

「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」

事後評価報告書（案）概要

目 次

分科会委員名簿	1
評価概要（案）	2
評点結果	4

はじめに

本書は、NEDO技術委員・技術委員会等規程第32条に基づき研究評価委員会において設置された「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」（事後評価）の研究評価委員会分科会（2020年11月18日）において策定した評価報告書（案）の概要であり、NEDO技術委員・技術委員会等規程第33条の規定に基づき、第64回研究評価委員会（2021年3月1日）にて、その評価結果について報告するものである。

2021年3月

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測
分析システム研究開発事業」分科会
（事後評価）

分科会長 原田 明

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 研究評価委員会
「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」

(事後評価)

分科会委員名簿

(2020年11月現在)

	氏名	所属、役職
分科 会長	はらた あきら 原田 明	九州大学大学院 総合理工学研究院 IFC 部門・物質科学部門 教授
分科 会長 代理	やまね つねゆき 山根 常幸	株式会社東レリサーチセンター 取締役 研究部門 副部門長 技術・特許調査研究部 部長
委員	おおの ゆたか 大野 雄高	東海国立大学機構名古屋大学 未来材料・システム研究所 附属未来エレクトロニクス集積研究センター 教授
	しばやま たまき 柴山 環樹	北海道大学大学院工学研究院 附属エネルギー・マテリアル 融合領域研究センター 量子エネルギー変換材料分野 教授
	じんない ひろし 陣内 浩司	東北大学 多元物質科学研究所 計測部門 高分子物理化学研究分野 教授

敬称略、五十音順

評価概要（案）

1. 総合評価

当該プロジェクトは、省エネ製品開発の加速化を下支えする計測分析機器の今後の展開を先取りしたもので、我が国の国際競争力を高めるためにも重要である。プロジェクトでは幅広いテーマが設定され、それぞれについて探索的な検討が適切なマネジメントの下に実施されている。本プロジェクトの最大の成果は、当事業の概念に具体的な道筋を付けたことであり、一部設定された数値目標についても十分に達成している。短い実施期間にも関わらず、共通試料ホルダーに見られるような直ぐに実用に結びつきそうな目に見えた成果が得られている点、さらには国際標準化に向けた計画を策定し、一部進行中である点も評価できる。今後、同じ操作を違う名称で呼ぶ等の企業ごとに異なる用語の統一を図る方法を検討し、JIS化（国内標準化）およびISO化（国際標準化）の目標に向けて着実に進めていっていただきたい。

2. 各論

2. 1 事業の位置付け・必要性について

省エネルギー製品開発の加速化を図るための材料開発に対し、これらを下支えする分析装置およびシステムの性能・機能向上は、早急に取り組むべき課題であり、省エネルギー製品開発の加速のみならず、幅広い業種に渡っての技術開発に関わる省力化、産業活動全般に渡る省エネルギーに貢献しうるものである。国際競争の現状および内外の技術動向の観点において、本事業の目的は妥当であり、かつ上位の施策・制度の目標達成のための寄与も十分である。本事業は、標準化を見据えたシステム研究であるゆえに、公共性は極めて高く、NEDOの関与が必要とされる。実施期間が2年間と短期にもかかわらず、実用化に達した性能を発揮する技術が開発されていることから、費用対効果は十分得られていると認められる。

2. 2 研究開発マネジメントについて

国内国外の技術動向と市場の動向を踏まえて、明確で適切な戦略目標が設定されている。技術力及び事業化能力を有する実施者が選定され、実用化の担い手又はユーザーが関与する体制が構築されているとともに、指揮命令系統及び責任体制が明確であったことは、適切かつ妥当であると考えられる。

また、各課題に対して、オープン化とクローズ化の方針を内容に応じて設定し、標準化を進める課題とノウハウなどの知的財産として扱う課題が、方針別に管理されたことは適切である。さらに、国際標準化を視野に入れた国内標準化を進める戦略及び計画は妥当である。

加えて、事業期間が短縮されたが、研究開発目標が十分に達成されるよう、研究開発の進捗管理がされたことも妥当であり、評価できる

2. 3 研究開発成果について

短期間にもかかわらず、CPS (Cyber Physical System) 型複合計測分析プラットフォームの基盤となる技術・知見が得られており、目標を十分に達成していると判断できる。特に共通データフォーマットは世界的に例をみない成果である。JIS、ISO での標準化を目指す新たなプロジェクトが始まっており、国際的優位性の確保や成果を普及させる取り組みもみられる。

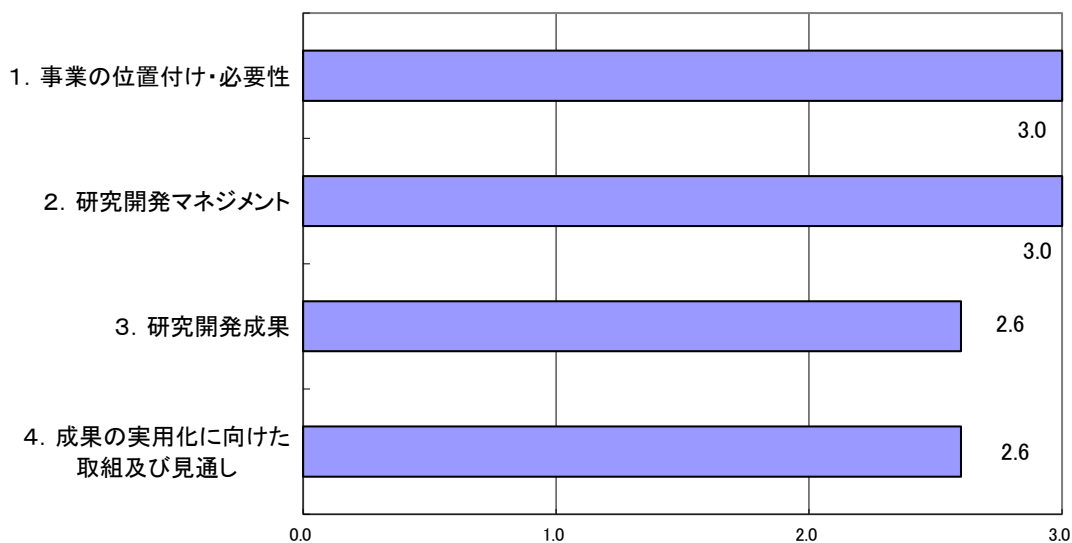
一方、順調に進捗していると判断される JIS での標準化に関しては、今後、ユーザーの求めるスピード感にいかにか合致できるかが鍵であり、またハードルが高いと予想される ISO 化に関しては、今後の展開を期待したい。

2. 4 成果の実用化に向けた取組及び見通しについて

市販の実用分析装置に開発したシステムが実装可能なこと、また本システムが実装された分析装置を材料開発メーカーが試用し、有用であることを確認していること等、成果の実用化につながる具体的な取り組みがなされた点は評価できる。

国内の計測分析装置を製造・販売している企業の製品は、海外にも多くのユーザーがいることから、共通データフォーマット技術が国内において標準化されて国際標準化されれば、今後の分析機器の販売増にも繋がると期待出来る。そのためには、海外を含めた本プロジェクトに参画していない分析装置メーカーの本開発システムの実装がキーとなるので、更なる本開発システムの有用性の PR や国際標準化の推進を期待したい。また、企業ごとに異なる用語（同じ操作を違う名称で呼ぶ等）を、どの様に揃えていくかの戦略は、多数の競争相手がある中で進めなければならない話であり、戦略を持って進めていっていただきたい。

評点結果〔プロジェクト全体〕



評価項目	平均値				
	3.0	A	A	A	A
1. 事業の位置付け・必要性	3.0	A	A	A	A
2. 研究開発マネジメント	3.0	A	A	A	A
3. 研究開発成果	2.6	A	A	B	B
4. 成果の実用化に向けた取組及び見通し	2.6	A	A	B	B

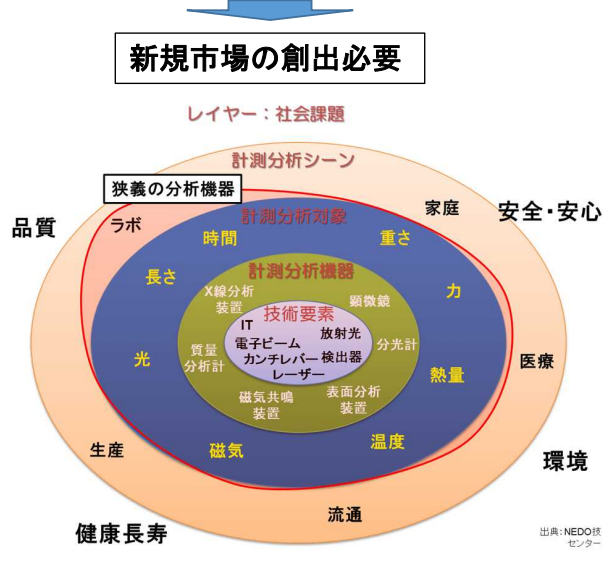
(注) 素点：各委員の評価。平均値は A=3、B=2、C=1、D=0 として事務局が数値に換算し算出。

〈判定基準〉

- | | |
|--------------------|--------------------------|
| 1. 事業の位置付け・必要性について | 3. 研究開発成果について |
| ・非常に重要 →A | ・非常によい →A |
| ・重要 →B | ・よい →B |
| ・概ね妥当 →C | ・概ね妥当 →C |
| ・妥当性がない、又は失われた →D | ・妥当とはいえない →D |
| 2. 研究開発マネジメントについて | 4. 成果の実用化に向けた取組及び見通しについて |
| ・非常によい →A | ・明確 →A |
| ・よい →B | ・妥当 →B |
| ・概ね適切 →C | ・概ね妥当 →C |
| ・適切とはいえない →D | ・見通しが不明 →D |

