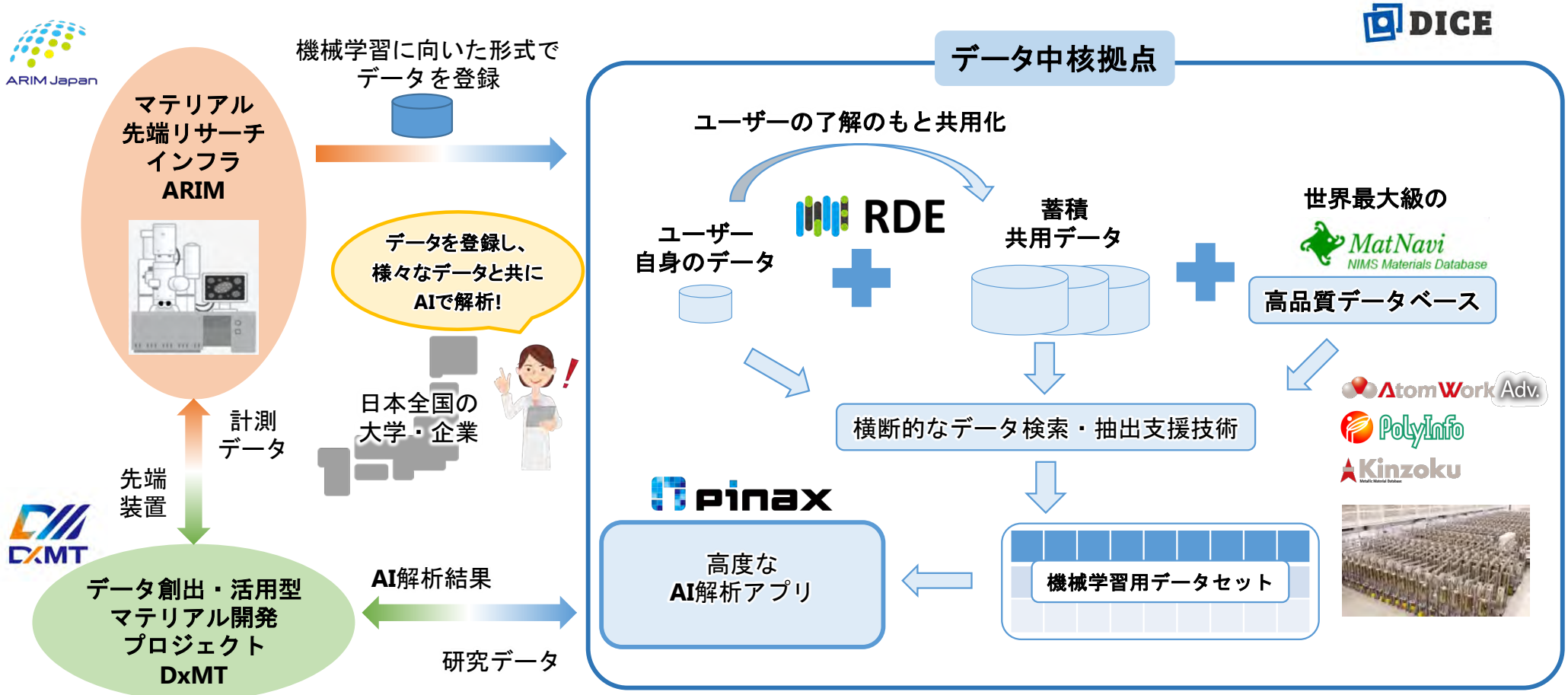
文部科学省  
マテリアルDX  
プラットフォーム事業



# マテリアルDXプラットフォーム：データ中核拠点

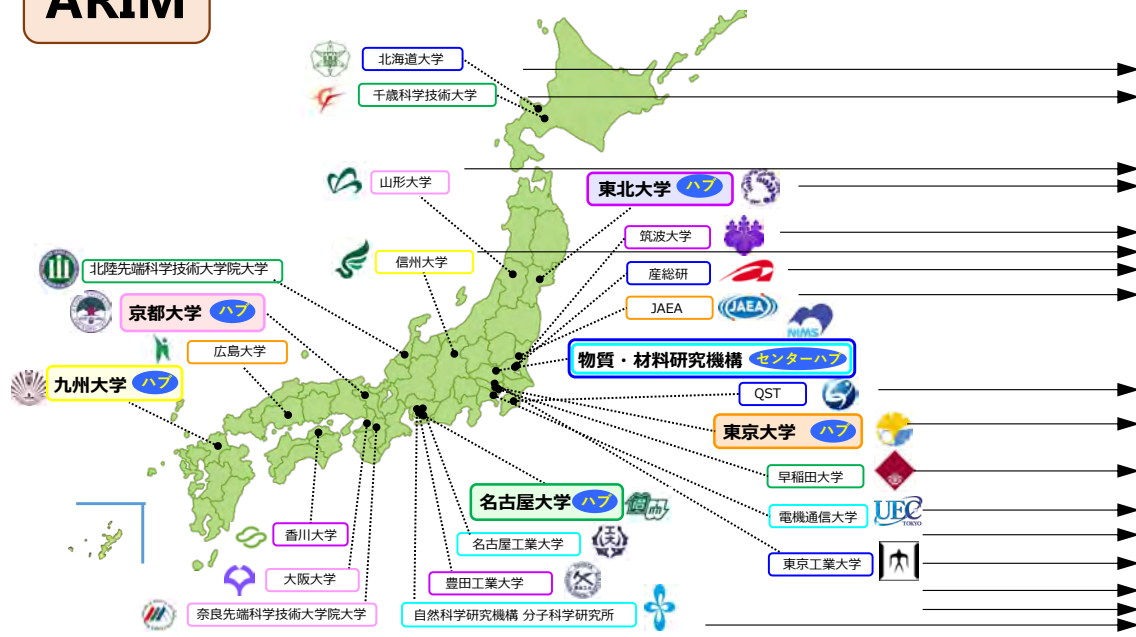
人 × 資金 × データ再利用率

データがどんどん集まり、どんどん活用される材料データエコシステム

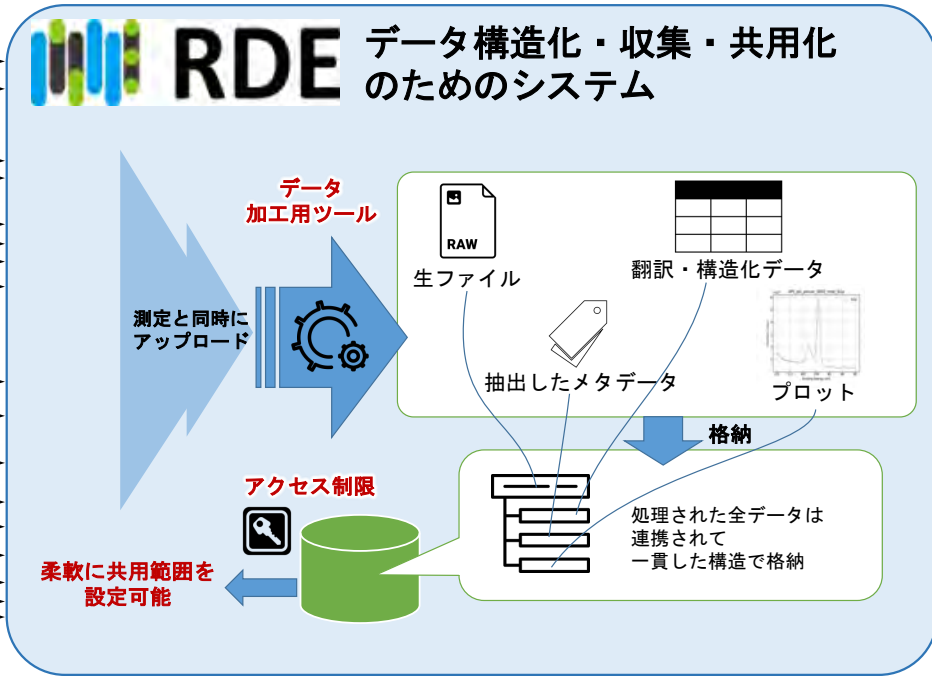


# マテリアル先端リサーチインフラ（ARIM）におけるDX推進

**ARIM**



データ中核拠点



**2022 FY**






188台の装置がRDEに接続済み

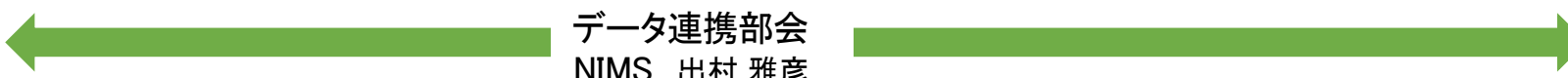
**2023 FY**

さらに103台を接続する予定



# DxMT : 5つのデータ創出・活用拠点でマテリアル分野のDX化を目指す

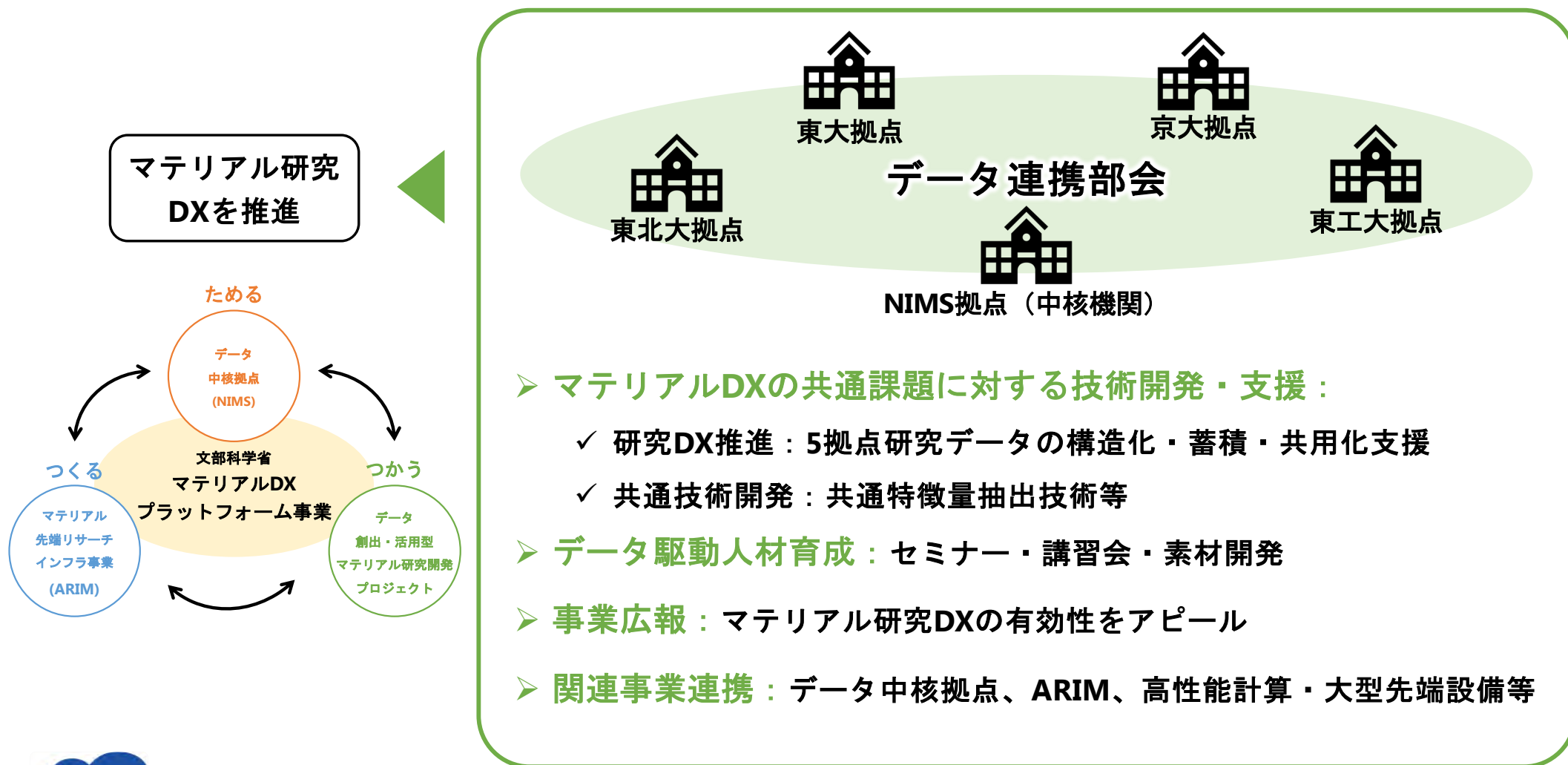
社会像	カーボンニュートラル		Society5.0	国土強靱化	Well-Being社会	
対象	蓄電・水電解触媒		半導体	金属構造材料	バイオアダプティブ	
代表機関	東京大学		東京工業大学	東北大学	京都大学	
代表研究者	杉山 正和  先端科学技術 研究センター 教授	大久保 忠勝  磁性・スピントロニクス材料研究拠点 副拠点長	神谷 利夫  教授 元素戦略研究 センター センター長	吉見 享祐  工学研究科 教授	沼田 圭司  教授 JST ERATO 研究総括	
