



Web版

2022 No.85

focus NEDO

エネルギー・環境・産業技術の今と明日を伝える【フォーカス・ネド】



focus NEDO

フォーカス・ネド No.85 July 2022

発行：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) 〒212-8554 神奈川県川崎市幸区大宮町1-310 ミューザ川崎センタービル7階 TEL: 044-520-5152 E-mail: kouhou@ml.nedo.go.jp 編集：広報部 編集長：佐々木 淳



特集 材料開発の革新に三位一体で挑む 超超プロジェクト

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 Information

インタビュー動画

プロジェクトの
クライマックスは

Outside of Focus

プロジェクトに参加した
若手エンジニアの活躍について

アウトサイドオブフォーカス

今後
挑戦してみたいこと

研究開発で
一番大切にしてきたこと



超超プロジェクトの成果やメンバーへの期待など、本誌の対談では語られなかった、三宅 政美プロジェクトマネージャー（当時）と村山 宣光プロジェクトリーダーの率直な思いを動画に収録。ぜひご視聴ください。

動画はこちらからチェック! → <https://webmagazine.nedo.go.jp/pr-magazine/focusnedo85/>



NEDO's SNS お役立ち情報を発信しています。チェックしてみてください!

YouTube



<https://www.youtube.com/channel/UCd40TUB8A9PIdNs-vx5t8g>

NEDOが取り組む技術開発を分かりやすく紹介する動画や、ピッチイベント、セミナー、デモンストレーション等の映像を掲載しています。チャンネル登録、よろしくお祈りします!

Twitter



https://twitter.com/nedo_info

NEDOからお知らせするニュースリリースや公募、イベント情報等、さまざまな最新情報を発信しています。ぜひ、フォローをよろしくお願いします! #NEDOでも検索してください。

Facebook



<https://www.facebook.com/nedo.fb>

NEDOの事業内容や成果、最新のニュース、イベント情報など幅広くお届けしています。ぜひ、フォロー・いいね!・シェアをお願いします!

皆さまの声を、お聞かせください!

読者アンケート



本誌をお読みいただいた感想をお聞かせください。頂いた感想は、今後の広報誌等制作の参考とさせていただきます。



NEDOイベントカレンダー

9 Sep 5日(月)~6日(火) クリーンコルデー国際会議

10 Oct 4日(火)~31日(月) イノベーション・ジャパン2022 ~大学見本市&ビジネスマッチング~Online オンライン

12日(水)~14日(金) BioJapan 2022 パシフィコ横浜

18日(火)~21日(金)▷幕張メッセ 1日(土)~31日(月)▷オンライン CEATEC 2022

未定 ICEF 2022

11 Nov 2日(水)~6日(日) 創エネ・あかりパーク 上野恩賜公園

6日(日)~18日(金) COP 27

21日(月)~28日(月)▷オンライン 29日(火)~12/2(金)▷虎ノ門ヒルズ イノベーション リーダーズサミット 2023

12 Dec 7日(水)~9日(金) サステナブル・マテリアル展 幕張メッセ

未定 イノベーションストリーム KANSAI 2022

2 Feb 1日(水)~3日(金) 第17回 再生可能エネルギー 世界展示会&フォーラム 東京ビッグサイト

1日(水)~3日(金) ENEX 2023 東京ビッグサイト

1日(水)~3日(金) nano tech 2023 東京ビッグサイト

focus NEDO

エネルギー・環境・産業技術の今と明日を伝える【フォーカス・ネド】

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の広報誌「Focus NEDO」は、NEDOが推進するエネルギー・環境・産業技術に関するさまざまな事業や技術開発、NEDOの活動について、ご紹介します。

●本誌のお問い合わせはこちらまで。

E-mail:kouhou@ml.nedo.go.jp 「Focus NEDO」編集担当宛て



CONTENTS

- 02 PICK UP NEWS
難燃性マグネシウム合金の実用化で
高速鉄道車両の軽量化&省エネルギー化へ。
- 04 特集
材料開発の革新に三位一体で挑む
超超プロジェクト
- 06 超超プロジェクトの成果を、
広く材料分野の発展に活用してほしい
- 08 高活性触媒の開発期間を大幅に短縮
横浜ゴム株式会社
- 09 ソフトアクチュエータ材料の分子構造を
ごく短時間で提案可能に
バナソニックホールディングス株式会社
- 10 高機能触媒を従来比20倍の高速で開発
株式会社日本触媒
- 11 論文などから高分子材料の
物性データを自動抽出し、構造化
- 12 超超プロジェクトの成果や最新情報を共有し、
材料開発をさらにスピードアップ!
- 14 Promising NEDO Startups
スタートアップ支援のその先へ
MatBrain株式会社
ボールウェア株式会社
- 16 NEDO Information



東日本旅客鉄道株式会社の次世代新幹線試験車両「ALFA-X」(左:10号車、右:1号車)
[写真提供:JR東日本]

次世代新幹線の客室床板に適用して性能試験を実施!

