

令和元年度  
特許出願技術動向調査 結果概要

マテリアルズ・インフォマティクス

令和2年2月

特 許 庁

問い合わせ先  
特許庁総務部企画調査課 知財動向班  
電話：03-3581-1101（内線2155）

# 令和元年度特許出願技術動向調査 －マテリアルズ・インフォマティクス－

## 1. はじめに

### (1) 調査の背景・目的

本調査では、近年、特に注目されている「マテリアルズ・インフォマティクス」分野について調査分析を行うものとする。

調査対象とするマテリアルズ・インフォマティクス（以下、文中では「MI」とする）は、効果的に材料開発を行うデータ科学を用いた新材料開発手法である。

近年では、「Materials Genome Initiative（米国：2011年発足）」、「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（日本：2015年発足）」などの各国のプロジェクトが既に始まっており、それぞれ「Materials Genome Project（米国）」、「Mat Navi（日本）」などの材料データを収録したデータベースの開発が進んでいる。また、MIは素材系メーカーだけでなく、AI技術を開発するIT系メーカーも開発に取り組んでいる報道がなされており、材料業界に対して大きな環境変化が起き始めている。

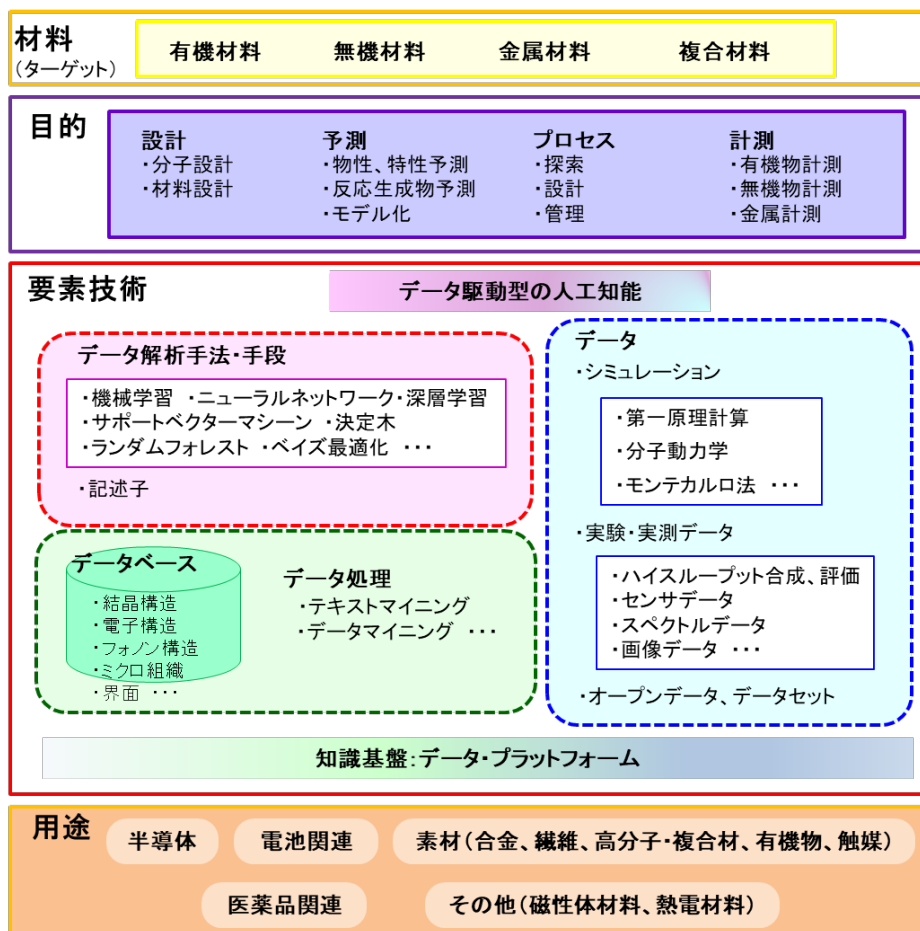
従来の試行錯誤を中心とした材料開発手法に加えてデータ科学を用いた手法を取り入れることから、MI技術の進展は、材料開発工程及びそれを支える研究開発に大きな影響を与えることが予想される。これらの変化を踏まえた、特許庁における審査体制を構築するために、MI技術自体、及びMI技術により与えられる新材料開発の動向について把握する必要がある。また、大量データを必要とするMI技術は、データを共有するデータベースの構築が必要となるが、各企業・大学間における材料データの利活用に関する諸課題が、MI技術の進展に影響を与えている。

このような背景の下、MIに関する特許・論文の動向等を調査することで、研究開発の状況を把握し、今後の展望について検討する。

## (2) 調査の方法

材料開発を目的とした MI の技術俯瞰図を図 1 に示す。  
調査方法としては、この技術俯瞰図に基づき解析を実施する。

図 1 MI の技術俯瞰図



出典：三菱ケミカルリサーチ（MCR）が作成

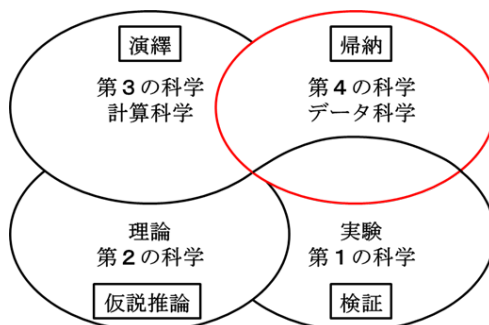
## (3) MI（マテリアルズ・インフォマティクス）の定義

MI は、第 4 の科学と言われるデータ科学（図 2 赤枠参照）を用い、効率的に材料開発を行う新材料開発手法である。ハイスループット材料探索のためのハイスループット合成・評価等により、得られた系統的な実験・実測データの蓄積と、そのデータマイニングなどのデータ処理、そして、機械学習<sup>1</sup> (machine learning)・深層学習<sup>2</sup> (deep learning) などを使ったデータ解析手法・手段を構成要素として含む。これらの技術の中でも、近年、特に進展が著しいデータ駆動型の人工知能（機械学習・深層学習・ニューラルネットワーク等）が技術進展の主体となっている。