◆事業実施の背景と目的

- 計測分析機器は我が国の科学や産業技術の発展を支える重要な基盤。計測分析機器産業の継続的な発展は、我が国の産業競争力を維持する上で必要不可欠である。
- 計測分析機器産業の発展には、絶え間ない技術開発投資による技術革新が必要とされている。我が国の計測分析機器産業は分野によっては海外の巨大計測分析機器メーカーからの強い攻勢にさらされており、全体としてもかつての強みを失う危険をはらんでいる。



- 製品の高機能化や開発期間の短期化等に伴い、**課題解決の難度が高まっている。**
- 問題解決に**複数の計測分析手法が用いられることが常態化**している。
- 研究者には、複数の計測分析手法の**結果を統合しさらに高度な結論を導き出す能力**が要求される。

計測分析のトレンド：
カーボンナノチューブ開発の例

液中でのCNTの分散・凝集過程評価
・粒度分布測定装置
SALD-7100

微量CNTの純度・熱特性評価
CNTの結晶性と耐熱性の評価
マイクロ熱量測定装置
TGA-50

比表面積と吸着特性
高速比表面積/細孔分布測定装置
アサップ 2020 シリーズ

凝集分散
微量測定
純度
直径
観察

SWNTの近赤外PL3次元分布測定
近赤外フォトルミネッセンス測定システム
NIR-PL System

CNTの紫外可視近赤外分光光度測定
紫外可視近赤外分光光度計
SolidSpec-3700 UV-3600

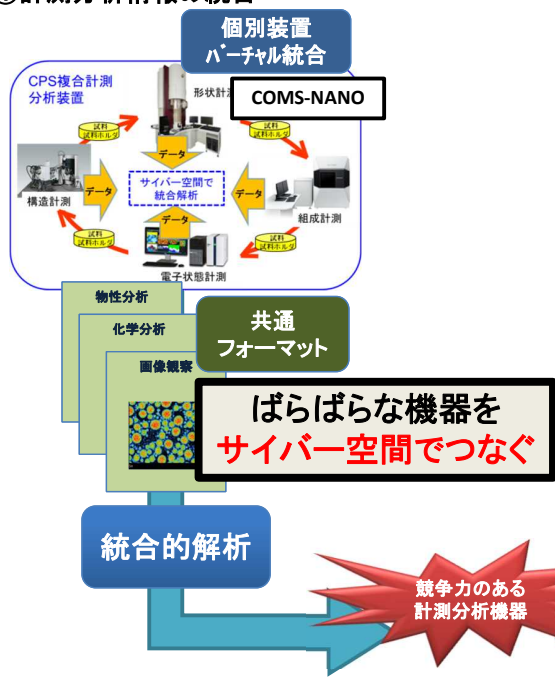
CNTの直径測定
CNTの結晶性と耐熱性の評価
ラマン分光光度計
HoloProbe モニタリングシステム

CNTの直径測定
CNTの精製前後の観察
CNTのポリマーコンポジット試料の観察
走査型フローブ顕微鏡
SPM-9600

あらゆるナノテク材料を観察・測定
ナノサーチ顕微鏡
SFT-3500

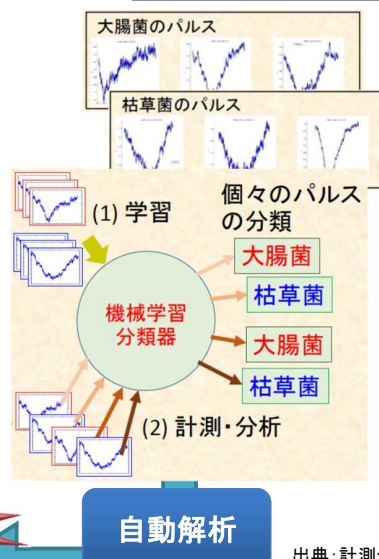
今までバラバラだった計測分析機器を、IoT技術を活用して「つなぐ」とAI連携により、**非専門家でも高度な解析**を可能にする、**材料開発の効率向上に寄与するCPS(Cyber Physical System)複合計測システムを開発する。**

①計測分析情報の統合



②AI連携

計測分析データを機械学習で解析



出典：計測分析機器ワークショップ資料等より
NEDO技術戦略研究センター作成(2017)

2. 政策的位置付け

◆政策的位置付け

内閣府が作成した「科学技術イノベーション総合戦略2017」では、ビッグデータ解析技術、IoTシステム構築技術を含むAI関連技術による、ものづくり現場等における生産性向上の重要性が指摘されている。

また、サイバー空間関連技術やフィジカル空間(現実空間)関連技術の開発を横断的に支える技術として先端計測技術が言及されている。

その強化にあたっては、計測分析分野における精度・感度・省エネ等の様々な点で、従来技術の課題を解決し、産業へ応用してゆくことの重要性が述べられている。

◆他事業との関係

マ名	研究開発テーマ	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
	NEDO:エネルギー・環境新技術先導プログラム「ビッグデータ適応型の革新的検査評価技術の研究開発」						
	NEDO:「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」						
	イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築プロジェクト(JSPS)						

開発した共通データフォーマットを元に、改良型の共通データフォーマットを構築し、その最適化を行った。

イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築プロジェクト(JSPS)で提唱された独立可用性の概念に基づき、共通データフォーマットの仕様を決定した。

◆事業の目標

複合計測分析システムとして、部素材のマイクロレベルの局所領域における各種計測分析機器のデータを統合し、AI等による高度な解析を可能とするハード・ソフトウェアプラットフォームを開発することで、ユーザが求める機能(機械特性、電気特性等)を有する部素材の開発を支援する

- ・統合ルールを規格化
- ・共通アタッチメントを規格化

計測分析情報を統合し、且つAI等の解析を利用することで、未解決の複雑課題を解決



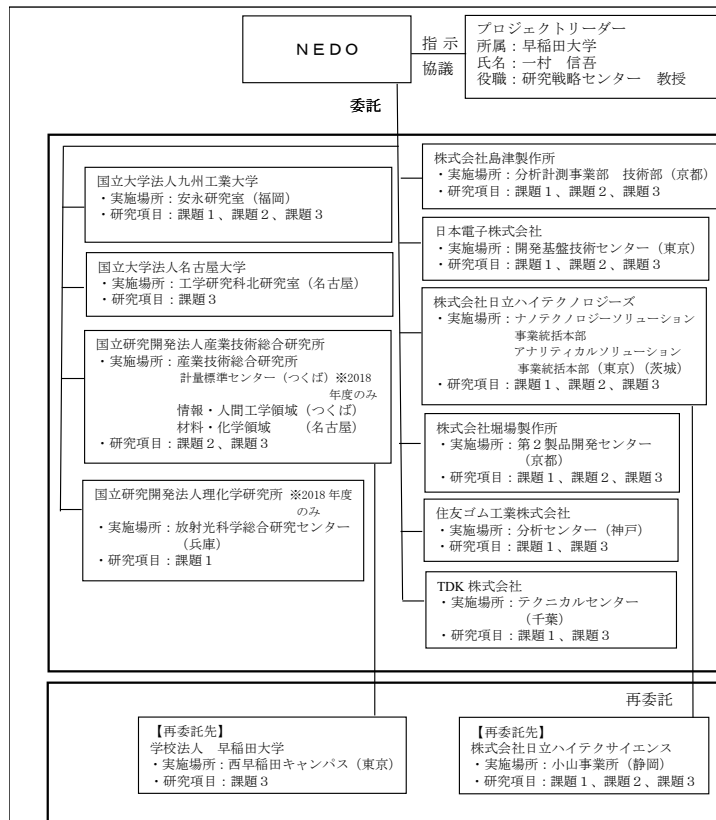
◆研究開発目標と研究内容

事業目標達成のため開発項目「複合計測分析システムの開発」に対し3つの課題を設定

研究課題名	技術開発の概要
課題1 CPS型複合計測」分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発	計測分析データの再現性、信頼性、遡及性が担保できる共通データフォーマットの開発を行い、データプラットフォームの構築を目指します。
課題2 CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発	共通試料ホルダーの開発と精密位置合わせ技術の開発により、同一試料の同一場所を分析対象にして、シームレスな空間情報の取得・利用を目指します。
課題3 AIを活用したビックデータ解析のモデル実証による評価技術の開発	統合解析を視覚的に実行できる統合ビューアおよび特徴量抽出などAI解析に向けたソフトウェアを開発します。

5. 実施体制

◆研究開発の実施体制



6. 費用

◆プロジェクト費用

(単位：百万円)

研究開発項目	2018年度	2019年度
複合計測分析システムの開発	281	102

7. 計画

- 3つの研究課題（各課題に複数のサブ課題）を設定して研究を推進
- 一部のサブ課題は、2年目の見直しで実施をとりやめ（実質1年間の研究遂行）

研究課題名	研究サブ課題名と実施期間	
	2018年度	2019年度
【研究課題1】CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発	【課題1-1】CPS型複合計測分析用機種対応データコンバータの開発（注1）	
	【課題1-2】秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発	注記：実施しない
【研究課題2】CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発	【課題2-1】CPS型複合計測分析に適応する試料ホルダ作製技術の開発	
	【課題2-2】測定位置精密位置合わせ技術の開発	
	【課題2-3】試料前処理技術の開発：均質な試料調製法とその評価法の開発	注記：実施しない
【研究課題3】AIを活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発	【課題3-1】測定データの信頼性向上技術の開発	注記：実施しない
	【課題3-2】相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発	
	【課題3-3】相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価	
注1 課題1-1の中で理研が担当する調査研究は2018年度のみ（1年間）		

