30周年記念号原稿

新材料開発のためのデータシステム試論(1)ーアジェンダ設定ー

Preliminary Study on Data System for New Materials

Development(1)-Articulation of Agenda-

岩田修一^{1*}

Shuichi IWATA^{1*}

1 事業構想大学院大学

The Graduate School of Project Design

〒107-8411 東京都港区南青山3-13-16

E-mail: iwatacodata@mac.com

*連絡先著者 Corresponding Author

材料は社会を構成する基本的な要素のひとつであると位置付け、材料に関するデータ・情報・知識は基本的な要素を組み合わせることで社会を構成するための「言語」と考えて、将来の材料データシステムに関する基本仕様を検討した。本論文ではこの原点からの検討の第一報として、これまでの当該分野の研究開発の経緯を総括し、将来の材料データの流通と情報ライフサイクルを想定しながら、システムとしての基本仕様の考え方と実現するための主要な検討項目を今後の30年のアジェンダとして提示した。

Material are positioned as basic elements to make our society, and data, information and knowledge on materials are assumed as “language” to implement our society. Based on this metaphor “language” the author investigated basic specifications of future materials data systems. In this first report delivered from the starting point, the concept of the basic specifications as a system and important issues about the implementation are reported with a brief summary on previous R&Ds of materials data systems and next 30 years perspectives on dissemination and value-added life cycle of data/information/knowledge.

キーワード: 材料、データベース、システム仕様、システム開発、アジェンダ設定

Material, Database, System Specification, System Development, Articulation

1. はじめに

今世紀に入ってから世界中でデータ駆動型の材料システムとAI技術を組み合わ

せた大規模な研究開発プロジェクトが始まっている。その中で国家レベルのプロジェクトとして華々しく口火を切ったのは

米国のMGI (Materials Genome Initiative) である。2011年に米国の国際競争力を強化するための国家重点目標のひとつとして位置づけられ、その後、類似のミッションで、日本、欧州、中国においても類似のプロジェクトが開始された。それぞれの国の産業や研究者の事情にあわせて研究内容や位置付けを少しずつ変え、MI、MGE, Marvel等々の略称で国別あるいは地域別に実施されているが、グローバルな本格的連携には至っていない。米国MGIについては経済的な効果について年間123~270BUS \$の貢献があったと分析され、2018年秋には成果についての総合報告が公表されることになっている。[1], [2], [3]

いずれも20世紀後半の長いインキュベーションの期間を経て開始されたプロジェクトで、その背景には今世紀に入ってから急速なデータ科学、計算科学、人工知能、クラウド等々の要素技術の進歩と普及、そして情報環境や経済環境の充実がある。科学技術分野の共時性を示す格好の事例ではあるが、本シリーズ論文では1960年代の萌芽的な挑戦にも遡求しながら通時的な視点も加え、将来を設計することにする。

この半世紀を超える時間の中での社会システムや情報システムの大きな変化を俯瞰すれば、集中から分散、占有から共有、テキストからマルチメディア、ウォーターフォール型からアジャイル型開発、SQLからNoSQL、オンプレミス型からクラウド型、知財保護からオープン化等々の多様性の拡大がある。特に今世紀に入ってから情報資源の共有と活用の状況は大きく様変わりしてきた。

この大きな変化については、適宜、適応と総括をしながら上記のプロジェクトの

進行と並行して展開する議論を組み込み、持続可能性のあるグローバルな材料データの共通基盤、すなわち人類全体の公共財としての材料コモンズ実現のための道筋について論述することにする。本試論(1)は全体像を素描するための作業仮説の紹介である。

2. 経緯と課題設定

1970年に合金設計、材料設計と研究題目を設定して、実験室でなくコンピュータ上で所望の材料の設計をするためのプラットフォームの開発に着手した。きっかけは、2017年に廃炉が決まってしまった高速増殖炉原型炉「もんじゅ」の後継の商業炉に使う核燃料被覆材候補のバナジウム合金の研究開発である。

一般に画期的な特性を発揮する物質の発見の物語は試行錯誤やセレンディピティーに期待する活動の代表例として語られることが多い。また実用材料の信頼性を高めるためには想定する使用条件にしたがって緻密な実験計画を策定しての膨大な実証試験の積み重ねが必要である。材料の研究開発における経験とカン、偶然の専制、時の運まかせという状況からの脱皮：はいスループットが目標であった。

原子炉材料は高温かつ強力な放射線場での使用という物質としては全く未経験の新しい使用条件での材料の大規模な研究開発であったため、核エネルギーシステムで使用する材料の研究開発の事例は既往の科学技術の成果を駆使した候補材料の戦略的探索の範例であった。核的性質は核種固有のエネルギー依存の特性であったため同位体と元素の組成と核特性との四則演算で候補となる材料の物質の選定

は可能であった。媒体中での中性子のエネルギー、密度分布、放射線の減衰については詳細なモデル計算が必要であったが、順問題としての計算手順は準備されていた。

システム中での役割を負った物質としての材料の特性に関しては構造鈍感な特性と構造敏感な特性とに大別される。材料の構造鈍感な特性は、原子の2体間相互作用あるいは小規模の原子から構成される仮想的な原子クラスターの特性との相関が高い。構造鈍感な特性の代表例としては、ヤング率、熱膨張係数などがある。一方、構造敏感な特性は、アボガドロ数レベルの数の構成原子が相互作用する複雑な集団運動の結果、例えば腐食、疲労、クリープのような特性である。具体的な説明は本論文に続くシリーズ論文の中で詳述するが、データ記述の結果としては構造鈍感な特性のメタデータは構造敏感な特性のメタデータに比較して圧倒的にフィールド数の少ない記述になる。こうしたメタデータの違いを反映して構造鈍感な特性群を活用した四則演算で上記の核的特性で絞り込んだ候補材料のさらなる絞り込みが実施され、人工物としての核エネルギーシステムの概念設計が実施された。