<sup>1</sup> 計算機がデータから自動的に学び、データが含む情報を引き出す技術。  
パターン学習と機械学習 上・下 丸善出版（2012 年）

<sup>2</sup> 多層のニューラルネットワークによる機械学習

図2 対象技術範囲模式図 科学研究の4本柱と推論の基本形式の関係：赤枠部分



出典：「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集」（2019年）p.3 技術情報協会

#### (4) 調査範囲・手法

本調査では、特許文献、非特許文献について、以下の調査範囲、調査手法により調査を行った。

##### ア. 調査範囲

###### ・特許文献

出願年（優先権主張年）：2010～2017年

出願先国・地域：日本、米国、欧州、中国、韓国、インド

使用した商用データベース：Derwent Innovation (Derwent World Patents Index<sup>3</sup>)

###### ・非特許文献

発表年：2010～2018年

使用した商用データベース：Scopus<sup>4</sup>

##### イ. 調査手法

###### ・特許文献

キーワード等を用いることによって、商用データベースで本調査の対象となる特許文献の母集合を得た後、母集合に含まれる特許文献を1件ずつ読み込み、あらかじめ本調査のために独自に設定した技術区分に分類した。

###### ・非特許文献

キーワード等を用いることによって、商用データベースで本調査の対象となる論文の母集合を得た後、母集合に含まれる論文の抄録を1件ずつ読み込み、あらかじめ本調査のために独自に設定した技術区分に分類した。

## 2. 市場環境調査

### キーテクノロジー製品の市場調査（図3～図6）

MIが適用される材料用途は多様であるが、日本の強みであり、戦略的に強化していかなければならない材料用途での成果が期待される。そこで本調査では、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の情報収集事業「平成29年度 日系企

<sup>3</sup> キャメロット ユーケイ ビッドコ・リミテッドの登録商標

<sup>4</sup> エルゼビアの登録商標

業のモノとサービス・ソフトウェアの国際競争ポジションに関する情報収集」の中でキーテクノロジー製品と位置付けられているカテゴリーの材料製品（半導体、電池関連、素材）に医薬品を加えた四製品を、主な用途として特定することにした。

図3 半導体 世界市場規模の推移

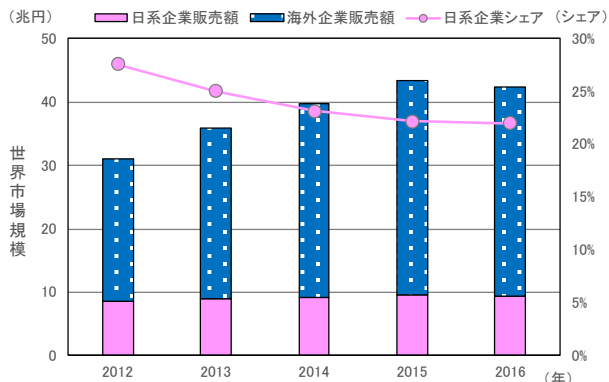


図4 電池関連 世界市場規模の推移

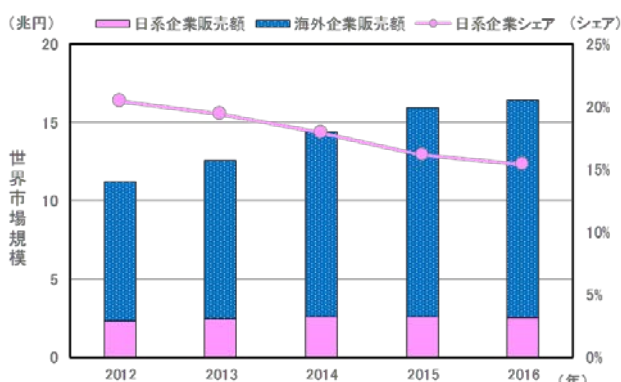


図5 素材 世界市場規模の推移

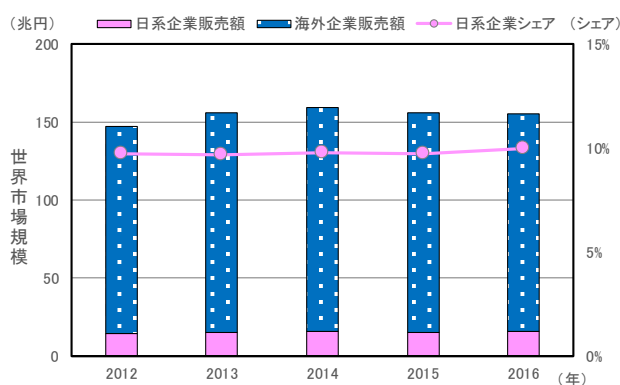
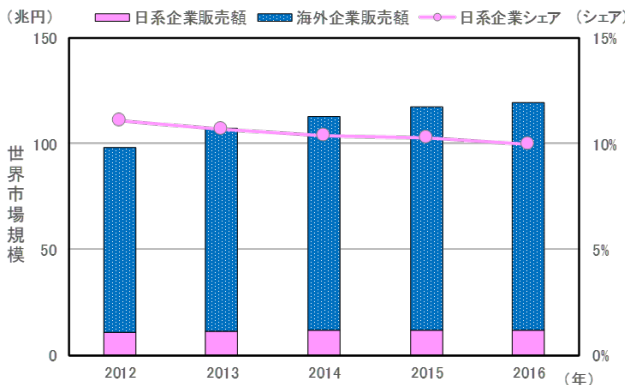


図6 医薬品 世界市場規模の推移



出典：新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 平成 29 年度成果報告書「日系企業のモノとサービス・ソフトウェアの国際競争ポジションに関する情報収集 ①情報収集項目「モノを中心とした情報収集と評価」のデータを基に MCR が作成