次ページ以降に、各課題（サブ課題）に関する最終目標と成果を記載。
 成果の達成度の表示 ◎：大きく上回って達成 ○：達成

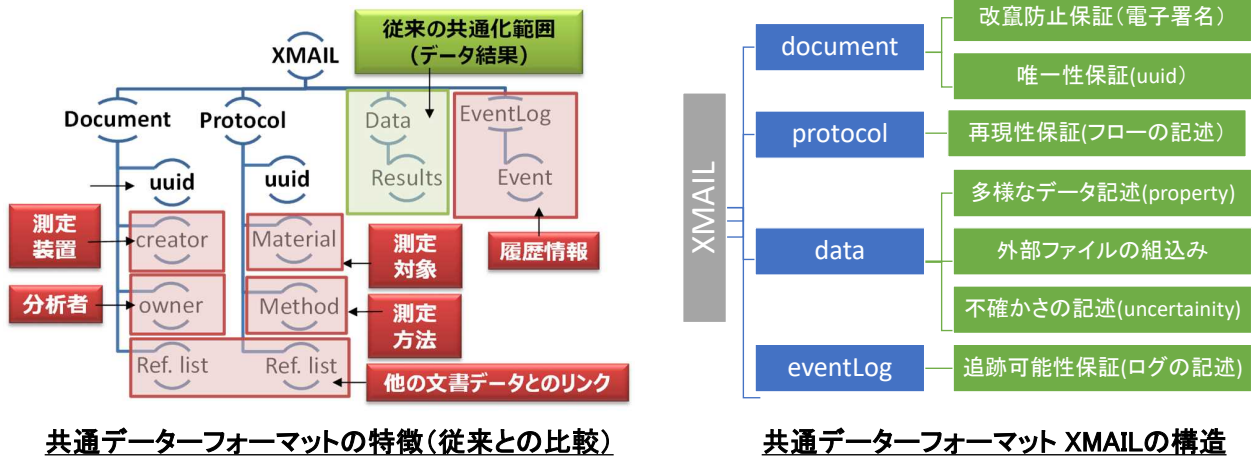
【最終目標1-①】(研究課題1-1関連)

CPS型複合計測分析システムを構成する個別の計測分析装置で測定した結果に測定条件、試料処理などの情報を付与し、データの遡及性、信頼性、再現性を確保した共通データフォーマットを開発する。

【研究成果1-①】 成果の達成度 ◎

独立可用性(注)を保証するため、4つの主タグ、即ちdocument、protocol、data、およびeventLogを規定し、サイバー空間で遡及性、信頼性、再現性を保証した各分析装置共通のXMAILデータフォーマットの仕様を決定した。これにより共通データフォーマット(Ver.0)を開発した。

注:データがサイバー空間に移行した際に、多様なデータ記述(不確かさを含む)に加えて、計測分析に関わる全ての情報(再現性、追跡可能性)が改変防止された状態で存在すること。



【最終目標1-②】(研究課題1-1関連)

タイヤ材料開発と磁石材料開発において活用が想定されるCPS型複合計測分析システムをモデル例にして、研究開発に使用する異なる計測分析装置の測定データを変換して、共通に取り扱うことを可能にするデータコンバータを開発する。

【研究成果1-②】 成果の達成度 ◎

タイヤメーカーと磁石メーカーの要求を反映させて、測定データを前述のXMAILフォーマットに変換できる分析装置(4社で計14種類)用のデータコンバータを開発した。

コンバータを開発した装置名と開発担当機関

【株式会社島津製作所】

液体クロマトグラフ(LC)、ガスクロマトグラフ(GC)、液体クロマトグラフ質量分析計(LCMS)、ガスクロマトグラフ質量分析計(GCMS)、赤外分光光度計(FTIR)

【日本電子株式会社】

走査電子顕微鏡(SEM)、透過電子顕微鏡(TEM)、エネルギー分散型X線分析装置(EDS)、電子線プローブマイクロアナライザ(EPMA)、核磁気共鳴装置(NMR)、蛍光X線分析装置(XRF)、電子線後方散乱回折装置(EBSD)

【株式会社日立ハイテクノロジーズ】

走査電子顕微鏡(SEM)、透過電子顕微鏡(TEM)、原子間力プローブ顕微鏡(AFM)、蛍光X線分析装置(XRF)

【株式会社堀場製作所】

ラマン分光分析装置(ラマン)、蛍光X線分析装置(XRF)

【最終目標 2】 (研究課題1-2関連)

タイヤメーカーと磁石材料メーカーの研究開発をモデル事例として、秘密性・安全性を確保したデータ収集・データ管理技術の仕様を作成する。

【研究成果 2】 成果の達成度 ○

計測分析装置のユーザ企業である住友ゴムとTDKからのデータの秘密性/安全性に関する要望・意見に基づき、以下の仕様を決定した

決定した仕様の概要

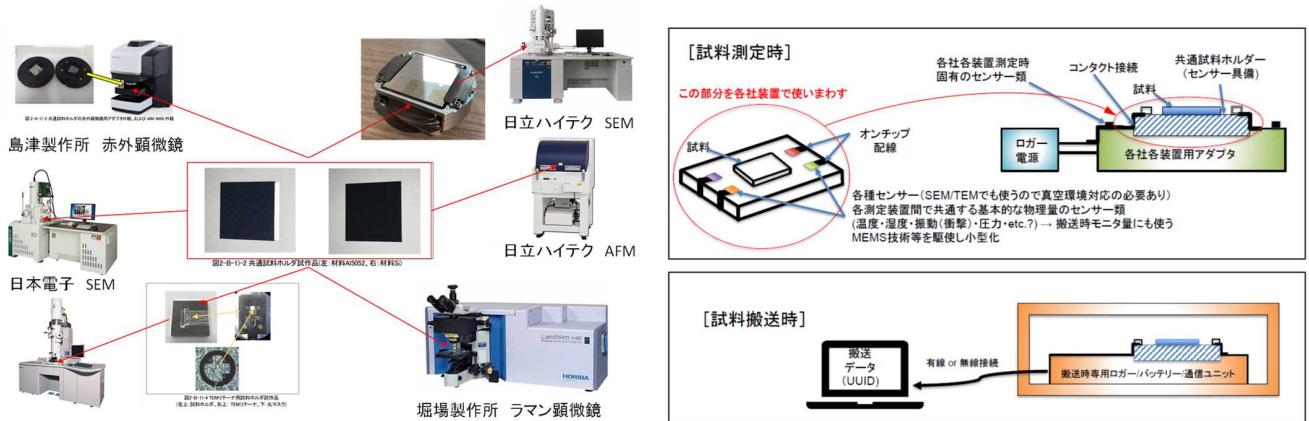
- ・ 改竄や差し替えを防ぐため、データファイル全体にXML署名を行う
- ・ 同一条件での計測・分析が可能な情報は全てXMAIL上に持つ。但し公開したくない装置調整条件、中間データなどは非公開データとして、部分的に暗号化することができる
- ・ 部分的な暗号化については、XMLエレメント暗号技術を使用する。(技術の進展や実際の運用に合わせた継続的に審議が必要)
- ・ 暗号化に関しては、完全にデコードできるものとする。暗号化の方式については、SSL/TLS等を想定する(暗号化技術の進展がみられるため継続的に審議が必要)
- ・ 上述の非公開情報は、そのまま外部ファイルとしてリンクできる仕様とする。ただし、外部ファイルのハッシュ値を持つことにより、外部ファイルの改変に耐えられるものとする。
- ・ 外部ファイルが存在する場合には、ZIP形式によりXMAILと併せてひとつのファイルにまとめるものとし、相対パスネームとして記述するものとする。

【最終目標 3】 (研究課題2-1関連)

走査電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、顕微赤外分光光度計、ラマン分光分析装置間に適用する試料ホルダを開発する。測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能なアダプタも搭載可能な仕様を作成。

【研究成果 3】 成果の達成度 ○

同一試料を走査電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、顕微赤外分光光度計、ラマン分光分析装置にて測定可能とする共通的な試料ホルダを製作し、4社の装置で試料観察の際に十分機能することを確認した。また測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能な環境アダプタの仕様を策定し、その仕様に基づく試料輸送用チャンバーを試作した。4計測機器メーカーによるラウンドロビン試験を実施し、仕様を満たす結果が得られることを確認した。



共通試料ホルダーを各社・各種装置に装着して観察

環境アダプターの試作とラウンドロビン試験の実施

【最終目標4】(研究課題2-2関連)

研究課題2-1で開発・試作した共通試料ホルダを使用し、複数の機器において位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発する。装置間の位置再現精度は位置合わせマーカとアライメント法の確立により実現する。さらに、ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において、同一試料の観察位置を分散したナノ粒子をマーカとして $3\mu\text{m}$ 以下の精度で合わせこむ測定位置合わせ技術を開発する。

【研究成果4】 成果の達成度 ◎

共通試料ホルダに参画4計測機器メーカーの装置で観察可能なマーカを実装し、位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発。位置合わせマーカとアライメント法の確立で $\pm 3.0\mu\text{m}$ 以内の位置再現性を確認。併せてナノ粒子によるフィンガープリント法で蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において $\pm 3.0\mu\text{m}$ 以内の精度が実現できることを確認し、測定位置合わせ技術を開発



アライメントマーカを搭載した試料ホルダーと評価結果

ナノ粒子マーカを用いた精密位置合わせ結果
(目標とする $3\mu\text{m}$ 以下の精度を実現)



赤○、緑○は $3, 0.2\mu\text{m}$ のビーズ
(蛍光+明視野)顕微鏡とTEMのオーバーラップ像
ターゲットは大腸菌(黒で表現)
ステージ誤差補正後の精度: 240nm (黄と橙の十のズレ)

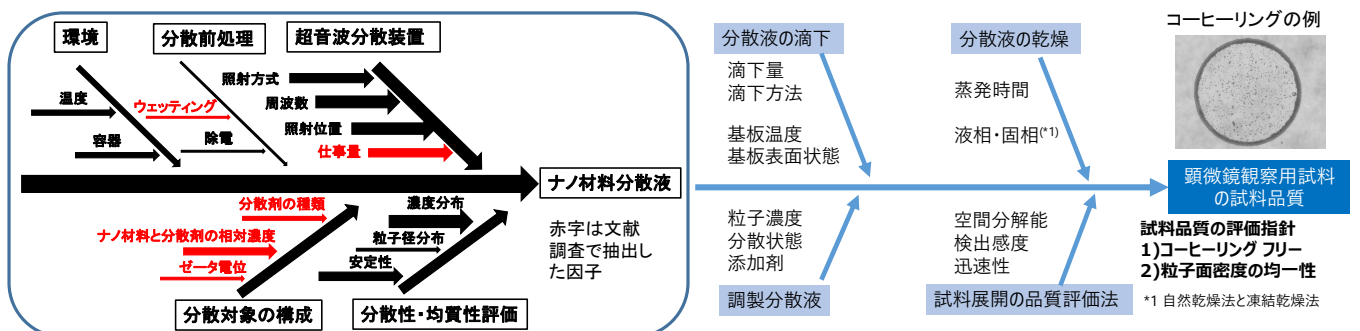
光学顕微鏡とTEMのビーズを用いた高精度位置合わせ

【最終目標5】(研究課題2-3関連)