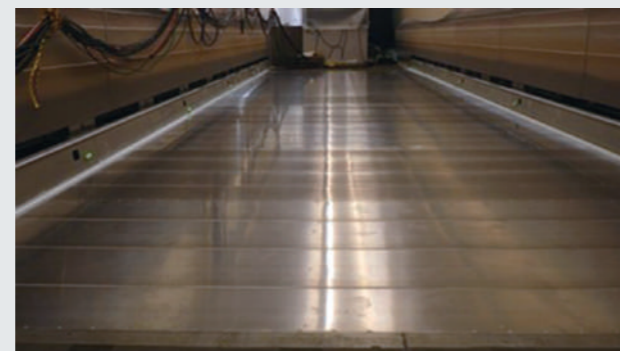
難燃性マグネシウム合金の実用化で 高速鉄道車両の軽量化&省エネルギー化へ。

新幹線等の高速鉄道車両の構体や内装部品には、おもに軽量のアルミニウム合金が使われています。昨今、鉄道の高速度や省エネルギー化の重要性が増す中、さらなる軽量化へのニーズが高まっており、アルミニウムよりも比重が30%以上小さいマグネシウム合金の早期実用化が期待されています。しかし、マグネシウム合金の展伸材※は、難燃性や耐食性、成形性が比較的低いため、電子筐体や機械部品といった小型部品には使われているものの、大型構造物にはほとんど使われていないのが現状です。

NEDOは、2014年度から、エネルギー使用量やCO₂排出量が多い自動車や鉄道車両等の輸送機器の軽量化を目指し、鉄鋼や非鉄金属(アルミニウムやマグネシウム等)といった構造材料の特性を向上させる「革新的新構造材料等研究開発」事業に取り組んでいます。その中で、NEDOと新構造材料技術研究組合(ISMA)は、高速鉄道車両への適用を目的とした難燃性マグネシウム合金を開発。高性能・低コストを両立する難燃性マグネシウム合金を使用した新幹線用の客室床板を、JR東日本のE956形式新幹線試験車両「ALFA-X」に適用し、2022年3月までに実際の運用環境で性能試験を行いました。

「燃焼試験」「接着試験」「局所への耐荷重試験」「垂直荷重試験」「音響試験」の5つの性能試験の結果、遮音性や強度を維持しながら約23%(約50kg)の軽量化を達成。難燃性マグネシウム合金で大型構造物を造れることを実証しました。NEDOは、今後も高速鉄道車両への本格的な適用を目指すとともに、新たに難燃性マグネシウム合金を適用できる箇所や部材を開拓し、輸送機器の軽量化による省エネルギーとカーボンニュートラル実現に貢献していきます。

※圧延、押出、鍛造など、塑性加工(材料に大きな力を加えて変形させることによって目的とする形状に加工すること)によって作製した金属材料のこと



ALFA-Xの中間車両客室に全長約9m、幅約3mの難燃性マグネシウム合金の床板を設置。マグネシウム合金製圧延材を鉄道車両に適用した例としては世界最大級のサイズ。

[客室床板の性能試験]

- ① 燃焼試験
難燃性マグネシウム合金製の客室床板は「不燃性」の判定を取得
- ② 接着試験
客室床板の組み立てに当たり、最適な表面処理や接着膜厚を確認
- ③ 局所への耐荷重試験
ハイヒールの踵の貫通や圧痕が生じる荷重は、従来のアルミニウム合金製床板と同等以上
- ④ 垂直荷重試験
乗客の荷重に対して十分な強度
- ⑤ 音響試験
— 実験室にて、床下の騒音に対する遮音性は従来のアルミニウム合金製客室床板と同等
— 客室床板をALFA-Xに適用し、従来に比べて室内の騒音は増加しない

NEDOのニュースリリースはこちら

https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101528.html



エネルギー・環境・産業技術の 今と明日を伝える【フォーカス・ネド】

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の広報誌「FocusNEDO」は、NEDOが推進するエネルギー・環境・産業技術に関するさまざまな事業や技術開発、NEDOの活動について、ご紹介いたします。

※新型コロナウイルス感染症対策をし、撮影時以外はマスクを着用しています。

Editor's Voice — 広報部より

新 材料の開発には長い時間がかかるという世間の常識を大きく覆すのが、今回の特集「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)」です。今まで専門技術者の経験とカンにささえられてきた材料開発に大きな改革をもたらし、日本の材料分野の技術力を今後上げるであろう成果を得ることができました。PICK UP NEWSでは、難燃性素材について、次世代新幹線試験車両の客室床板に用いて実証試験が実施されたことを紹介しています。こちらをご覧ください。