連携機関	<ul style="list-style-type: none"> <li>•NIMS</li> <li>•東京理科大</li> <li>•横浜国立大</li> <li>•早稲田大</li> <li>•大阪公立大</li> <li>•名工大</li> <li>•東北大</li> <li>•理研</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•北海道大</li> <li>•山梨大学</li> <li>•東京農工大</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•AIST</li> <li>•東北大学</li> <li>•名古屋大学</li> <li>•JASRI</li> <li>•大阪大学</li> <li>•トヨタ自動車</li> <li>•TMI</li> <li>•東京大学</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•NIMS</li> <li>•KEK</li> <li>•JFCC</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•九州大学</li> <li>•大阪大学</li> <li>•NIMS</li> <li>•東京大学</li> <li>•横浜国立大学</li> <li>•JAEA</li> <li>•名古屋大学</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>•NIMS</li> <li>•東京大学</li> <li>•慶応大学</li> <li>•名古屋大学</li> <li>•理研</li> <li>•QST</li> <li>•九州大学</li> <li>•北海道大</li> </ul>
先端設備	放射光 (Spring-8, SACLA) ・中性子 (J-PARC, QST) ・電子顕微鏡等の活用					
計算科学	スパコン「富岳」の活用					
MDX	データ中核拠点・マテリアル先端リサーチインフラとの連携					