①安定かつ均一な分散液作製のため、ナノ材料分散に関する影響因子を抽出し、分散性等の評価手法を検討する。
②一次粒子のサイズと形状や二次粒子の形態など、多様な情報を顕微鏡観察で引き出すため、ナノ材料の顕微鏡用基板上展開法について、試料品質を左右する要因を確定し、表面展開試料品質の簡易評価法を確立する。

【研究成果5】 成果の達成度 ○

①液中ナノ材料分散に対する影響因子FBDとして整理し、液中分散試料作製に係る重要な影響因子を特定した。さらに微粒子を表面展開する方法と表面展開した試料粒子の分布の均一性についてFBDに整理した。
②電子顕微鏡評価用試料の均質調製方法とその評価法の開発を行った。試料品質に影響を与える因子をFBDにまとめるとともに、蛍光顕微鏡を利用した粒子の均質展開状態を判定する迅速かつ簡易な評価法や、光学顕微鏡による白色光斜上照射暗視野顕微法を用いた孤立粒子試料部の簡易検出法などを開発した。



ナノ材料分散に関する影響相関のまとめ(FBD図)

ナノ粒子分散液を基板上に展開するときの試料品質要因

【最終目標6】 (研究課題3-1関連)

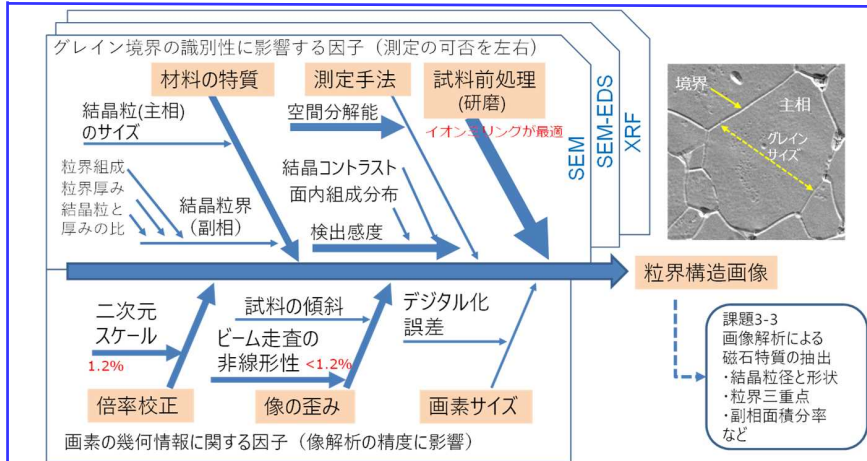
タイヤ材料の開発に用いられる計測分析法4種類 (ガスクロマトグラフ[GC]、ガスクロマトグラフ質量分析計[GC-MS]、液体クロマトグラフ[LC]、液体クロマトグラフ質量分析計[LC-MS])、磁石材料の開発に用いられる3種類 (走査電子顕微鏡[SEM]、エネルギー分散型X線分析装置[EDS]、蛍光X線分析装置[XRF]) の手法について、信頼性に対して大きな影響を与える不確かさ因子を検討しFish-bone図 (FBD)の基本骨格をまとめる。

【研究成果6】 成果の達成度 ○

タイヤ材料開発用 (4種類)、磁石材料開発用 (3種類) の計測分析法についてFBDにまとめるとともに、実データに基づいて主たる因子の寄与を評価した。**タイヤ材料開発用**では、①カップリング剤の定量に使われる

GC-FIDと、タイヤ老化防止剤の定量に使われるLC-UVでは、主たる不確かさ因子が試料調製の不確かさであること、②ポリマータイプ分析に使われるPy-GC-FIDではPy機種間差や供試料量による差異が結果に影響を及ぼすことを明らかにした。また③LC-MSでは定性分析に影響を与える主たる因子を選定した。

磁石材料開発用では、結晶粒境界を判定して結晶粒の面積や形状を測定するときに判定精度に影響を与える因子について検討し、SEM測定等に関する因子を抽出してFBDの基本骨格を完成した。



粒度構造の画像測定に影響するFBD図 (SEM, SEM-EDX/XRF測定)

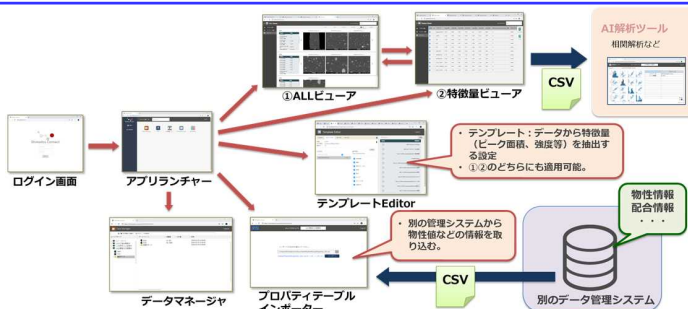
【最終目標7-①】 (研究課題3-2関連)

①AI活用に必要な解析用ソフトウェア環境(アプリケーションフィールド)を構築するため、A)タイヤ材料の研究開発に活用される複合階層構造解析用(マクロ-ミクロ分析の相関解析用)とB)磁石材料の研究開発に活用される粒度構造解析用(ミクロ-ミクロ分析結果の相関解析)用の統合ビューアを試作し、**統合ビューア技術を開発**する。

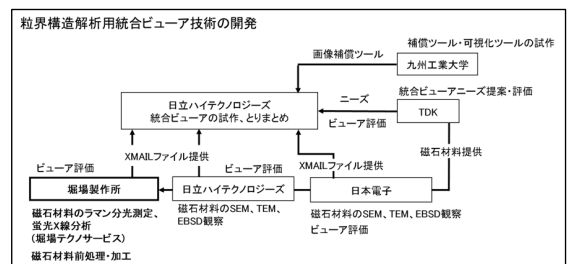
【研究成果7-①】 成果の達成度 ◎

A)クロマトグラフ、クロマトグラフ質量分析計、NMR、電子顕微鏡の各装置を構成要素とする複合階層構造解析用(マクロ-ミクロ分析結果の相関解析用)の統合ビューアを完成させた。一般的なWebブラウザ上で動作可能なWebアプリケーションとして複数地点のユーザからの解析が可能となった。

B) SEM、EBSD、ラマン分光顕微鏡の核装置を構成要素とする粒度構造解析用(ミクロ-ミクロ分析結果の相関解析用)統合ビューアを完成させた。データをCPS環境(共通サーバー)から引き出し結果を戻す構造を構築し、CPSの安全性を確保しつつユーザがストレスなく解析が可能になる環境を提供する仕組みを開発した。



複合階層構造解析用統合ビューアの構成



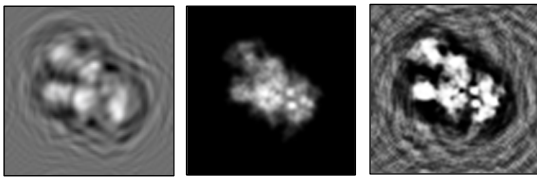
粒度構造解析用統合ビューアの構成

【最終目標 7-②】(研究課題3-2関連)

②統合ビューアで活用される画像データを補償する補償ツールを試作し、計測・分析方法や試料作成等のフローを可視化し修正するための可視化ツールを試作する。

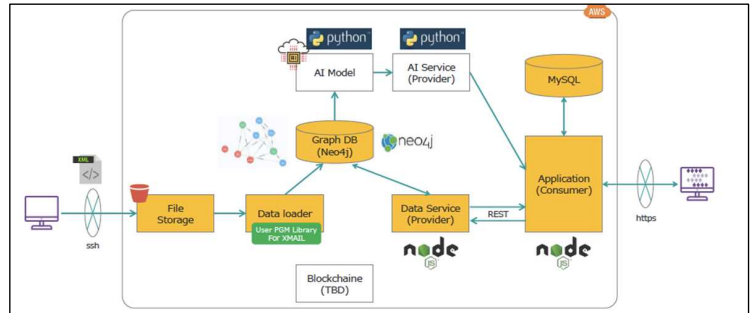
【研究成果 7-②】 成果の達成度 ○

透過型電子顕微鏡画像のみに絞って、ある条件、ある電子顕微鏡で撮影した画像のデータ補償を行い、異なる条件、異なる電子顕微鏡で撮影された画像と比較できるようにするためのデータ補償ツールを開発し公開した。複数のXMAIL内に記述された計測・分析のフローをペトリネットと呼ばれる離散分散システムを数学的に表現するための記法であるPNML形式と対応する形で記述することで可視化し、接続がおかしい部分を明確にすることで修正できるツールをXMAIL-Viewer(仮名)として試作した。



電子顕微鏡補償ツールの実際

左: 電子顕微鏡画像、中央: 真値の画像、右: 補償画像



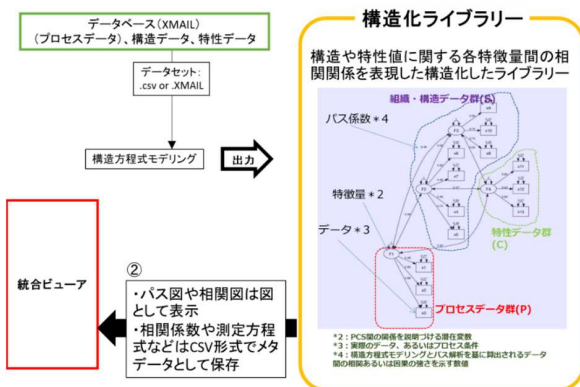
MAIL-Viewerの概要。データローダとデータプロバイダを設計

【最終目標 8-①】(研究課題3-3関連)