特集

材料開発の革新に三位一体で挑む

超超プロジェクト

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

NEDOは、日本の材料分野全体の競争力向上を目指して計算科学、製造プロセス技術、先端計測技術の連携による材料開発の共通基盤技術の確立を進めてきました。

従来のカンと経験に頼る開発手法からデータ駆動型の研究開発へ

日本の材料分野は、機能性材料などにおいて高い国際シェアを持ち、今後も産業を牽引していくことが期待されています。一方で、材料へのニーズが多様化・複雑化し、国際的な開発競争が激化している中、従来の「カン」と「経験」に頼り実験と試行を繰り返す手法では、新たに有力な材料を開発することが難しくなっていました。

近年、材料分野は、コンピューターの急速な進歩によって、シミュレーションやインフォマティクスを用いた研究開発が国内外で盛んに行われ、特にマテリアルズインフォマティクス (MI) は、萌芽的な研究でありながら、従来の研究開発手法に依らない新しい手法として注目されています。日

本においても、計算科学やデータ駆動型研究開発などによる、材料開発の効率化・加速化、またそれらに関する人材の育成などの取り組みが急務になっていました。

こうした背景の下NEDOでは、「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (略称: 超超プロジェクト)」を立ち上げ、有機系機能性材料を高速で開発するための、高度な計算科学を基にした材料開発基盤技術の確立を目指して2016年度からプロジェクトを実施してきました。

ポイントは、計算科学だけでなく、実際に多様なサンプルを自在・高速に試作するプロセス技術と、さらにこれまで観測できなかったものや、材料特性が発現しているその場を見る計測技術の3つのチームを連携させた三位一体の体制を組むことにありました。

この体制から生み出された良質なデータを人工知能 (AI)

研究開発に導入する手法

新材料探索 開発期間短縮 実験回数削減 人件費削減



超超PJ 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

P.08へ

ハイスループットシステムとデータ科学を活用した高活性Pt/ゼオン合成触媒の開発

P.09へ

電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発

P.10へ

CO₂を利用する有用化学品合成技術の研究開発



プロセス技術開発

高速かつ自在な製造が可能なプロセス技術

機能性材料の開発

先端計測技術開発

機能と構造の関係などを精密に解析する先端計測技術

計算科学技術開発

マルチスケール計算シミュレータ技術

に学習させ、必要な機能・性能から合成する材料を予測する、いわゆる逆問題解決による材料開発を実現し、試作回数・開発期間を従来の材料開発の20分の1に短縮することを目標におきました。

労力やコスト、失敗のリスクを恐れずアイデアを試すことができる環境づくり

具体的には、有機系機能性材料を対象にして、シミュレーションや試作、評価からデータ群をつくり出し、MIと融合することで、革新的な材料設計スキームの開発や、材料開発の加速化を図りました。

これまで、研究者が新しいアイデアを思いついても、実現にかかる労力やコスト、失敗のリスクが障壁になり、開発を躊躇するケースがなかったとは言えません。しかし、MIを

活用し、すぐに結果が分かるようになれば、アイデアを試すハードルは大幅に下がります。

本プロジェクトがスタートした当時は、材料開発にAIが活用されている事例は稀でしたが、その後数多くの研究により有効性が実証され、AIは今や革新的な材料の開発に必要な不可欠なツールとなっています。次ページからは、この超超プロジェクトに携わった国立研究開発法人産業技術総合研究所 (以下、産総研) 副理事長 研究開発責任者の村山宣光プロジェクトリーダーとNEDO材料・ナノテクノロジー部三宅政美プロジェクトマネージャー (当時) の対談をはじめ、プロジェクトの成果を紹介します。

超超プロジェクトの成果を、 広く材料分野の発展に活用してほしい



三宅 政美
超先端材料
超高速開発基盤技術
プロジェクトマネージャー
NEDO
材料・ナノテクノロジー部
主査(当時)

村山 宣光
超先端材料
超高速開発基盤技術
プロジェクトリーダー
国立研究開発法人
産業技術総合研究所 副理事長
研究開発責任者

PROJECT
MANAGER

PROJECT
LEADER

超超プロジェクトのコンセプトづくりから担当した
三宅 政美プロジェクトマネージャーと、村山 宣光プロジェクトリーダーが、
プロジェクトの成果とこれからの展望を語り合いました。

材料分野の競争力強化という目標に対し、
その基盤整備ができたと考えています

村山 超超プロジェクトの準備段階で、日本の材料分野の企業がグローバルな競争力を強化するために何をすればよいか、エンジニアや経営トップの意見をヒアリングしました。その結果、開発期間を大幅に短縮する必要があるという結論に達しました。それを踏まえて、プロジェクトのコンセプトを考え、試作回数・開発期間を20分の1に短縮するという野心的な目標を立てましたが、高い目標をクリアし、材料開発手法の基盤を構築できたと評価しています。