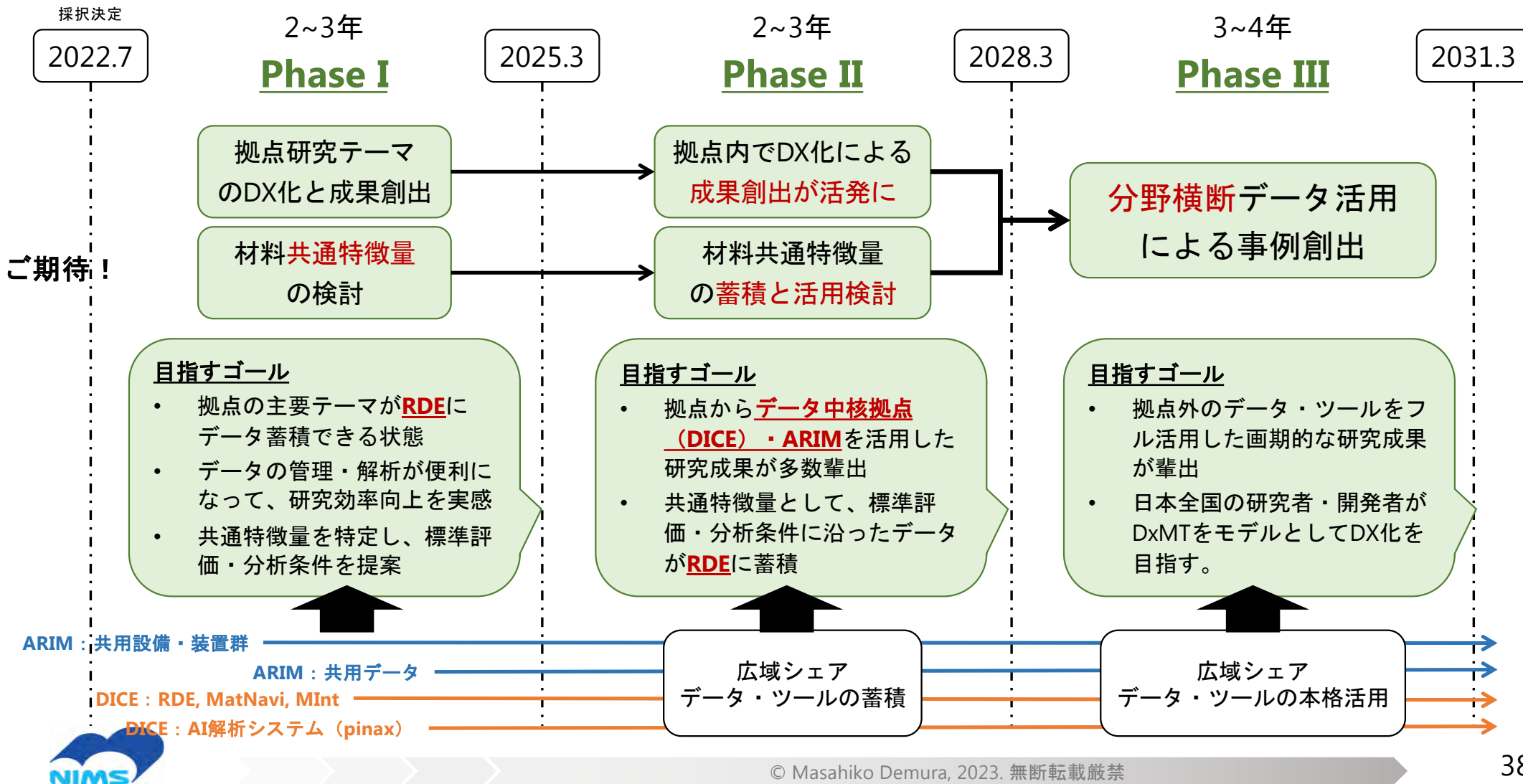
データ連携部会  
NIMS 出村 雅彦



# データ連携部会の取り組み：マテリアルDX事業全体の成果を最大化



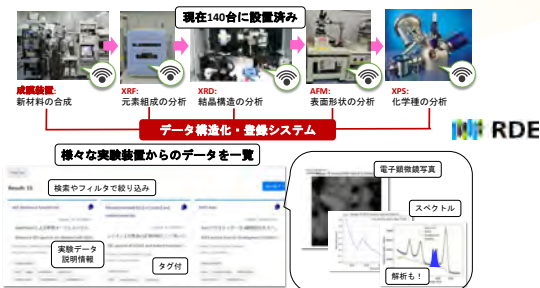
# DxMTの9年間で目指す成果と発展：社会実装に向けて



# ホップ・ステップ・ジャンプで分野横断のマテリアル革新力強化へ

**NIMSでの「社会実験」**

- ✓ いろいろ試行錯誤をして
- ✓ RDEという道具にたどり着く

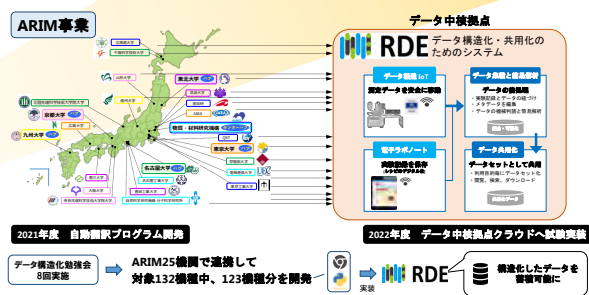


**ARIMで全国展開第1弾**

- ✓ 設備の専門家が取り組む
- ✓ 装置を中心としたDX化の先導役