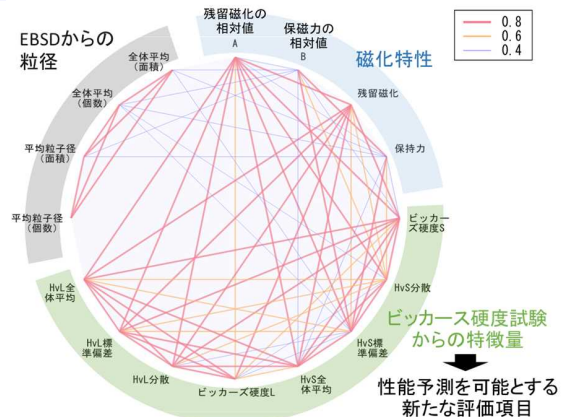
①磁石材料およびタイヤ材料を対象として、材料の組成や界面構造、欠陥等の因子に関する情報を多数の計測分析装置を使って収集した結果をもとに、構造化ライブラリを試作開発する。合わせて物性ととの相関を誤差要因も考慮して解析し、製品の性能の予測が可能となる評価項目の候補を決定する。

【研究成果 8-①】 成果の達成度 ○

ゴム材料の分子量分布推定の精度について、ベイズ推定を用いた精度と不確かさを定量化する手法についても検討し、マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を用いて分子量分布の不確かさを定量的に評価可能な手法を開発した。磁石材料に関して、多変量相関図を作成して特徴量間の関係性の強いものを選出し、それを基に構造方程式モデリングを用いて相関解析を行い構造化ライブラリとした。また、製品性能を予測する評価項目を新たに示唆することができた



構造化ライブラリおよび統合ビューアとの連携に関する模式図



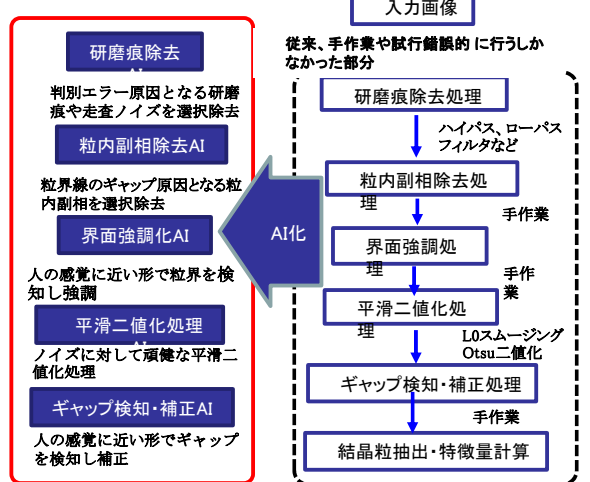
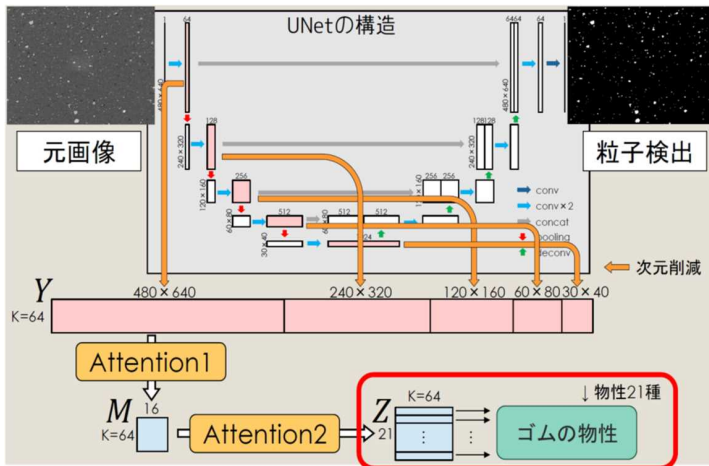
磁石材料における多変量相関図

【最終目標 8-②】(研究課題3-3関連)

②タイヤ材料、磁石材料を対象にフィラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出とこれに基づく解析アルゴリズムを試作開発する。

【研究成果 8-②】 成果の達成度 ○

タイヤ材料解析に向けて、フィラー凝集状態に関わる特徴量を抽出し、それに基づき相関解析するソフトウェアパッケージを試作開発した。磁石材料開発に向けて、実際の結晶粒界画像から特徴量を自動抽出できるソフトウェアパッケージ、開発した関数パッケージとともにMatlab機能を利用する新たな変換・表示用ソフトウェアパッケージを試作開発した。



【タイヤ材料】凝集状態学習モデルに基づく物性との相関解析

【磁石材料】必要なイメージフィルタ処理と対応AI

【最終目標 8-③】(研究課題3-3)

③タイヤ材料、磁石材料のビッグデータ・AI活用に向け、モデル計測データやモデル解析データの授受を通して複合計測分析システムモデルの評価を行う。

A)タイヤ材料開発の効率化に向けて共通フォーマットに変換されたデータ群の蓄積を進め、統合ビュー等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。

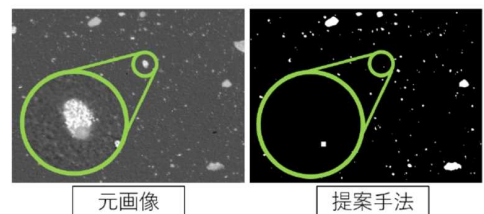
B)磁石材料開発の効率化に向けて、多種の計測分析装置で収集された複合・補間データと粒界構造解析用統合ビュー等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。

【研究成果 8-③】 成果の達成度 ◎

A)島津製作所を責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、モデル計測データやモデル解析データの授受が可能な複合計測分析システムモデル(複合積層構造解析用統合ビューを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたにもかかわらず、住友ゴムによる実証評価を行い、モデルシステムを用いることで、これまで経験的にしか知られていなかった相関関係を明確化することが可能になり、新たなタイヤ材料開発の指針を得ることが可能になった。

B)日立ハイテクを責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、複合計測分析システムモデル(粒界構造解析用統合ビューを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたため、扱える画像解析可能な計測分析装置の種類(機種)を限定する形になったが、Nd系磁石5種類のモデル試料を用いて収集された多量の複合・補間データを活用して、構造と物性の相関を迅速に解明できることを明らかにした。

AI技術を活用した顕微鏡画像解析 (粒子の自動抽出、特徴量探索)



<従来>

領域抽出には手作業で30分程度要していた

<AI活用>

領域抽出に要する時間が数秒へ短縮

得られる特徴量も大幅に向上

→構造と物性の相関が明確に

9. 成果の普及： 成果発表

2年間（一部の課題では1年間）という短い研究開発期間の中で、国立研究開発法人と大学等のアカデミア関係メンバーからの学会等での発表を中心に6件の実績。2件（発表1, 2）は国際シンポジウム・セミナーの場での英語による発表で、我が国発のプロジェクト成果を世界に紹介する良い機会になっている。

	発表年月日	発表媒体(場所)	題名	発表者	所属	
1	2019年9月16日～17日	Frontiers In Cellular, Viral and Molecular Microscopy - with Cryo-specimen Preparation Techniques -	Evaluation of correlation and alignment accuracy toward the same sample observation by CLEM	五味淵由貴 ¹⁾ 江副里紗 ¹⁾ 高橋寛子 ¹⁾ 安永卓生 ¹⁾	1) 九州工業大学・情報工学研究院	サブ課題2-1
2	2019年11月4日	8 th International Symposium on Practical Surface Analysis (PSA-19) (札幌) プレナリー招待講演	Toward Construction of Measurement/Characterization Platform for Open Innovation	一村信吾 ¹⁾	1) 早稲田大学	課題全般
3	2020年3月14日	第67回応用物理学会 春季学術講演会 (ウエブ)	光学顕微鏡等を用いた、基板上ナノ粒子分散状態の広域評価	重藤知夫 ¹⁾ 加藤晴久 ¹⁾ 時崎高志 ¹⁾	1) 産業技術総合研究所	サブ課題2-3
4	2020年3月15日	第67回応用物理学会 春季学術講演会 (ウエブ)	ナノ粒子のサイズ分布計測のための電子顕微鏡用調製試料の品質	黒河 明 ¹⁾ 熊谷和博 ¹⁾	1) 産業技術総合研究所	サブ課題2-3
5	2020年3月15日～17日	化学工学会第85年会 (関西大学)	ゲル浸透クロマトグラフィーによる分子量分布推定の不確実性定量化	脇田耕輔 ¹⁾ 矢高智之 ¹⁾ 川尻喜章 ¹⁾	1) 名古屋大学	サブ課題3-3
6	2020年3月18日～20日	日本セラミックス協会 2020年会 (明治大学)	構造方程式モデリングを用いた磁石材料の構造・特性データの相関解析	山下誠司 ¹⁾ 乗松 航 ¹⁾ 北 英紀 ¹⁾ 柳内克昭 ²⁾	1) 名古屋大学 2) TDK株式会社	サブ課題3-3

9. 成果の普及： シンポジウムの開催

本プロジェクトの成果を広く普及する活動として、下記3件のシンポジウムで講演。このうち①と③は、日本学術会議、日本学術振興会、日本分析機器工業会、日本分析化学会が共同主催するシンポジウムで、本プロジェクトに係わる研究構想を中心に紹介した。多数の参加者を集め、産業界を中心とした参加者に活動内容を紹介・普及した。

①2018年9月6日
JASIS2018におけるシンポジウムでの講演
主題: イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築-これまでの取り組みと今後の展望

②2019年1月30日～2月1日
第18回国際ナノテクノロジー総合展・技術会議 [nano tech 2019]におけるパネル展示とショートプレゼンテーション。

③2019年9月4日
JASIS2019におけるシンポジウムでの講演
主題: イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築-どんな基盤をつくり何をを目指すか-



イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築 -これまでの取り組みと今後の展望-

日時: 2018年9月6日 14:00～17:00 場所: 幕張メッセコンファレンス会場 301A会議室

主催: 日本学術会議・化学委員会・分析化学分科会、日本学術振興会 計測分析プラットフォーム第193委員会、日本分析化学会、日本分析機器工業会
後援: 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)、産総研COMS-NANO

プログラム

- 14:00～14:05 開会挨拶 (及び前半司会) 佐藤 輝 (産業技術総合研究所)
- 14:05～14:25 「計測分析プラットフォームの構築: 学振第193委員会の設立経緯と今後の展望」 一村 信吾 (早稲田大学)
- 14:25～14:45 「最先端分析・計測機器開発センターおよび共同利用プラットフォーム構想」について 竹内 孝江 (奈良女子大学)
- 14:45～15:05 「ナノテック分野・先端計測のためのAI技術の適用と展望」 尾崎 輝 (大阪大学)
- 休憩 15:05～15:20
- 【「ビッグデータ」対応型の革新的検査評価技術の研究開発 (NEDO先端プログラム)」の活動報告】 司会 保田芳輝 (堀場製作所)
- 15:20-15:30 ビッグデータ対応型の革新的検査評価技術の研究開発概要について 中川 利久 (堀場製作所)
- 15:30-15:50 CPS複合計測分析のプラットフォーム構築に向けて 1 -データフォーマットの共通化とコンバータの試作- 安永 卓生 (九州工業大学)
- 15:50-16:10 CPS複合計測分析のプラットフォーム構築に向けて 2 -試料ホルダー共通化と精密位置合わせ技術の試行- 大橋 秀実、杉沢 寿志 (日本電子)
- 16:10-16:30 ナノ材料用の統合的検査評価技術にむけて 1-統合的データ表示技術 (統合ビューアー) の開発- 山本 聡 (堀場製作所)
- 16:30-16:50 ナノ材料用の統合的検査評価技術にむけて 2-計量計測適性、信頼性評価に基づくビッグデータ解析基盤技術の開発- 藤本 俊幸 (産業技術総合研究所)
- 16:50～17:00 総括質疑と閉会挨拶 多持隆一郎 (日立ハイテクノロジーズ)

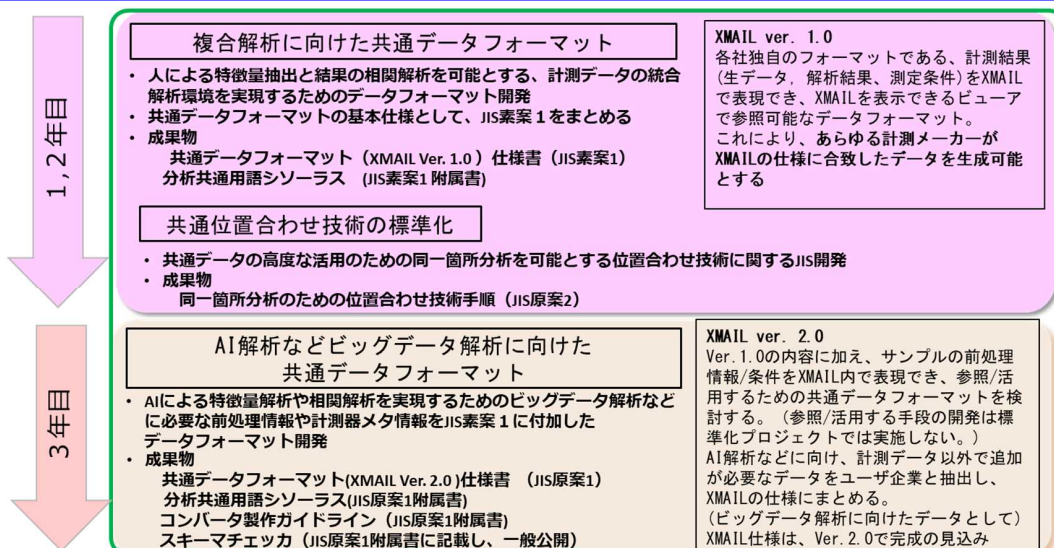
課題1と課題2はそれぞれ計測分析装置メーカー機関、計測分析装置ユーザー機関で共通利用可能な基盤的技術の開発を目指すものであるため、知的財産の出願の上で公知化し広く普及を図るよりも、後述のように標準化による普及を目指す方針を採用。この結果、知的財産の獲得対象は「課題3：AI活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発」の成果に限られることになった。
 課題3に係わる知的財産の出願実績は、下表の通りである。いずれも、各種計測分析装置のデータを課題1で開発した共通データフォーマット構造に変換（コンバート）して複合的・統合的な解析を行う際の、データ管理や表示、AI活用における利便性向上のための方法に係わる知的財産である。現時点で共通データフォーマットに変換できる計測分析装置が国内メーカーの装置に限定的であることから、知財出願先は国内のみにしている。

知的財産（特許）の出願実績

	出願年月日	出願番号	発明の名称等	出願人
1	2020年 4月30日	特願 2020- 080177	複合分析データ管理システム、複合分析データ管理方法 および 複合分析データ管理プログラム	株式会社島津製作所
2	2020年 4月30日	特願 2020- 080347	解析用ビューア、表示システム、表示方法および表示プログラム	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社
3	2020年 5月21日	特願 2020- 088916	分析データ管理システムにおける教師用データ生成方法	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社
4	2020年 5月22日	特願 2020- 089675	複合計測統合ビューアおよびプログラム	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社

11. 成果の実用化に向けた取り組み

・本事業成果の実用化に向けて、標準化の積極的な推進を計画。このため、戦略的国際標準化加速事業のテーマとして「計測分析装置の計測分析データ共通フォーマットおよび共通位置合わせ技術に関するJIS開発」を提案し受託中。受託期間は2020年度からの3年間。
 ・受託機関は、計測装置メーカー4機関、計測装置ユーザー機関4機関と日本分析機器工業会（代表機関）。事業推進に際しては、事業実施者に加えて計測分析機器ユーザー、メーカー、アカデミアのより幅広いマテリアル関連分野の関係者を招聘した委員会からなる実施体制を構築。本事業成果の幅広い広報・普及を図る計画。



本プロジェクトを継承する標準化プロジェクトの目標と年次展開

概 要

		最終更新日	2020年9月11日
プロジェクト名	省エネ製品開発の加速化に向けた 複合計測分析システム研究開発事業	プロジェクト番号	P18009
担当推進部/ PMまたは担当者	材料・ナノテクノロジー部 PM 氏名 長島 敏夫 (2019年9月1日～2020年11月現在) 材料・ナノテクノロジー部 PM 氏名 大滝 篤史 (2017年12月25日～2019年8月31日)		
0. 事業の概要	<p>本事業で開発するCPS型複合計測分析システムは有機部材、無機部材の製品開発に活用される。有機部材向けの複合計測分析システムは、複合階層構造解析の目的に活用され、マクロスケールからマイクロ（ナノ）スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。（液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、核磁気共鳴装置）。無機部材向けの複合計測分析システムは、粒界構造解析の目的に活用され、主としてマイクロ（ナノ）スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。（走査型電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、ラマン分光分析装置、原子間カプローブ顕微鏡、蛍光X線分析装置、電子線後方散乱回折装置）。この2種類をCPS型複合計測分析システムのモデルと位置づけ、次のステップで研究開発を進める。</p> <p>① CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発（以下、課題1） CPS型複合計測分析システムを構成する個別計測分析装置の測定結果に、装置の動作状態、試料の処理など固有の情報を付与し、遡及性、信頼性、再現性を確保してデータの品質保証が可能な共通データフォーマットを開発・策定する。併せて、個々の計測分析装置によるデータを共通データフォーマットに変換するコンバータの開発を行う。更に、サイバー空間に集約されたデータの秘密性・安全性を確保できるデータ収集・管理技術の仕様を作成する。</p> <p>② CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発（以下、課題2） CPS型複合計測分析において同一試料の同一部位を測定可能とするため、各種複数計測分析装置に共通的に利用できる試料ホルダーの開発と精密位置合わせ技術の開発を行う。同時に、共通試料ホルダーを活用した、複合計測分析遂行中の試料環境のセンシング技術の仕様を作成する。</p> <p>③ AIを活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発（以下、課題3） CPS型複合計測分析システムの測定結果の信頼性を向上するため、計測手法毎に主たる不確かさ因子を検討する。次に信頼性の検討結果を踏まえて、マクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした複合階層構造解析用の統合ビューアと、マイクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした粒界構造解析用の統合ビューアの研究開発を試行する。合わせて、それぞれを、タイヤ材料、および、磁石材料の性能向上を目指す2つの開発事例に適用させ、AI等の技術の活用や統合ビューア用のデータ解析／管理用ソフトウェアツール群の整備を試行することで製品開発サイクルの効率化を表現する複合解析システムを試作開発し、またそれらをモデル事例として評価する。</p>		
1. 事業の位置 付け・必要性について	<p>計測分析機器は、ものづくり産業の発展の源泉であり、その国際競争力を高めることは我が国産業全体の国際競争力を維持・向上させる上で必要不可欠である。内閣府が作成した「科学技術イノベーション総合戦略2017」では、ビッグデータ解析技術、IoTシステム構築技術を含むAI関連技術による、ものづくり現場等における生産性向上の重要性が指摘されている。また、サイバー空間関連技術やフィジカル空間（現実空間）関連技術の開発を横断的に支える技術として先端計測技術が言及されている。その強化にあたっては、計測分析分野における精度・感度・省エネ等の様々な点で、従来技術の課題を解決し、産業へ応用してゆくことの重要性が述べられている。近年、ものづくりの現場では、部素材の組成やナノメートルスケールから製品レベルまでの構造が複雑化することで、構造と機能との相関解析が困難となる状況が増加しており、各種計</p>		