三宅 18社19テーマがほぼ目標をクリアしたことは大きな成果でしたね。

村山 もともと超超プロジェクトには、マテリアルズインフォマティクス(MI)の基盤技術を早急につくりたいという強い期待があり、枠組みにも従来とは異なる発想が必要だと感じていました。

三宅 産総研とADMAT(先端素材高速開発技術研究組合)との集中研方式は、その一つですね。

村山 参加企業18社から各1~3名、産総研からも50~60名が参加した大所帯で、これだけじっくり地に足をつけて研究に取り組んだ例はなかったと思います。

モデル素材という考え方の導入が、
プロジェクトを活性化しました

村山 苦心したのはプロジェクトの開発成果のオープン/クローズのバランスをどう取るかでした。18社の優秀な若手エンジニアが、互いの成果を共有する意義は大きい。一方で、企業独自のデータもある。そこで、モデル素材という考え方を導入しました。

三宅 各社が要素技術として共用化が図れるテーマをどう設定するか、その議論に時間をかけたと聞いています。

村山 具体的には、半導体材料、高機能誘電材料、高性能高分子材料、機能性化学品(超高性能触媒)、ナノカーボン材料(CNT・グラフェン)の5分野でモデル素材開発テーマを設けました。これに、13種類の基盤技術開発テーマを掛け合わせることで、実際の開発を進めました。

三宅 期間中は3ヵ月に1度、進捗報告会が開かれ、毎回100名近い参加者で盛況でした。

村山 それぞれの進捗を報告し、情報を共有することで、例えばA社のMI手法がB社に応用されるといったケースもたくさん生まれました。

三宅 これも集中研の効果の一つと言えますね。

村山 企業からもMI、人工知能(AI)に強い人材を派遣していただけたので、すぐにシナジーを発揮することができました。材料分野の20~30年後を見据えて、多くの種を蒔いたのではないのでしょうか。

三宅 2015年、産総研に「機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター」を設立されています。これもプロジェクトの進捗に大きく影響したではありませんか？

村山 当時、私は産総研の材料・化学領域長で、計算科学専門の研究者30人を擁する研究センターを立ち上げました。超超プロジェクトのスタートに1年先駆けたことが功を奏したかたちです。

データ駆動型材料設計技術利用推進
コンソーシアムの活用を期待しています

三宅 超超プロジェクトの正式名称に「基盤技術」という言葉が入っているように、プロジェクトの成果を、企業の材料開発支援に役立てることで実用化とするという判断もNEDO事業としては異色でした。

村山 大前提として、先を見据えた革新的なMIの基盤技術を集中研で実現するという方針があったからです。本当に勝つための競争力を獲得するには、基盤をおろそかにできないという認識がありました。

三宅 そのために産総研は、「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム(データ駆動コンソーシアム)」を設立されました。

村山 データの活用だけでなく、高速試作するプロセス装置、ナノレベルの計測装置なども利用できるようにしています。データ駆動コンソーシアムは、データ駆動型材料開発への入り口として、また、情報交流の場として活用されることを願っています。

三宅 プロジェクトに参加した研究者が、共同研究のテーマを提案する例もあると聞いています。多くの企業がプロジェクトの成果を利用して、材料分野がさらに発展することを期待しています。

インタビュー動画を公開中!



動画は
こちらから
チェック!



<https://webmagazine.nedo.go.jp/pr-magazine/focusnedo85/>

01

「ハイスループットシステムとデータ科学を活用した高活性ブタジエン合成触媒の開発」

高活性触媒の開発期間を大幅に短縮

世界最高の生産性を有する触媒システムを短時間で開発し、バイオマス由来のブタジエンゴムで、タイヤを試作することに成功しました。



バイオマス由来のブタジエンゴムで試作した「BluEarth-GT AE51」。

新家 雄氏
横浜ゴム株式会社
研究先行開発本部
タイヤ第一材料部
原料1グループ
博士(理学)

化石資源に依存しない製品開発で持続可能な社会への貢献を目指す

NEDO超超プロジェクトでは、産総研とADMAT、横浜ゴム株式会社の共同研究で、タイヤの主原料の一つであるブタジエンゴムをバイオエタノールから生成することに取り組んできました。横浜ゴムの新家 雄氏は「このテーマは系統的な検討例が少なく、詳しい触媒反応機構が未解明でした。しかし、複雑な反応を人間が一つひとつ実験で確かめることは現実的ではありませんでした」と話します。

プロジェクトでは、何段階にもわたる反応のメカニズムを計算科学で明らかにし、高度に自動化され短時間に多数の実験を行えるハイスループットシステムと触媒インフォマティクスの活用によって、世界最高のブタジエンの収率を持つ触媒システムの開発に成功。触媒の開発期間を22分の1