**DxMTで全国展開第2弾**

- ✓ プロジェクト推進を駆動力に
- ✓ **研究室のDX化**を先導



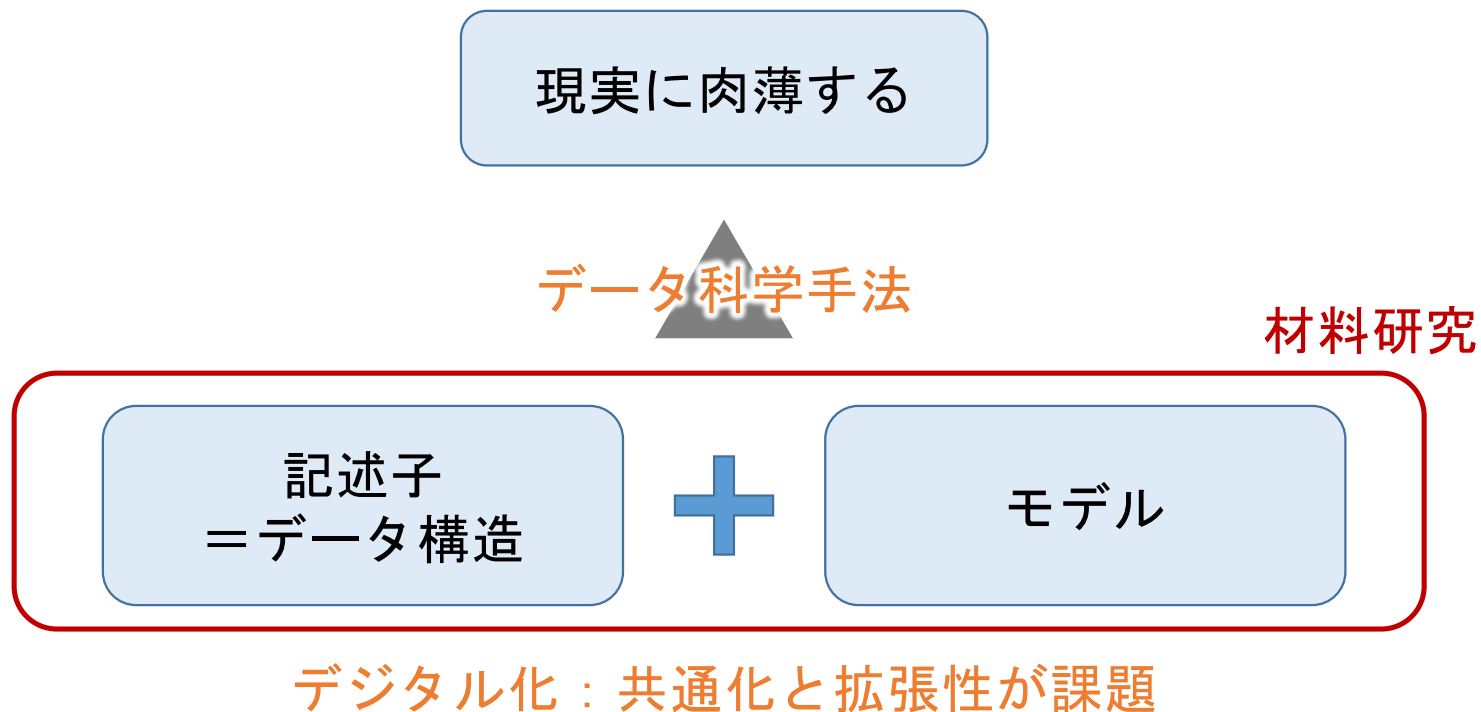
# データ構造について

マテリアルDXを進めるための肝





# 記述子（データ構造）とモデルが本質的に重要



# SIPにおけるデータ設計と産学データ連携事例創出

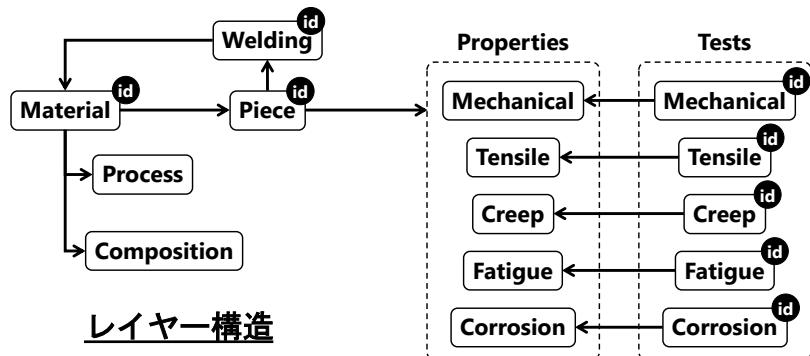
謝辞：

内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）  
「革新的構造材料」及び「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」（管理法人：  
JST）によって実施されました。感謝申し上げます。