### 3. 政策動向

#### 主要国・地域の政策動向（図7～図10）

2011年の米国のMIに関する政策「Materials Genome Initiative (MGI)」発足後、各国でMIの国家プロジェクトが始まっている。米国が若干早くMI政策をスタートしているが、他国も直ちに追随し、横一線の状況である。各国のプロジェクトの推移を以下に示す。

図7 日本のMI国家プロジェクト

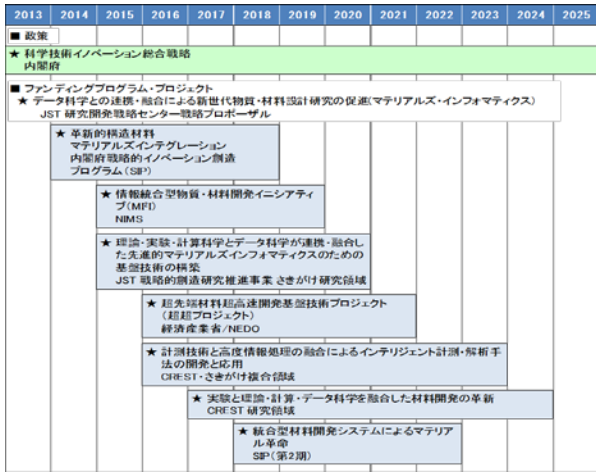


図8 米国のMI国家プロジェクト

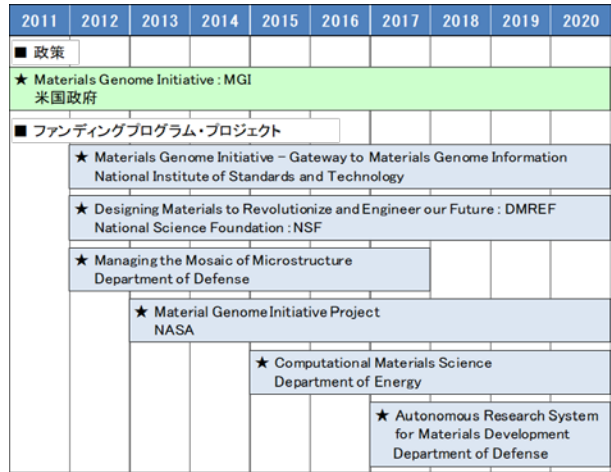


図9 欧州のMI国家プロジェクト

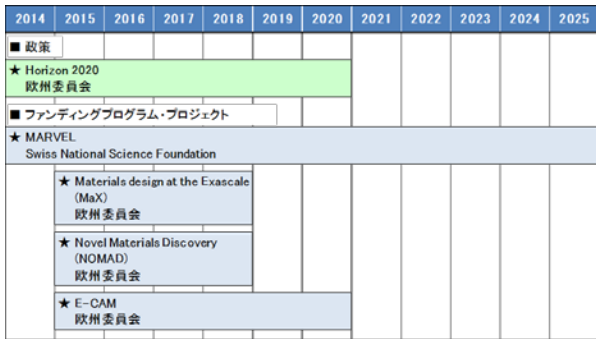
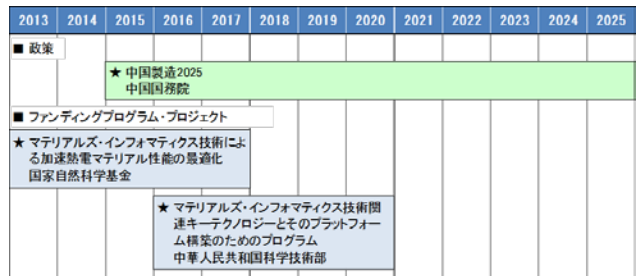


図10 中国のMI国家プロジェクト

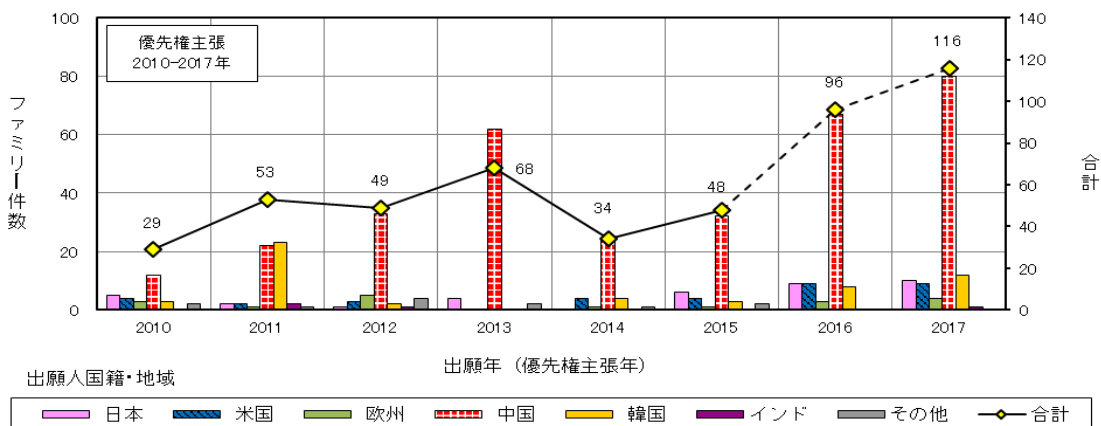


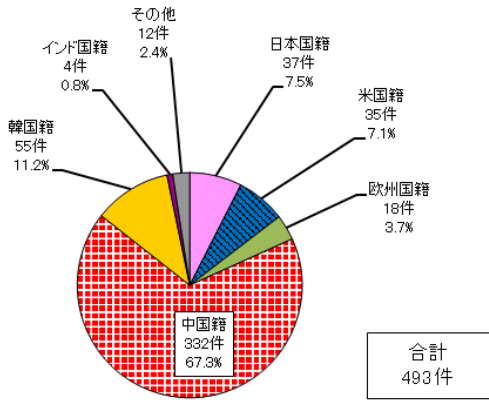
4. 特許出願動向

(1) 全体動向 (図11)