に短縮しました。

その後、バイオエタノール処理量を約500倍にした大型触媒反応装置を設計・製作し、約20kgのブタジエンを製造しました。さらに、このブタジエンを高純度化して重合反応で得られたブタジエンゴムを原料とした自動車用タイヤを試作し、従来の石油由来のゴムを使用したものと同等の性能を持っていることも確認できました。

「目標とする性能の触媒を開発できたのは、NEDO事業でハイスループットシステムを利用できたことが大きいと思います。また、集中研でいろいろな分野の専門家と情報交流し、切磋琢磨したことも開発を後押ししてくれました」

同社はNEDOグリーンイノベーション基金事業において、より高効率な技術開発に取り組む、バイオエタノール由来のブタジエンゴムの事業化を目指しています。

02

「電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発」

ソフトアクチュエータ材料の分子構造をごく短時間で提案可能に



目標とする特性を持つ分子構造を機械学習から特定し、ソフトアクチュエータ材料の開発を高速化しました。

マルチスケールシミュレーションを実現し、開発加速ツールとして活用へ

高齢化が進む現代においてシニアの活動を支援するデバイスが注目されています。中でもソフトアクチュエータは、ロボットに比べ、柔軟で軽量、気軽に着用できる点で、リハビリや介護のための作業補助等への応用も期待されています。しかし、その有力な材料候補となる液晶エラストマー(LCE)を実験中心で開発するには、時間もコストも膨大にかかることが課題でした。

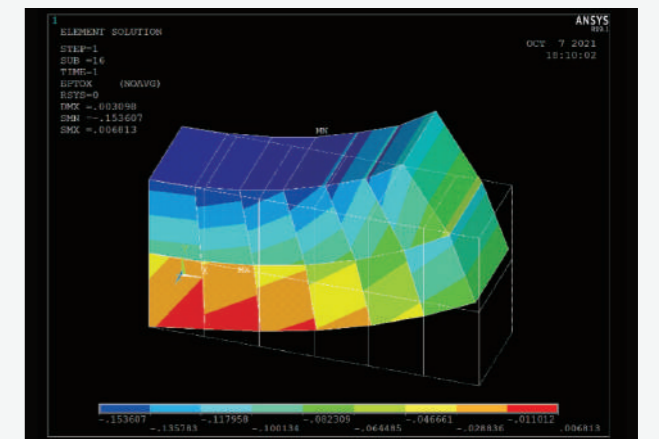
こうした背景の下、NEDOは超超プロジェクトにおいて、分子からデバイスレベルまで材料変形を再現できるマルチスケールシミュレーションの実現に向けた基盤技術の研究開発を行い、LCEの開発を高速化する計算技術の構築に挑みました。

プロジェクトでは、LCEの変形挙動を計算する粗視化分子モデルを構築し、先行研究の実験データと合わせてシミュレーション結果をデータベース化。機械学習によ

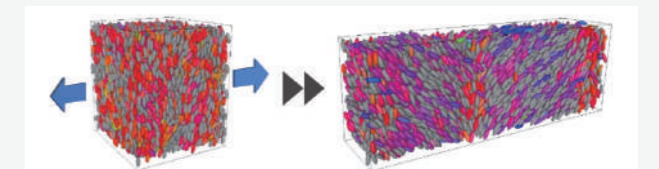
て必要なパラメータを絞り込み、材料力学特性との相関を解明しました。これにより、出力のロスがない大変形(Soft-Elasticity)が発現する分子構造の提案にかかる時間を、19分の1に短縮しました。

プロジェクトに参画したパナソニックホールディングス株式会社の田頭 健司氏は、「集中研体制で6年間じっくり腰を据えて取り組めたことが成果につながりました。NEDO事業だからこそ実現したことだと思います」と話し、同じく保岡 悠氏は「デバイスの要求性能から分子構造を割り出すシミュレーションの基礎をつくることができたので、実験の回数も大幅に減らせるはず。この成果をアクチュエータだけでなく、さまざまな商材に応用したい」と抱負を語りました。

有限要素法での解析結果



有限要素法での解析の結果、電場印加時に想定の変形が得られることを確認。



粗視化分子動力学法による一軸伸長計算



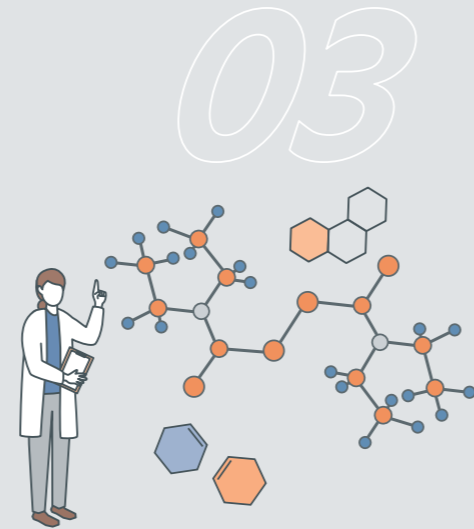
田頭 健司氏
パナソニックホールディングス株式会社
テクノロジー本部
マテリアル応用技術センター
主任研究員 博士(工学)