# そもそもデータ構造とは何か？

## データモデル



## ID体系

Material_ID	材料(規格) サンプル(供試材)	ID
		M-NIMS-FDS-1-5C25C-A
		M-NIMS-FDS-5-5M50B-20
Piece_ID	試験片 (熱処理)	P-M-NIMS-FDS-1-S25C-A P-M-NIMS-FDS-39-S35C-C-HT550
Piece_ID	試験片 (溶接)	P-W-NIMS-FDS-5-20-MAC-WJ P-W-NIMS-FDS-13-a-MAC-WJ P-[weld]-BM-BM
Welding_ID	溶接継手	W-NIMS-FDS-5-9-MAC W-NIMS-FDS-13-a-MAC W-NIMS-CDS-32-JBA-SAW W-NIMS-SDS-2-EBW W-NIMS-SDS-2-TIG

## データ項目

シート	データ項目																																																																											
Welding	<table border="1"> <tr> <td>Welding ID</td> <td>Welding method</td> <td>Weld length</td> </tr> <tr> <td>Reference ID</td> <td>Welding method type</td> <td>Plate size</td> </tr> <tr> <td>Dis name, DS no, DS ref</td> <td>Welding process</td> <td>Welding consumable</td> </tr> <tr> <td>W reference code</td> <td>Shape of welded joint</td> <td>Welding rod</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Fabricator</td> <td>Welding material</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Series</td> <td>Welding gas</td> </tr> <tr> <td>BM1 Piece ID</td> <td>Edge preparation</td> <td>Welding position</td> </tr> <tr> <td>BM1 reference code</td> <td>Edge preparation by gas cutting</td> <td>Welding current</td> </tr> <tr> <td>BM1 thickness</td> <td>Edge preparation by machining</td> <td>Welding speed</td> </tr> <tr> <td>BM1 material</td> <td>Edge preparation and gouging by machining</td> <td>Welding voltage</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Gouging</td> <td>Welding Power Source</td> </tr> <tr> <td>BM2 Piece ID</td> <td>Arc grouping</td> <td>Heat input</td> </tr> <tr> <td>BM2 reference code</td> <td>Air grouping</td> <td>Preheating</td> </tr> <tr> <td>BM2 thickness</td> <td>Pass sequence</td> <td>Redrying of rod</td> </tr> <tr> <td>BM2 material</td> <td></td> <td>Redrying of welding consumable</td> </tr> <tr> <td></td> <td></td> <td>Interpass temperature</td> </tr> <tr> <td>WM Piece ID</td> <td></td> <td>Post Weld Heat Treatment</td> </tr> <tr> <td>WM reference code</td> <td></td> <td>Holding temperature</td> </tr> <tr> <td>WM material</td> <td></td> <td>Holding time</td> </tr> <tr> <td>FM Piece ID</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>FM reference code</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>FM material</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>DM Piece ID</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>DM reference code</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>DM material</td> <td></td> <td></td> </tr> </table>	Welding ID	Welding method	Weld length	Reference ID	Welding method type	Plate size	Dis name, DS no, DS ref	Welding process	Welding consumable	W reference code	Shape of welded joint	Welding rod		Fabricator	Welding material		Series	Welding gas	BM1 Piece ID	Edge preparation	Welding position	BM1 reference code	Edge preparation by gas cutting	Welding current	BM1 thickness	Edge preparation by machining	Welding speed	BM1 material	Edge preparation and gouging by machining	Welding voltage		Gouging	Welding Power Source	BM2 Piece ID	Arc grouping	Heat input	BM2 reference code	Air grouping	Preheating	BM2 thickness	Pass sequence	Redrying of rod	BM2 material		Redrying of welding consumable			Interpass temperature	WM Piece ID		Post Weld Heat Treatment	WM reference code		Holding temperature	WM material		Holding time	FM Piece ID			FM reference code			FM material			DM Piece ID			DM reference code			DM material		
Welding ID	Welding method	Weld length																																																																										
Reference ID	Welding method type	Plate size																																																																										
Dis name, DS no, DS ref	Welding process	Welding consumable																																																																										
W reference code	Shape of welded joint	Welding rod																																																																										
	Fabricator	Welding material																																																																										
	Series	Welding gas																																																																										
BM1 Piece ID	Edge preparation	Welding position																																																																										
BM1 reference code	Edge preparation by gas cutting	Welding current																																																																										
BM1 thickness	Edge preparation by machining	Welding speed																																																																										
BM1 material	Edge preparation and gouging by machining	Welding voltage																																																																										
	Gouging	Welding Power Source																																																																										
BM2 Piece ID	Arc grouping	Heat input																																																																										
BM2 reference code	Air grouping	Preheating																																																																										
BM2 thickness	Pass sequence	Redrying of rod																																																																										
BM2 material		Redrying of welding consumable																																																																										
		Interpass temperature																																																																										
WM Piece ID		Post Weld Heat Treatment																																																																										
WM reference code		Holding temperature																																																																										
WM material		Holding time																																																																										
FM Piece ID																																																																												
FM reference code																																																																												
FM material																																																																												
DM Piece ID																																																																												
DM reference code																																																																												
DM material																																																																												

## データフォーマット

### 表形式

ヒート	C	Si	Mn	
MBB	0.12	0.26	0.52	
ME				
ME				
MBB		22	212	
MBB	ヒート	試験温度	0.2%耐力	引張強さ
MBB	MBB	500	373	712.7
MBB	MBB	500	333	2221.9
MBB	MBB	500	294	5941.6

### キー・バリュー+スキーマ形式

```

<property>
  <i name="rupture_time" stress="373" temperature="400" unit="h">61</i>
  <i name="reduction_of_area" stress="373" temperature="400" unit="%">59</i>
  <i name="elongation" stress="373" temperature="400" unit="%">31</i>
  <i name="..." ss="333" t="h">493.9</i>
  <i name="..." ss="333" t="%">37</i>
  <i name="..." ss="333" t="%">60</i>
  
```

XML Schema Metadata RDF

XML Schema XSD

### リレーショナル形式



Material	Piece
Material ID	Piece ID
Process conditions	Material ID
Composition	Dimension
...	...