ファミリー件数の合計 (2010年~2017年) は493件で、このうち出願人国籍別で最も多いのは中国の332件で全体の67.3%を占めている。次いで、韓国が55件(11.2%)、日本が37件(7.5%)、米国が35件(7.1%)、欧州が18件(3.7%)、インドが4件(0.8%)である。2015年から出願件数が伸びている。

図11 出願人国籍・地域別ファミリー件数推移及びファミリー件数比率  
(出願先：日米欧中韓印、出願年(優先権主張年)：2010-2017年)



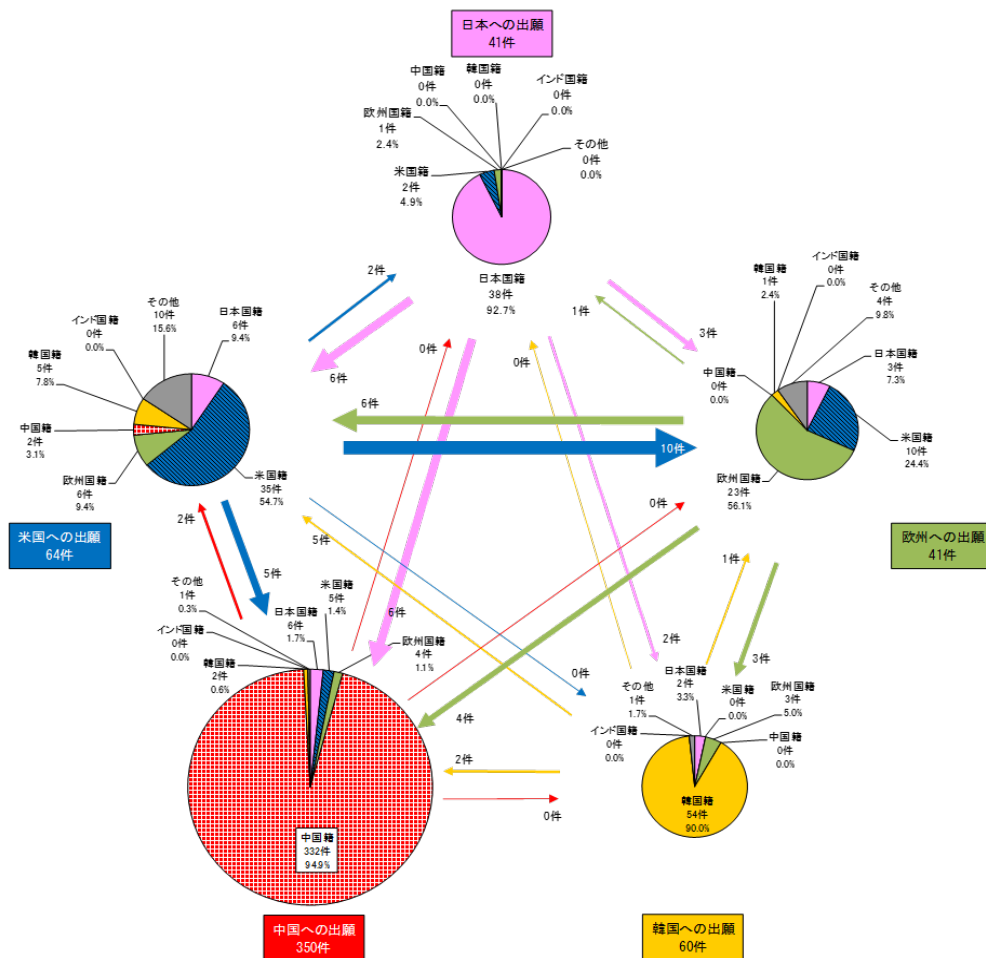


(2) 出願先国・地域別一出願人国籍・地域別出願件数収支 (図12)