保岡 悠氏
パナソニックホールディングス株式会社
テクノロジー本部
マテリアル応用技術センター
博士(工学)

「CO₂を利用する有用化学品合成技術の研究開発」

高機能触媒を 従来比20倍の高速で開発

三位一体の開発によって添加剤を一切不要とし、環境調和性の高いカルボン酸合成に成功しました。



酢酸溶媒中のRhHI₂(CO)(PPh₃)₂触媒によるシクロヘキセンのヒドロキシカルボニル化



酢酸を溶媒として用いることで、添加剤を加えることなく、カルボン酸が高収率で得られることを実証。

実験と計算科学の協働により 80%近い収率を達成

二酸化炭素 (CO₂) と水素 (H₂) から合成されるギ酸を工業利用することは、カーボンニュートラル社会の実現に資するテーマです。しかも、ギ酸を基に製造するカルボン酸は、医薬品や農薬などの有用化学品、アクリル樹脂や高吸水性樹脂などの高分子材料の基幹原料としての応用も期待されています。ところが従来その反応には、高压条件を必要とし、有毒で爆発性の高い一酸化炭素 (CO) ガスや環境負荷の大きい複数の添加剤を大量に使う必要がありました。

そこで、NEDO超超プロジェクトでは、産総研とADMAT、株式会社日本触媒の共同研究により、有毒ガスや添加物を必要としない、より安全で環境調和性の高いカルボン酸合成技術の開発に取り組んできました。

プロジェクトでは、反応機構の解明と触媒活性種の特定に取り組み、化学反応の進行方向を自動的に見つけ出す反応経路の自動探索計算技術によって、CO₂ からカルボン酸を合成する反応機構をおよそ半年で明らかにし、収率も80%近くと想定以上の成果を上げました。

日本触媒の岡田 雅希氏は「企業の最先端のエンジニアが

集まるNEDOの集中研方式は、課題に対するアプローチも多様で、一社ではできない成果につながりました。この分野の研究者との人脈が生まれたことも、今後につながると期待しています」と話します。

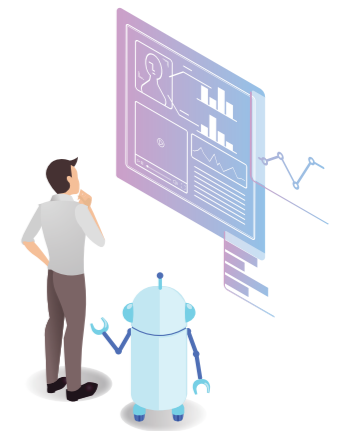
シンプルな触媒反応系を構築できたことに大きな手応えを感じている岡田氏。同社では、プロジェクトで獲得した計算科学やハイスループット実験装置、基盤となる要素技術を活用して、いろいろな分野に広く展開することを検討しています。



岡田 雅希氏
株式会社日本触媒
コーポレート研究本部
研究センター 主任部員
博士(工学)

材料データ構造化AIツール開発

論文などから高分子材料の 物性データを自動抽出し、構造化



AIで構造化した材料データを相互活用し、 材料開発の加速化と産業強化を目指す

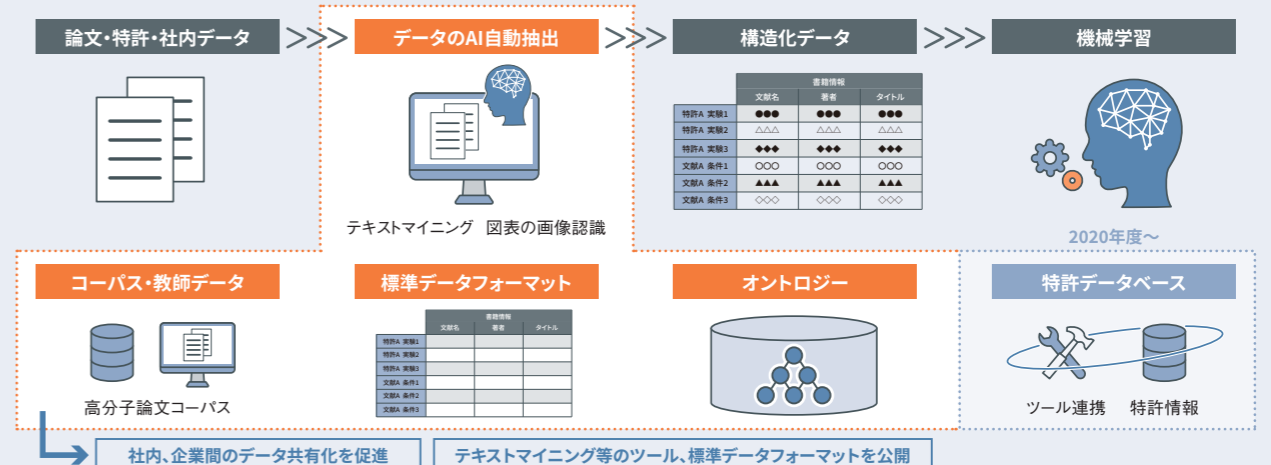
素材産業分野において大きくリードしている日本には、これまでに蓄積された材料開発に関する大量のデータがあります。これらのデータを資産として活用することは、競争力の高い日本の素材産業の優位性をさらに強化する上で重要です。そのためには、各機関や企業が個々に保有する材料データを共有し、相互活用できる基盤技術を整備していくことが要となります。