# 現場でのデータの整理の仕方を大切にしつつ、データ連携していくには？

課題：異なるデータ構造の間でのデータ連携

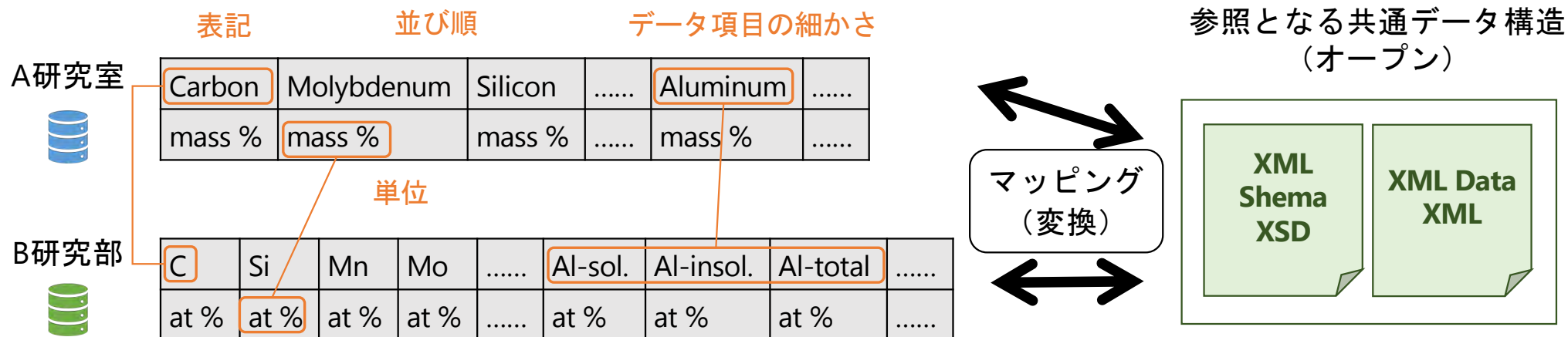
- 企業、研究室で異なるデータの整理をしている
- データ整理には理由がある
- 新しい項目が加わる