核的性質から構造鈍感な特性にいたる特性の四則演算による候補材料の選定絞り込みの手順は1969年にE. F. Coddによって提案された関係モデルとの親和性が高く、そのための材料データシステムを構想することは容易であった。メタデータが複雑でない核データ、構造鈍感な基礎物性を関係モデルで簡便なデータベースとして実装することは当時のデータベース管理システムでも実装可能であった。プロトタイプがメインフレームコンピュータの端

末で操作できるようになると、そのツールの普遍性に関する純粋体験（関係代数、キーボード、GUI、材料実験）から材料データシステムの次の50年後の仕様は直感的に素描することができた。すなわち構造-特性相関という多変数の双方向の写像というアイデアの受肉であり、構造特性に関する遡求：電子スピン構造の第一原理計算、イメージ情報を活用した構造の多様なダイナミックスの解釈と活用に関するAI（人工知能）、多元的な事象に関する可視化と抽象化・粗視化などから構成される。

その後の20世紀後半の情報環境の大きな変化は高機能化、高速化、低価格化、大容量化、分散化の歴史である。具体的な達成目標を設定し、研究開発計画を策定し、決然たる意志によって、組織的に目標に到達するというプロジェクト群が社会を牽引した時代でもあった。未来は予測可能で、制御可能であるという確信の下に、予測不可能な事態には自在に適用可能だという確信に衝き動かされた時代でもあった。こうしたウォーターフォール型の戦略が必ずしも有効でないと人々が気付き始めたのは1990年代に入ってからであるが、材料データシステムの研究開発においてはデータ発生のエコロジーを軽視して依然としてウォーターフォール型の研究開発戦略が採用され、多くの失敗を繰り返した。

今世紀に入ってから材料データシステムの研究開発は、新しい将来像を求めている模索の時期に入っている。近年の情報環境の格段の進歩を反映して、過去に失敗した諸課題への再挑戦が始まった。そして個別的な再挑戦の成果のパッチワークによって形成された新たな環境下：材料プラットフォームでの新たな純粋体験-ビッグデ

ータ、深層学習のような拡大した多様性と階層性を楽しむ人々が増えてきた。さらにはIoT/TSU、VR/AR/MR、3Dプリンターなどの実空間とサイバー空間とをつなぐ新たな機器が普及しつつあり、そうした情報環境の変化が新たな場を創生しつつある。しかしながらそうした情報環境が、メタデータを確立することでさえ必ずしも容易でない構造敏感な特性が重要である工業材料の情報流通と活用には何処まで有効なのかは予測できない。

工業材料という産業分野は、複数の主体がひたすら便益や利潤を追求することで大量生産、大量消費、大量廃棄に基づく産業社会パラダイムの骨格を形成し、全体としては経済的合理性や社会的合理性を達成してきた分野である。試行錯誤を通して進化してきた制度、規制、標準のようなルールと科学的合理性や技術的合理性の断片とを目的に合わせて有機的に組み合わせることで、多様な現場の問題をひとつひとつ解決をしてきた。そうした文脈依存の合理性が複合的に作用して現代社会を支えてきたと考えることもできるが、そうした工業材料の取り扱いではデータの生産から活用、廃棄に至るライフサイクルのさまざまな局面での慎重な配慮を要請する。

一人一人が自分の視点と表現でデータを整理し、クラウド上にアップロードし、データの共有と活用をする時代である。データを巡る国際的状況は新しい時代を迎えている。競争と協調、共有と活用、集中と分散、標準化と多様化がダイナミックかつ複雑に絡み合っ、量的にも大きく増大し、質的にも極めて拡大し多様化している。多様なデータ表現が混在する時代における時代の材料データシステムのエコロジ

ーについての洞察と展望が必要である。

3. 材料コモンズへのアジェンダ

以上の考察を基に今後の材料コモンズ実現のための核となる論点を示す。

1. 認知論：物質・材料の特性・ふるまいからフィールドデータまでの理解とデータ・情報・知識の表現等。
2. 実体論：データ活用方法；データのトレーサビリティ；情報流通市場；製造・物質・エネルギー収支の把握等。
3. インターフェイス論：（人間、機械、物質・材料、データ・情報・知識）相互間のコミュニケーションの分析と実装等。
4. 組織論：相互運用可能性、集合知、生産性の高い場：エコロジーの創出と保全、ストーリーの共有等。
5. 実践論・設計論・価値論：ロードマップの策定とプロトタイプ的设计・開発；デジタル化事業モデル；品質/信頼性と価格、知財、商品と公共財、データ戦略等々のマルチレンマ問題の超克等。

次回以降は代表的な材料データプロジェクトの具体例を通して上記論点についての検討を逐次進め30年後のグローバルな材料コモンズ実現への道程を示す。

参考文献

- [1] <https://mgi.nist.gov> (2018年9月25日参照)
- [2] <https://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d.html> (2018年9月25日照)
- [3] <https://search.usi.ch/en/projects/810/marvel-materials-revolution-computational-design-and-discovery-of-new-materials> (2018年9月25日参照)
(2018年10月19日 J-STAGE早期公開)