出願においては、欧米への出願は各地域から行われているが、日本、中国、韓国への出願は自国の出願が主となっている。

図 12 出願先国・地域別一出願人国籍・地域別出願件数収支

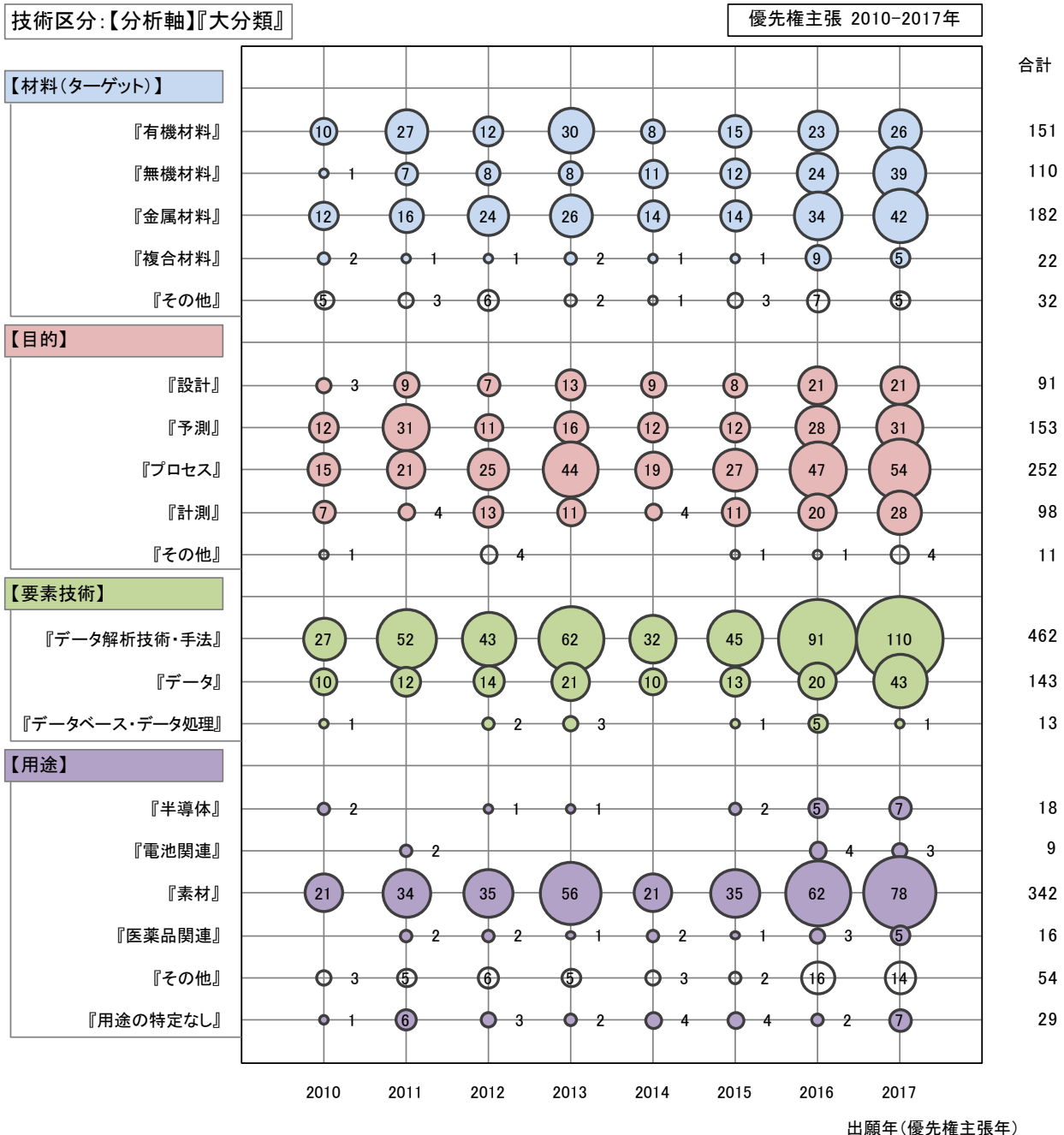
(出願先：日米欧中韓印、出願年(優先権主張年)：2010-2017年)



### (3) 技術区分の出願動向 (図13)

MI に関する技術区分の各分析軸の大分類のファミリー一件数推移を示す。

図 13 技術区分別一ファミリー一件数推移 (出願先: 日米欧中韓印、出願年 (優先権主張年): 2010-2017 年、技術区分: 大分類)



### (4) 出願人別動向 (表1)

出願人別ファミリー一件数上位ランキング (全体) では、1位がCHEMESSEN INC (韓国)、2位が浙江大学 (中国)、3位が東北大学 (中国) で、中国では大学からの特許出願が多い。



表1 出願人別ファミリー件数上位ランキング（全体）

（出願先：日米欧中韓印、出願年（優先権主張年）：2010-2017年）

順位	出願人(国籍)	件数
1	CHEMESSEN INC(韓国)	23
2	浙江大学(中国)	18
3	東北大学(中国)	17
4	IBM CORP(米国)	11
5	太平洋セメント	10
6	国家電網(中国)	8
7	中南大学(中国)	7
8	鞍鋼集団(中国)	6
8	北京航空航天大学(中国)	6
8	北京科技大学(中国)	6
8	重慶科技学院(中国)	6
8	嶺南师范学院(中国)	6