データ構造は、対象物の見方そのもの。  
固定化すると科学技術の進歩は止まる

解決方法

参照できる**拡張性の高い共通データ構造**を開発し、  
これにマッピング（変換）することで  
企業間、研究室間でデータ連携できる

現場のデータ項目、学術研究の最新成果  
を取り込んでデータ構造をアップデート

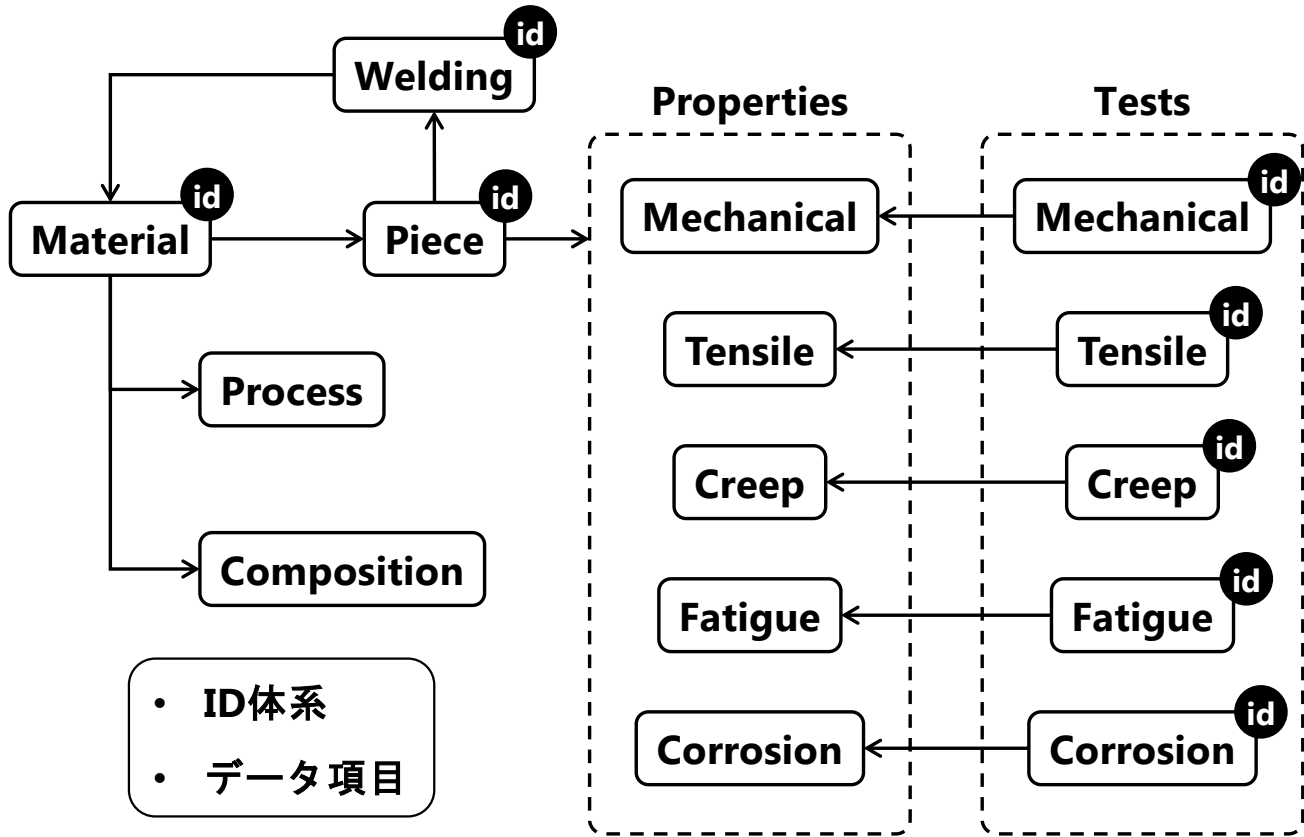


オントロジーとの接続でデータ連携へ

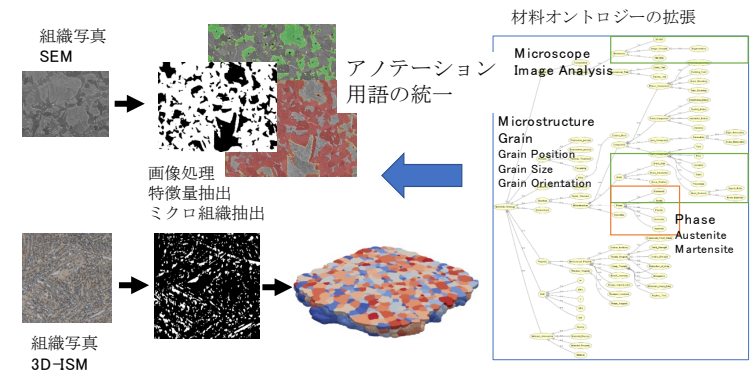


# SIPで開発したデータモデル

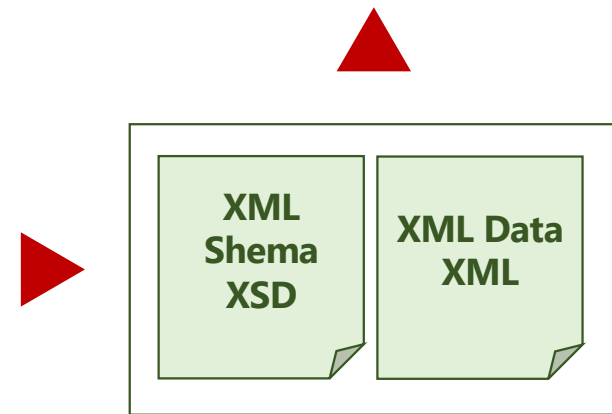
## ボトムアップのデータ記述方式設計



## トップダウンからのデータ連携



## 材料オントロジーの拡張



# SIPで開発したデータフォーマット

NIMSデータシート（クリープ・疲労）、日本鉄鋼協会、原子力研究開発機構のデータを包含するように設計

表形式：現場でのデータ入力、マスターデータ管理用として

データの次元等によって複数の表を設計

キー項目

材料情報

ヒート	C	Si	Mn
MBB	0.12	0.36	0.52
MBC	0.09	0.37	0.49
MBD	0.1	0.28	0.49

機械的性質

ヒート	試験温度	0.2%耐力	引張強さ
MBB	23	342	490
MBB	100	338	454
MBB	200	337	465

クリープ特性

ヒート	試験温度	試験応力	破断時間
MBB	500	373	712.7
MBB	500	333	2221.9
MBB	500	294	5941.6

そのほか、疲労特性等の表

変換プログラム

共通XMLスキーマ方式：プログラムで活用。キー・バリュー方式で柔軟表現。スキーマ（XSD）でデータ項目を統制

```
<property>
  <i name="rupture_time"      stress="373" temperature="400" unit="h">61</i>
  <i name="reduction_of_area" stress="373" temperature="400" unit="%">59</i>
  <i name="elongation"        stress="373" temperature="400" unit="%">31</i>

  <i name="rupture_time"      stress="333" temperature="400" unit="h">493.9</i>
  <i name="elongation"        stress="333" temperature="400" unit="%">37</i>
  <i name="reduction_of_area" stress="333" temperature="400" unit="%">60</i>