NEDOは、2019年度より、すでに公開されている特許・論文等の文書や、素材企業が保有する技術文書から、材料開発に必要な高分子材料の物性情報 (物質名・物性値およびそれらの関係性等) やプロセス情報等を自動抽出し、構造化す

る「材料データ構造化AIツール」の研究開発を実施してきました。プロジェクトでは、AI学習用の「高分子論文コーパス」の開発および作成、論文から物性情報等を抽出するAIの開発、PDF文書に含まれるグラフや表の読み取りと構造化を行う「図表からの情報抽出ツール」の開発、抽出した各種材料データを構造化するための「標準データフォーマット設計およびオントロジー (辞書)」の研究開発に取り組みました。

プロジェクト終了後は、開発したツール等を積極的に公開し、マルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術の管理・運営体制の構築を目標に据えています。シミュレーションデータ、実験データに加え、構造化された多種多様な膨大な材料データを有効活用しAIによる材料開発の取り組みをさらに加速していきます。

材料データ構造化AIツール開発の全体像

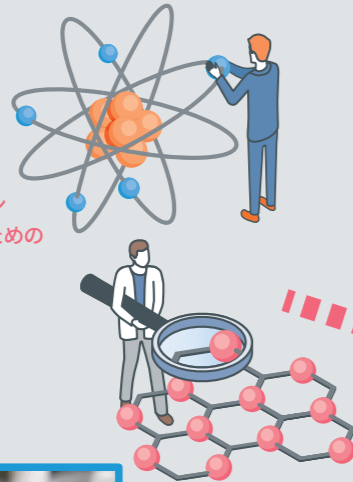


特許・論文等のすでに公開されている材料データや、素材企業が保有する材料データを構造化するためのソフトウェア開発を2019年度より実施。シミュレーションデータ、実験データに加え、多様な公知材料データを活用することで、AIによる材料開発の取り組みを一層加速させる。

材料設計プラットフォーム(MDPF)

計算シミュレータ

- ミクロからマクロまでを扱う マルチスケールシミュレーション
- 材料の構造・機能予測するための 10種類のシミュレータ



プロセス装置

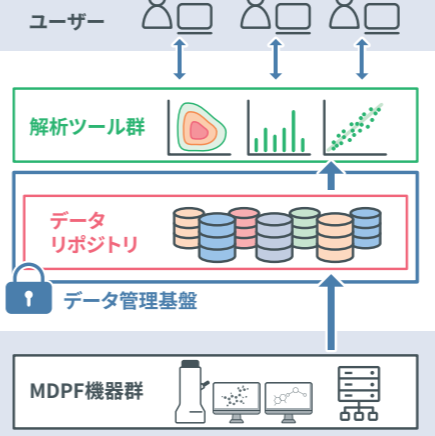
- ナノ粒子分散ポリマー、触媒、混練・発泡、ナノカーボンに対応
- 各種計測機器群とも直結



AIST Materials Gate データプラットフォーム(DPF)

目的別のDPFセクション

- 光機能性微粒子DPF**
調光材料、インク、感光材料など
- 配線/半導体材料DPF**
電線材、フレキシブルデバイス、メモリなど
- 電子部品材料DPF**
フレキシブル回路基板材料、キャパシタなど
- 機能性高分子DPF**
ゴム材料、放熱/断熱材料、アクチュエータなど
- 触媒DPF**
燃料電池材料、バイオマスを原料とする化合物など



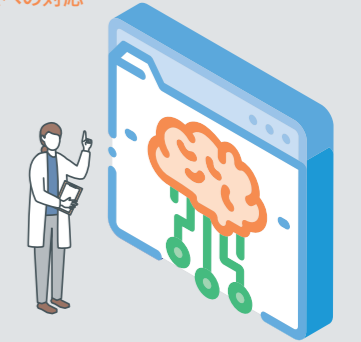
- ◆ DPFを利用しやすくするために目的別に整備
- ◆ データに対するセキュリティを最重要視
- ◆ 解析ツールによるデータ可視化と有用情報の抽出

解析ツールの特長

- 学習用データから特徴量を抽出
- 未知の材料に対する予測モデルの構築
- 予測モデルを用いた逆予測
- 構築した予測モデルを別の機能予測に転用(転移学習)

AI 利用技術

- 深層・機械学習による予測
- 逆問題解決への対応



計測機器

- マルチスケール解析、In-situ計測、構造・機能相関に対応する先端計測機器



データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

超超プロジェクトの成果や最新情報を共有し、材料開発をさらにスピードアップ!