測分析機器データの統合的な解析を容易に行う環境作りが必要となってきた。本事業は、ものづくりの現場において部素材の組成や構造が複雑化・微細化している状況を踏まえて、計測分析技術における喫緊の課題解決を目指す。すなわち、部素材のサブミクロンレベルの局所領域における各種計測分析機器のデータをサイバー空間に集約して統合的な解析を容易に行う環境作りと、ビッグデータや AI 等による高度な解析に向けた基盤技術の開発を行うことを目的とする。合わせて、ものづくり産業（計測分析機器ユーザー）が求める機能（機械特性、電気特性等）を有する部素材の開発を支援するため、CPS（Cyber Physical System）型複合計測分析システムを開発し、部素材研究開発の高度化・効率化などの課題解決に有効であることを検証することを目的とする。

2. 研究開発マネジメントについて

事業の目標	研究開発項目「複合計測分析システムの開発」 【最終目標（2019年度）】 ・電子顕微鏡観察や顕微分光分析、顕微質量分析等、複数の機器において同一試料の観察位置を3μm以下の精度で合わせこむ技術を開発する。 ・各種計測分析機器データフォーマットの統一を図り、ビューア（各種観測データを表示できるソフトウェア）を開発する。					
事業の計画内容	主な実施事項	2018fy	2019fy			
	複合計測分析システムの開発	→				
事業費推移 （会計・勘定別にNEDOが負担した実績額（評価実施年度については予算額）を記載） （単位:百万円） （委託）・（助成）・（共同研究）のうち使用しない行は削除	会計・勘定	2018fy	2019fy			
	一般会計					
	特別会計 （電源・需給の別）	281	102			
	開発成果促進財源	0	0			
	総 NEDO 負担額	281	102			
	（委託）	281	102			
	（助成） ：助成率△/□					
	（共同研究） ：負担率△/□					
開発体制	経産省担当原課	製造産業局産業機械課				
	プロジェクトリーダー	【プロジェクトリーダー】 学校法人早稲田大学リサーチイノベーションセンター教授：一村 信吾				
	プロジェクトマネージャー	材料・ナノテクノロジー部 氏名 長島 敏夫 （2019年9月1日～2020年11月現在） 材料・ナノテクノロジー部 P M 氏名 大滝 篤史 （2017年12月25日～2019年8月31日）				

	<p>委託先 (助成事業の場合 「助成先」とするなど 適宜変更) (組合が委託先に 含まれる場合は、そ の参加企業数及び 参加企業名も記 載)</p>	<p>委託先：(株)株式会社島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、国立大学法人九州工業大学、国立大学法人名古屋大学、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立研究開発法人理化学研究所 再委託先：(株)日立ハイテクサイエンス、学校法人早稲田大学</p>		
情勢変化への対応	<p>進捗状況や技術推進委員会の結果をふまえ、2018年度に研究開発実施体制を変更した。課題3-3(相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価)に関する研究開発推進のために、国立研究開発法人産業技術総合研究所の再委託先として、学校法人早稲田大学を追加した。</p>			
中間評価結果への対応	<p>中間評価未実施</p>			
評価に関する事項	事前評価	<p>2017年度実施 担当部 材料ナノテクノロジー部</p>		
	中間評価	<p>未実施</p>		
	事後評価	<p>2020年度実施 担当部 材料ナノテクノロジー部</p>		
3. 研究開発成果について	項目	最終目標	成果	達成度
	<p>1. CPS型複合計測分析用機種対応コンバータの開発(研究課題1-1)</p>	<p>①CPS型複合計測分析システムを構成する個別の計測分析装置で測定した結果に測定条件、試料処理などの情報を付与し、データの遡及性、信頼性、再現性を確保した共通データフォーマットを開発する。</p>	<p>NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「ビッグデータ適応型の革新的検査評価技術の研究開発」で得られた共通データフォーマットを拡張し、4つのタグ：document、protocol、data、およびeventLogを規定し、サイバー空間で遡及性、信頼性、再現性を保証した各分析装置共通のXMAILデータフォーマットの仕様を決定し、共通データフォーマット(Ver.0)を開発した。</p>	◎

		<p>②タイヤ材料開発と磁石材料開発において活用が想定される CPS 型複合計測分析システムをモデル例にして、研究開発に使用する異なる計測分析装置の測定データを変換して、共通に取り扱うことを可能にするデータコンバータを開発する。</p>	<p>タイヤメーカーと磁石メーカーの要求を反映させて、測定データを前述の XMAIL フォーマットに変換できる各社分析装置(計 14 種類)用のデータコンバータを開発した。変換後の XMAIL ファイルを使用して、後述する課題 3-2 で製作した統合ビューアで、共通に扱えることを確認した。データコンバータを開発した装置(担当計測装置メーカー)は下記の通り</p> <p>【(株)島津製作所】 液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、 液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計</p> <p>【日本電子(株)】 走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、核磁気共鳴装置、蛍光 X 線分析装置、電子線後方散乱回折装置</p> <p>【(株)日立ハイテクノロジーズ】 走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光 X 線分析装置</p> <p>【(株)堀場製作所】 ラマン分光分析装置、蛍光 X 線分析装置</p>	◎
		<p>③放射光施設での測定データと CPS 型複合計測分析システムの測定データを連携させるための想定利用フローとデータフォーマット等に要求される機能・性能を明らかにする。合せて X 線画像検出器の標準評価プロトコルを確立する。</p>	<p>調査研究の結果から放射光施設のデータシステムに新規にデータフォーマットを相互に変換するコンバータを作成することで、複合計測分析システムと放射光施設のデータを連携させることが最も適切であることを明らかにした。</p> <p>また実験室 X 線源を用いた X 線画像検出器の評価方法を見出すことができた。光子判定しきい値による画素間ばらつきや画素内アンプの時定数などを評価特徴量として掲げている。</p> <p>標準評価プロトコルについて記載する事</p>	○
	<p>2. 秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発(研究課題 1-2)</p>	<p>タイヤメーカーと磁石材料メーカーの研究開発をモデル事例として、開発したデータコンバータで変換された測定データのインテグリティ(データの完全性)に関し、パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されていることを確認する。これにより、秘密性・安全性を確保したデータ収集・データ</p>	<p>ユーザ企業である住友ゴム工業と TDK からのデータの秘密性/安全性に関する要望・意見に基づいて、データ収集・データ管理技術に係わる以下の仕様を決定・作成した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・改竄や差し替えを防ぐため、データファイル全体に XML 署名を行うこととした。 ・公開したくない装置の中間データは非公開データとして、部分的に暗号化することができる仕様とした。 ・部分的な暗号化については、XML エlement 暗号技術を使用するものとした。 <p>「パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されて</p>	○

		管理技術の仕様を作成する。	いることを確認する」に関する記述を追加すること。	
3. CPS 型複合計測分析に適応する試料ホルダ作製技術の開発 (研究課題 2-1)	走査電子顕微鏡（日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズ）、電子線プローブマイクロアナライザ（日本電子(株)）、顕微赤外分光光度計（(株)島津製作所）、ラマン分光分析装置（(株)堀場製作所）間に適用する試料ホルダを開発する。 測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能なアダプタも搭載可能な仕様を作成する。 水系試料の凍結試料を用いる事で大気等による試料劣化しない試料観察が可能な両社製のクライオ電子顕微鏡用の共通試料ホルダ（50-100K の温度可変型）を試作し、日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズと協力し、汎用化への提案を行う。	<ul style="list-style-type: none"> ・同一試料を走査電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、顕微赤外分光光度計、ラマン分光分析装置にて測定可能とする共通的な試料ホルダを製作した。この共通試料ホルダが、参画 4 計測機器メーカーの装置における試料観察の際に十分機能することを確認した。 ・測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能な環境アダプタの仕様を策定し、その仕様に基づく試料輸送用チャンバーを試作した。試料輸送用チャンバーを用いて参画 4 計測機器メーカーによるラウンドロビン試験を実施し、仕様を満たす結果が得られることを確認した。 ・走査型電子顕微鏡と透過型電子顕微鏡で使用可能な凍結試料を保持する試料ホルダを製作した。 ・上記試料ホルダにて、水系凍結試料の大気等による試料劣化のない観察が可能であることをクライオ電子顕微鏡により 50-100K の温度範囲で確認した。 汎用化への提案に関して記載すること	○	
4. 測定位置の精密位置合わせ技術の開発 (研究課題 2-2)	研究課題 2-1 で開発・試作した共通試料ホルダを使用し、複数の機器において位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発する。装置間の位置再現精度は位置合わせマーカーとアライメント法の確立により実現する。 さらに、ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において、同一試料の観察位置を分散したナノ粒子をマーカーとして 3 μ m 以下の	<ul style="list-style-type: none"> ・上記研究課題 2-1 の成果物である試料ホルダに参画 4 計測機器メーカーの装置で観察可能なマーカーを実装し、位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発した。また位置合わせマーカーとアライメント法の確立により、各装置（FTIR、ラマン分光、走査型電子顕微鏡）の位置再現情報が$\pm 3.0 \mu\text{m}$以内で一致することを確認した。 ・ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、ナノ粒子によるフィンガープリント法でも蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において$\pm 3.0 \mu\text{m}$以内の精度が実現できることを確認し、測定位置合わせ技術を開発した。 ・位置合わせの精度は実際のユーザが使用する装置の状態に依存することになるが、少なくとも位置情報を取得し、観察領域の指定等の作業を容易にすることが可能であることが確認できた。 	◎	