```

XML  
Schema  
Metadata  
RDF

XML  
Shema  
XSD

# データ構造は度量衡：オープンにするのが正解

A研究室のデータ整理

炭素	温度	荷重	寿命

データ構造部分のみ

▶ オープン化

データ流通

B研究所のデータ整理

Life	Test T	Test $\sigma$	Comp

▶ オープン化

秘密計算

C会社のデータ整理

組成	時間	試験温度	試験応力

▶ オープン化

さらに

領域における共通データ構造

Life	Test T	Test $\sigma$	Comp

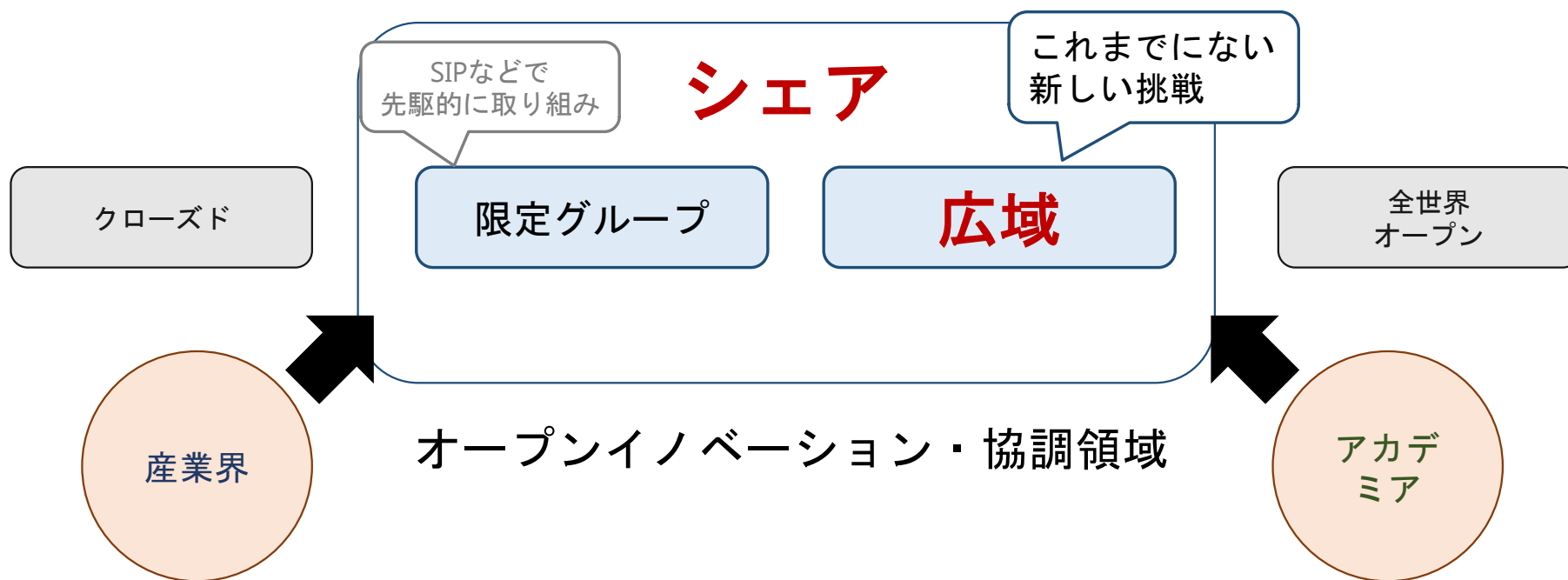
事実上標準化へ

データ構造作成の手間を低減するために多くの研究室・機関・企業等が利用

▶ データは事業・政策などの狙いに沿って、オープン・クローズドを様々な設定

# マテリアルDXプラットフォーム構想における「データ」のオープン・クローズド

## データシェアで日本のマテリアル革新力強化





最後に・・・生成AI（画像）の可能性，再び

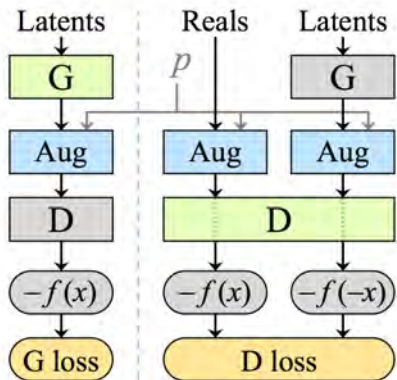
# ミクロ組織の走査電子顕微鏡画像（SEM組織）の人工生成手法の開発

**成果：**ミクロ組織の電子顕微鏡画像（SEM組織）を人工的に生成する手法を開発。リアルな画像と見分けがつかない画像を生成するアルゴリズムとして敵対的生成ネットワーク（GAN）が有名であるが、10~100万規模の学習画像が必要。本手法では、学習画像を増強する手法を組み合わせ、3,000枚の学習データからリアルなSEM組織を生成することに成功。

**ベンチマーク：**特徴の一部を切り取った小サイズSEM組織のGANを試みた例はあるが、今回対象としたDual Phase鋼が有するような、粗な海島構造と相内微細構造を同時に表現できる広範囲・高解像度のSEM組織でGANを成功させた例はない。

**アウトカムおよびインパクト：**ミクロ組織が特性を支配する多くの領域に適用できる汎用性の高い技術。

学習画像増強を組み込んだGANアルゴリズム\*

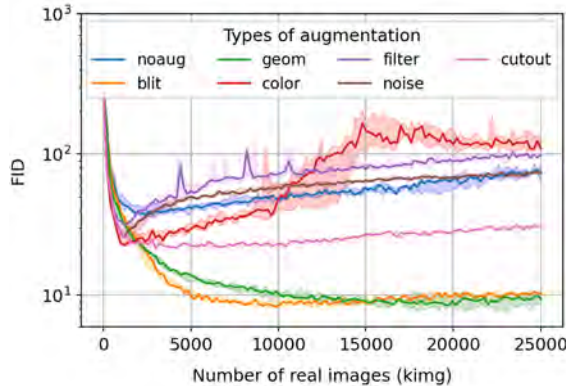


\* Kerras et al. In Proc. NeursIPS 2020.

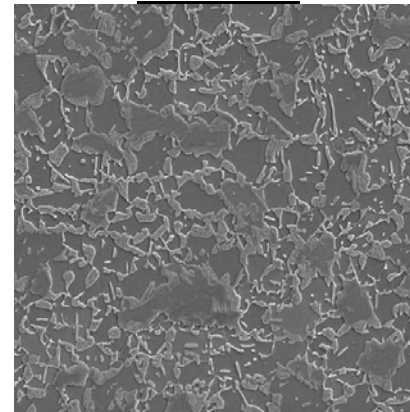
\* Dual Phase鋼：硬質マルテンサイトと軟質ファライトを組み合わせ強度・延性バランスを実現する自動車用鋼板。両相の幾何学的な配置、相内微細構造が特性を支配。

G. Lambard et al. Scientific Reports, 13, 566 (2023).

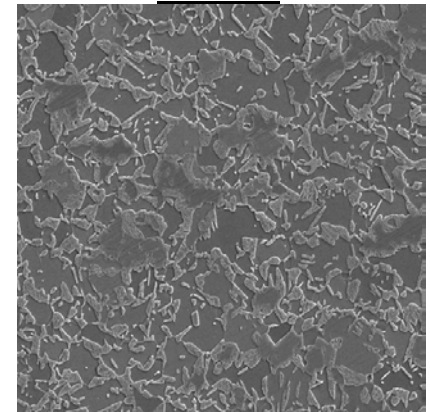
学習画像増強手法の適切な選択が重要



人工生成 Dual phase鋼\*



実観察



マルテンサイト/ファライト海島構造とマルテンサイト微細構造を再現

- 応用：
- ・ プロセスからの組織予測
  - ・ 特性からの組織提案

## まとめにかえて：専門家の「知」を工学的価値へ！

- デジタル研究基盤が整いつつある
  - データプラットフォーム（MatNavi・実験データ登録RDE・AI解析システム）
  - MInt（モジュール・ワークフロー）
- 情報資産の共用化：**知の再利用率**を高める
- データ駆動型研究の積極的な活用

# マテリアル革新力強化に向けて，3つの柱で日本全国をDX化

ためる

データ中核拠点  
クラウドデータ基盤  
DICE

つくる

マテリアル  
先端リサーチ  
インフラ事業  
ARIM

つかう

データ  
創出・活用型  
マテリアル開発  
プロジェクト  
DxMT

文部科学省  
マテリアルDX  
プラットフォーム事業