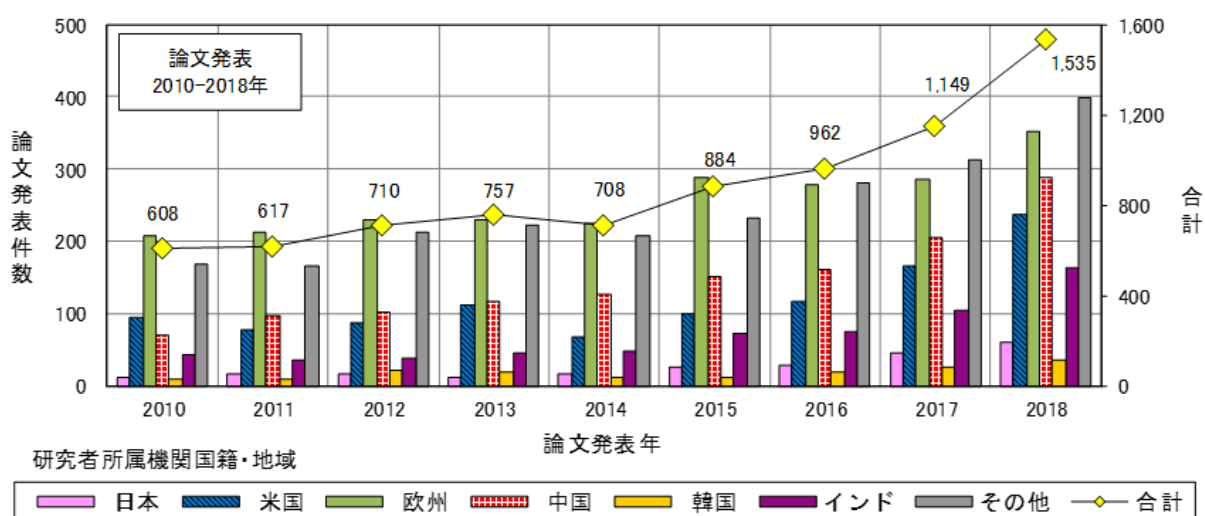
注：個人の出願人は除く

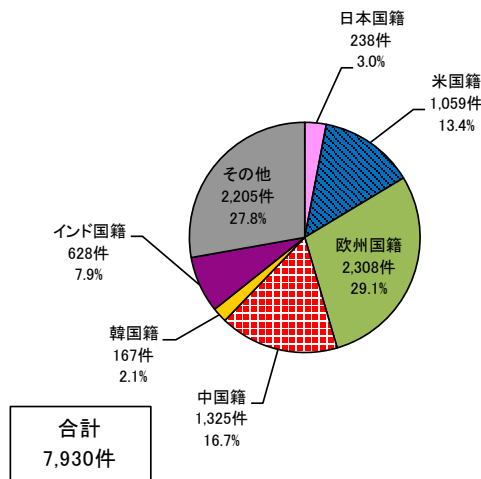
## 5. 研究開発動向

### （1）全体動向（図14～図16）

論文発表件数の合計（2010年～2018年）は7,930件で、このうち研究者所属機関国籍・地域別で最も多いのは、欧州の2,308件で全体の29.1%を占めている。次いで、その他が2,205件（27.8%）、中国が1,325件（16.7%）、米国が1,059件（13.4%）、インドが628件（7.9%）、日本が238件（3.0%）、韓国が167件（2.1%）である。論文発表件数は、各国・地域で堅調に増加している。

図14 研究者所属機関国籍・地域別一論文発表件数推移及び論文発表件数比率  
（論文発表年：2010-2018年）





<欧州国籍（2,308件）の内訳>

順位	研究者所属機関国籍・地域	件数
1	トルコ	253
2	ドイツ	243
3	フランス	239
4	イギリス	236
5	イタリア	208

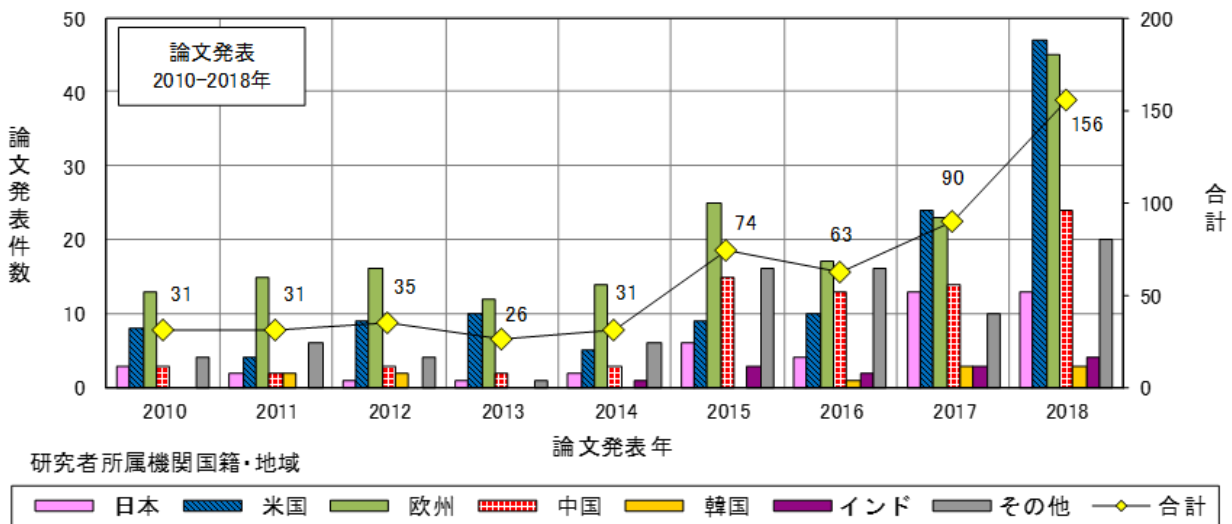
<その他の国籍の上位5の国籍・地域>

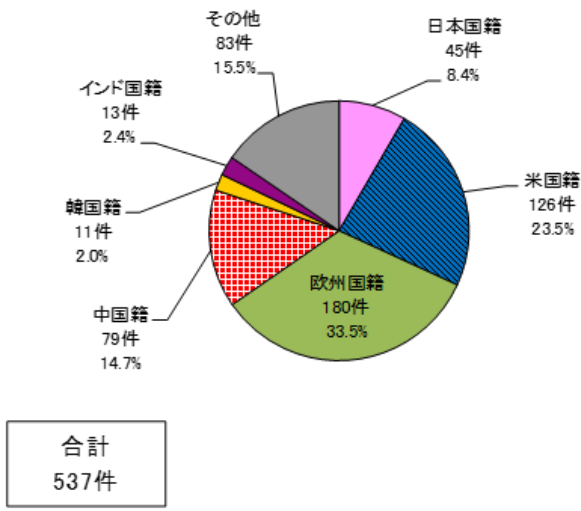
順位	研究者所属機関国籍・地域	件数
1	イラン	724
2	ブラジル	215
3	カナダ	171
4	ロシア	135
5	オーストラリア	129

主要論文誌に限定した研究者所属機関国籍・地域別の調査を実施した。論文誌の限定は、最新5報の投稿論文誌とした。論文の母集団7,930件が、この限定で537件となった。

論文誌を限定した母集団での国籍別ランキングは、1位が米国、2位が中国、3位が日本となった。

図15 論文誌限定研究者所属機関国籍・地域別一論文発表件数推移及び論文発表件数比率（論文発表年：2010-2018年）





<欧州国籍（180件）の内訳>

順位	研究者所属機関国籍・地域	件数
1	ドイツ	34
2	フランス	28
3	スイス	17
4	イタリア	16
5	イギリス	15
6	スペイン	14
7	デンマーク	7
8	ベルギー	6
8	オランダ	6
8	ポルトガル	6
11	オーストリア	5
11	ポーランド	5
13	ハンガリー	3
13	スウェーデン	3
13	セルビア	3
16	チェコ	2
16	ギリシャ	2
16	アイルランド	2
19	フィンランド	1
19	クロアチア	1
19	ノルウェー	1
19	ルーマニア	1
19	スロベニア	1
19	トルコ	1