		<p>精度で合わせこむ測定位置合わせ技術を開発する。</p>		
	<p>5. 試料前処理技術の開発：均質な試料調製法とその評価法の開発 (研究課題 2-3)</p>	<p>①安定かつ均一な分散液作製のため、ナノ材料分散に関与する影響因子を抽出し、分散性・均質性の評価手法を検討する。</p> <p>②一次粒子のサイズと形状や二次粒子の形態など、多様な情報を顕微鏡観察で引き出すため、ナノ材料の顕微鏡用基板上展開法について、試料品質を左右する要因を確定し、表面展開試料品質の簡易評価法を確立する。</p>	<p>①液中ナノ材料分散に対する影響因子 FBD として整理した。作成された FBD に基づき、因子間の相関影響評価を実施し、液中分散試料作製に係る重要な影響因子を特定した。さらに調製されたナノ材料分散液を対象とした分散性・均質性の評価方針を確定した。</p> <p>微粒子分散液を基板上に均一に微粒子を表面展開する方法について、その試料品質、すなわち表面展開した試料粒子の分布の均一性について、影響を与える 4 要因を抽出し FBD に整理した。</p> <p>②電子顕微鏡法用には、ナノ粒子のリング状積層物の形成の有無を評価指針とし、リング形成の有無を迅速に評価するナノ蛍光標識方法を開発した。</p> <p>原子間力顕微鏡用には、試料品質の FBD を確定した。またサンドイッチ凍結乾燥法を採用し、白色光斜上照射暗視野顕微法と SEM 計測の複合による高速試料評価法を開発し、良好領域探索のプログラムを確定した。その検証をカーボンブラック試料で行って FBD との関連を概観し、開発の適切性を示した。</p>	○
	<p>6. 測定データの信頼性向上技術の開発 (研究課題 3-1)</p>	<p>タイヤ材料の開発に使われる計測分析法 4 種類 (ガスクロマトグラフ、ガスクロマトグラフ質量分析計、液体クロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計)、磁石材料の開発に使われる 3 種類 (走査電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、蛍光 X 線分析装置) の手法について、信頼性に対して大きな影響を与える不確かさ因子を検討し Fish-bone 図(フィッシュボーンダイヤグラム：以下 FBD)の基本骨格をまとめる。</p>	<p>不確かさ因子を FBD にまとめるとともに、実データに基づいて主たる因子の測定結果の信頼性を向上させるため、GC-FID、LC-UV、Py-GC-FID (-MS)、LC-MS を用いた測定での主たる不確かさ因子を明らかにし、FBD にまとめるとともに、実データに基づいて主たる因子の寄与を評価した。GC-FID や LC-UV では主たる不確かさ因子が試料調製の不確かさであること、Py-GC-FID では Py 機種間差や供試料量による差異が結果に影響を及ぼすことをそれぞれ明らかにした。LC-MS では定性分析に影響を与える主たる因子を選定した。</p> <p>略号で示された装置を、目標に記載された装置名称と対応づけること。例) 液体クロマトグラフ質量分析設計 (LC-MS)</p> <p>結晶粒とそれを囲む境界からなる材料についてグレイ境界判定方法を調査した。磁石材料のモデル試料の走査電子顕微鏡 (SEM) ・エネルギー分散型 X 線分析装置 (SEM-EDS) ・蛍光 X 線</p>	○

			<p>分析装置（XRF）測定について、結晶粒境界を判定して結晶粒の面積や形状を測定するときに判定精度に影響を与える因子について検討し、SEM測定に関する因子を抽出して FBD の基本骨格を完成した。また SEM 法によるグレイン境界判定を容易にする試料の前処理方法を開発し、広範な領域の結晶粒境界判定を可能とした。結晶粒の面積や形状測定の精度評価に必要な二次元画像の歪みの評価方法を開発した。</p>	
<p>7. 相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発 (研究課題 3-2)</p>		<p>①AI 活用に必要な解析用ソフトウェア環境(アプリケーションフィールド)を構築する。このため、 【実施計画記載の最終目標】 ①-1 タイヤ材料の研究開発に活用される複合階層構造解析用（マクロ-マイクロ分析の相関解析用）を試作し統合ビューアを開発する。 ①-2 磁石材料の研究開発に活用される粒界構造解析用（マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析）用統合ビューアを試作し、統合ビューア技術を開発する。</p>	<p>①-1 住友ゴムと島津製作所において、クロマトグラフ、NMR、顕微鏡の各装置のデータコンバートと共に XMAIL 内に特徴量を内包する手法を検討し、データマネージャアプリ、All ビューアアプリ、特徴量ビューアアプリ、テンプレート Editor アプリ、プロパティテーブル・インポータを有し、一般的な Web ブラウザ上で動作可能な Web アプリケーションとして複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)の統合ビューアを完成させた。 ①-2 TDK が磁石材料の材料提供および各種測定を行い、相関解析に向けた特徴量抽出の議論・提案、特徴量をもとにした物性との回帰解析などを行った。この結果を踏まえて、日立ハイテックは SEM、日本電子は SEM および EBSD、堀場製作所はラマン分光顕微鏡のデータをそれぞれ読み込むことが可能な XMAIL 変換テーブルを作製し、粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)統合ビューアを完成させた。加えて、データをローカル環境に置かず CPS 環境（共通サーバー）から引き出し、結果を CPS 環境に戻す構造を構築し、CPS の安全性を確保しつつユーザがストレスなくデータのアップデートと解析が可能になる環境を提供する仕組みを開発した。</p>	<p>◎</p>

		<p>②統合ビューアで活用される画像データを補償する補償ツールを試作し、計測・分析方法や試料作成等のフローを可視化し修正するための可視化ツールを試作する。</p>	<p>②透過型電子顕微鏡画像のみに絞って、ある条件、ある電子顕微鏡で撮影した画像のデータ補償を行い、異なる条件、異なる電子顕微鏡で撮影された画像と比較できるようにするためのデータ補償ツールを開発した。計測・分析条件の違い等を補償して比較検討が可能なデータを提供するデータ補償ツールの成果は、OSDN(https://ja.osdn.net/projects/eos/)を通して公開した。</p> <p>複数の XMAIL 内に記述された計測・分析のフローをペトリネットと呼ばれる離散分散システムを数学的に表現するための記法である PNML 形式と対応する形で記述することで可視化し、接続がおかしい部分を明確にすることで修正できるツールを XMAIL-Viewer(仮名)として試作した。</p>	○	
	<p>8. 相関解析に向けた AI 活用技術の開発とモデル実証による評価 (研究課題 3-3)</p>	<p>①磁石材料およびタイヤ材料を対象として、材料の組成や界面構造、欠陥等の因子に関する情報を多数の計測分析装置を使って収集した結果をもとに、構造化ライブラリを試作開発する。合わせて物性との相関を誤差要因も考慮して解析し、製品の性能の予測が可能となる評価項目の候補を決定する。</p>	<p>①タイヤ用ゴム材の原料であるゴム材原料の分子量分布推定の精度について、ヘイズ推定を用いた精度と不確かさを定量化する手法についても検討し、マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を用いて分子量分布の不確かさを定量的に評価可能な手法を開発した。</p> <p>磁石材料に関して特徴量がサンプルサイズと比較して多い条件であったため、観測変数間での多変量相関図を作成し、特徴量間の相関係数の大きさにより関係性の強いものを選出し、それを基に数十パターンのパス図を作成した。作成したパス図に関して構造方程式モデリングを用いて相関解析を行い、モデル適合度の高いものを構造化ライブラリとした。</p> <p>また、製品性能を予測する評価項目に関しても、タイヤ材料に関しては材料の熱伝導率、磁石材料に関してはビッカース硬度を新たに示唆することができた。</p>	○	
		<p>②タイヤ材料、磁石材料を対象にフィラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出とこれに基づく解析アルゴリズムを試作開発する。</p>	<p>②フィラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出を行い、これに基づく解析アルゴリズムを試作開発した。タイヤ材料解析に向けては、フィラーサイズやフィラー粒間距離などの形態学的特徴量抽出するソフトウェアパッケージを試作開発した。磁石材料開発に向けては、実際の結晶粒界画像から特徴量を自動抽出できるソフトウェアパッケージや、開発した関数パッケージとともに Matlab 機能を利用する新たな変換・表示用ソフトウェアパッケージを試作開発した。</p>	○	

		<p>③タイヤ材料、磁石材料のビッグデータ・AI 活用に向け、モデル計測データやモデル解析データの授受を通して複合計測分析システムモデルの評価を行う。</p> <p>③-1 タイヤ材料開発の効率化に向けて共通フォーマットに変換されたデータ群の蓄積を進め、統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。</p> <p>③-2 磁石材料開発の効率化に向けて、多種の計測分析装置で収集された複合・補間データと粒界構造解析用統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。</p>	<p>③-1 島津製作所を責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、モデル計測データやモデル解析データの授受が可能な複合計測分析システムモデル(複合積層構造解析用統合ビューアを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたにもかかわらず、住友ゴムによる実証評価を行い、モデルシステムを用いることで、これまで経験的にしか知られていなかった相関関係を明確化することが可能になり、新たなタイヤ材料開発の指針を得ることが可能となった。</p> <p>③-2 日立ハイテクを責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、複合計測分析システムモデル(粒界構造解析用統合ビューアを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたため、扱える画像解析可能な計測分析装置の種類(機種)を限定する形になったが、Nd系磁石5種類のモデル試料を用いて収集された多量な複合・補間データを活用して、構造と物性の相関を迅速に解明できることを明らかにした。</p>	◎
	投稿論文	0件		
	特許	「出願済」4件		
	その他の外部発表 (プレス発表等)	研究発表・講演：9件		
4.成果の実用化・事業化に向けた取組及び見通しについて	<p>本プロジェクトである「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」では、2機関のユーザー企業が参画し統合的なデータ解析等の検証を行い成果を得ることができた。将来的に、本事業で使用した計測分析装置は2機関のユーザー企業の関連する分野のみではなく、自動車、情報通信機械、医薬品、電気機械、業務用機械、化学、電子部品・デバイス・電子回路などの分野における研究開発で使用される設備である。</p> <p>したがって、本事業の成果をより多くの分野に浸透させることが実用化へ向けた取組として非常に重要であり、次段階で、いくつかの業界団体の参画を含めた体制で実施するプロジェクトを計画しており、国内へ本事業の成果を浸透させるための適切な展開が可能となる。また、さらに広い範囲の関係機関への本事業成果の普及を加速しなければ、世界各国で進められているデータ駆動型研究開発に対する競争力の維持は困難であるため、標準技術として規格化することを計画しており、本事業の成果を実用化へつなげることが可能となる。</p>			

5. 基本計画に関する事項	作成時期	2018年1月 作成
	変更履歴	2019年10月 改訂（研究開発期間の変更による改定）