<その他（83件）の内訳>

順位	研究者所属機関国籍・地域	件数
1	カナダ	14
2	オーストラリア	12
2	イラン	12
4	ブラジル	9
5	台湾	7
6	マレーシア	5
6	シンガポール	5
8	香港	4
9	ロシア	3
9	サウジアラビア	3
11	エジプト	2
12	アラブ首長国連邦	1
12	イスラエル	1
12	カンボジア	1
12	クウェート	1
12	メキシコ	1
12	プエルトリコ	1
12	ウクライナ	1

本調査（対象論文数：7,930件）で実施した研究開発動向調査のMI発表論文の著者数を、以下に示す。論文著者数から見た研究者数において、日本は米国の約1/4、中国の約1/6となっている。

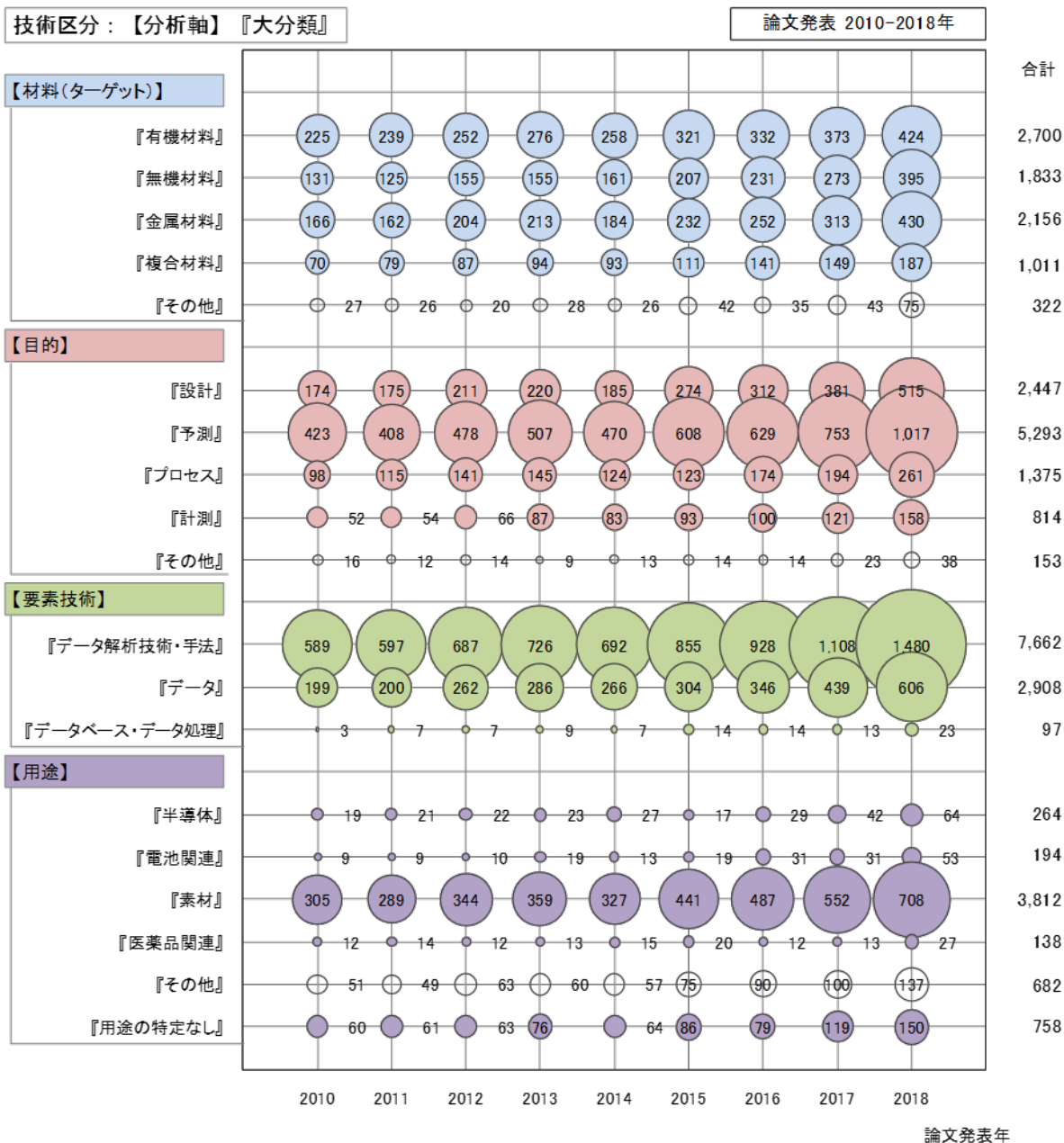
図16 論文著者数から見たMI研究者数

国籍・地域	件数	研究者数
日本	238	1,028
米国	1,059	4,448
欧州	2,308	10,413
トルコ	253	686
ドイツ	243	1,220
フランス	239	1,668
イギリス	236	1,058
イタリア	208	964
中国	1,325	5,995
韓国	167	659
インド	628	1,807
その他	2,205	7,643
イラン	724	1,813
ブラジル	215	1,063
カナダ	171	601
ロシア	135	538
オーストラリア	129	528

## (2) 技術区分別動向 (図17)

MIに関する技術区分の各分析軸の論文発表件数推移を示す。

図17 技術区分別論文発表件数推移 (論文発表年：2010-2018年、技術区分：大分類)



## (3) 研究者所属機関別論文発表件数ランキング (表2)

研究者所属機関別一論文発表件数上位ランキングでは、1位がイスラム自由大学(イラン)、2位がフランス国立科学研究センター(CNRS)(フランス)、3位がインド工科大学(インド)である。日本国籍では、物質・材料研究機構(NIMS)、東京大学が、ランクインしている。

表 2 研究者所属機関別—論文発表件数上位ランキング（論文発表年：2010–2018年）

順位	研究者所属機関(国籍・地域)	件数
1	ISLAMIC AZAD UNIV(イラン)	252
2	フランス国立科学研究センター(フランス)	140
3	INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY (IIT) (BANARAS HINDU UNIV)(インド)	139
4	中華人民共和国教育部(中国)	110
5	AMIRKBAIR UNIV OF TECHNOLOGY(イラン)	108
6	カリフォルニア大学(米国)	101
7	中国科学院(中国)	98
8	NATIONAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY(インド)	83
9	西北工業大学(中国)	63
10	重慶大学(中国)	60
11	UNIV OF TEHRAN(イラン)	52
12	山西大学(中国)	50
13	マックス・プランク研究所(ドイツ)	48
13	ケンブリッジ大学(イギリス)	48
13	SHARIF UNIV OF TECHNOLOGY(イラン)	48
16	マサチューセッツ工科大学(米国)	47
17	物質・材料研究機構(NIMS)	45
18	中南大学(中国)	44
19	浙江大学(中国)	43
20	ベオグラード大学(セルビア)	42
21	オークリッジ国立研究所(米国)	41
21	スイス連邦工科大学チューリッヒ校(スイス)	41
23	IRAN UNIV OF SCIENCE AND TECHNOLOGY (IUST)(イラン)	40
24	東京大学	39
24	北京航空航天大学(中国)	39
24	UNIV OF MALAYA(マレーシア)	39

## 6. 提言

MIの技術競争力を高めるための提言を【提言1】～【提言6】に示す。

### 【提言1】MI（マテリアルズ・インフォマティクス）を活用した研究開発に関する提言

- ・日本企業が強みとする機能性材料を通じ、素材産業を世界と戦える産業として一層強化していくことが期待されている。MIの論文発表は、AI技術の進展に同調しつつ2015年から急増し、その対象となる材料は「有機材料」、「金属材料」、「無機材料」で大きな差はないことから、今後、MIの活用が幅広い分野で不可欠となることを前提に、研究開発を進めるべきである。
- ・「物性、特性予測」に関するMIの、特許出願、論文発表は共に多い。また、「材料設計」における「条件最適化（記述子、パラメータ等）」や「低コスト化、効率化」を目的とするMI技術の論文発表が近年増加している。これらの技術にも注目して、継続的に技術向上を図っていくことが重要である。

### 【提言2】製造プロセスとデータ科学（プロセスインフォマティクス）に関する提言

- ・材料の製造プロセスにおけるデータ科学の活用が進んでおり、「プロセス」を目的とするMIの特許出願が最も多い。さらに、製造プロセスの条件検討のための「探索」に係るMIの論文発表は増加傾向にある。このことから、製造プロセス×データ科学（プロセスインフォマティクス）は、今後、ますます重要になると考える。
- ・「計測」を目的とするMIの特許出願、論文発表は、近年、共に増加傾向である。さらに、利用データは「実験・実測データ」が突出して多い。材料設計、製造プロセスの中で、様々な計測データの効率的な利用（計測インフォマティクス）が重要である。
- ・欲しい性能から材料設計・プロセス設計を行うMIの実現に向けた継続的な研究も必要である。その際に、材料と製造プロセスとの相互関係は強く複合化しているため、両者を一体で検討することも必要である。

### 【提言3】データに関する提言

- ・MIの論文発表では、実験・実測データの利用が突出して多く、シミュレーションの利用も増加傾向にある中で、データベースの強化においては、質の良い実験・実測データ、シミュレーションデータ、及びテキストデータ（特許、論文情報等の活用）の統合利用が鍵となる。
- ・データやAIは、パワーゲームの世界である。MIの論文発表では、オープンデータ、データセットの利用は増加傾向にあるものの規模は小さいことから、産学官が連携してデータベースの維持・強化に積極的に取り組んでいくべきである。そのために、データ共有するインセンティブが得られる仕組みである「エコシステム」（安全性、価値評価、成果の取扱い等）の検討が必要である。
- ・データベースの構築には、データの保存・管理を適切に行う専門人材「キュレーター」が鍵となる。このような専門人材について、キャリアパスも含めた中長期の方策の検討が重要である。

### 【提言4】MI技術産業に関する提言

- ・MIの特許出願における共同出願は、欧米諸国ではプレーヤー同士の連携が相対的に多くなっている。MI技術の進展に不可欠な材料分野とデータ科学分野の連携を促進するためには、データプラットフォームの活用が重要である。そして、ベンチャー等を含む、MI技術支援企業の新規参入を後押しする仕組みも必要である。
- ・MI技術支援企業は、材料メーカーから開示されるデータで成果が左右される。そのため、醸成された材料メーカーとの信頼関係の下、両者の強みを生かした研究開発を進めることが重要である。

### 【提言5】専門人材に関する提言

- ・ MI の活用に不可欠であるデータサイエンティストで材料分野もわかる人材が不足している。このことから、材料科学者に MI 技術を習得させる人材育成の枠組みの継続に加え、データ科学分野と材料分野の専門人材が、研究者交流、協業、マッチングなどの連携できる仕組み作りが必要である。
- ・ MI の高度人材の育成には実践経験も必要であることから、キャリアパスの扱いも含めて産学官が連携して取り組んでいくべきである。さらに、MI を活用した材料開発から製造・ビジネスまで、総合的に MI をマネジメントできる専門人材の育成も重要である。

### 【提言6】知的財産に関する提言

- ・ MI 技術を活用する上にあたり、法的保護の対象・手段を検討した上で、選択し得る手段を戦略的に検討していくことが重要となる。そのために、知財の専門家と連携しつつ、国内外の動向を把握して、知財マネジメントに取り組んでいくことが不可欠である。
- ・ 第四次産業革命、デジタル革命というグローバル環境下における大きな変化の中で、日本の素材メーカーは MI 技術の活用だけでなく、既成概念に捕らわれずにビジネスモデルを見直すことも必要である。そこで、新たに生まれたソリューションについては、それらの適切な保護について検討することも重要である。