材料設計プラットフォーム(MDPF※)

計算シミュレータ、プロセス装置群、計測機器群からニーズに合わせた「オンデマンドデータ」を創出し、DPFを介してAI利用技術と連携することで、最短時間で最適なソリューションを提供する。

※Material Design Platform

AIST Materials Gate データプラットフォーム(DPF)

大量のデータを生成・蓄積する「データリポジトリ」、データのセキュリティを確保する「データ管理基盤」、データの解析を行う「解析ツール群」からなるシステム。材料・目的別に「光機能性微粒子」「配線/半導体材料」「電子部品材料」「機能性高分子」「触媒」の5つのDPFを提供する。

DPFを利用したデータ駆動型材料開発のための環境を提供

2016年度から6年間にわたり実施してきた「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)」。その成果を広く有効活用し、実用化を進めていくことを目的に、NEDOと産総研は、2022年4月、「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム(データ駆動コンソーシアム)」を設立しました。

本コンソーシアムでは、超超プロジェクトで開発された計算シミュレータやプロセス装置、AI利用技術、計測機器等の基盤技術を集約した「材料設計プラットフォーム(MDPF)」を構築。参加会員は各プロジェクトの過程で蓄積したシミュレータや研究データ等を共有できる「AIST Materials Gate データプラットフォーム(DPF)」を利用することができます。

さらに、データ駆動型材料設計に関するセミナーや技術交流会等を実施し、データ駆動型材料開発に関する最新情報を提供するほか、個別課題に対応した技術コンサルティングや、産総研との共同研究のマッチング等を行ってまいります。

本コンソーシアムは、データ駆動型材料開発を目指す会員企業へ情報交流の場を提供し、業界全体の技術力向上を図るとともに、ニーズに基づいたデータ駆動型材料開発を加速することで、日本の素材産業の競争力の強化に貢献します。「データ駆動型材料開発」への入り口としてぜひご活用ください。

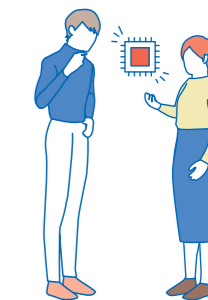
データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム(産総研HP)

<https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html>



Promising NEDO Startups

スタートアップ支援のその先へ



経済の活性化には、「新技術」を競争力とした起業家の育成が重要です。そこでNEDOは、研究開発型ベンチャーをはじめ、さまざまな角度でスタートアップ支援を実施しており、その中から、未来に向かって成長を続ける注目のスタートアップ企業を紹介します。

Innovator

File.19

MatBrain株式会社

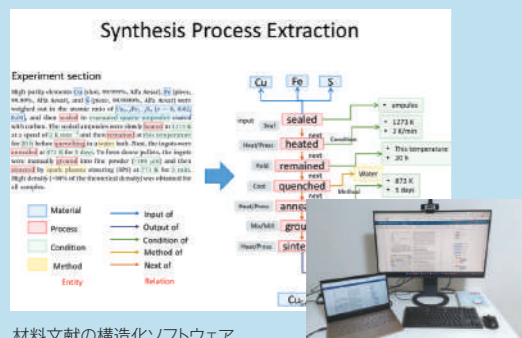
代表取締役
進藤 裕之 さん



化学・材料分野の
データ収集や構造化、知識化を支援して
DXを促進するAIソフトウェアを開発



<https://matbrain.jp/ja/>



材料文献の構造化ソフトウェア

2019年 奈良先端科学技術大学院大学で開発された自然言語処理、画像処理技術を活用したソフトウェア開発を目的としてMatBrain株式会社設立。

奈良先端科学技術大学院大学として、NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」材料データ構造化AIツールの研究開発に採択。学術論文の図表から情報を抽出して構造化するAIソフトウェアを開発。

2020年 科学技術論文から情報を抽出・構造化するソフトウェア「DeepScholar」を販売開始。

Q1. NEDO支援事業をどのように活用？

データ科学を活用した効率的な材料開発を促進するため、特許・論文等の公開文書や、素材企業が保有する技術文書から、物質の物性情報やプロセス情報を抽出して構造化するAIソフトウェアの開発に関してご支援いただきました。世の中にある多くの技術文書は非構造化データであり、これまで十分に活用することが難しい状態でしたが、素材企業と連携して、データフォーマットの標準化やオントロジーの構築に取り組み、最先端の情報科学に基づく文書解析技術を活用

することで、材料開発のDX化を支援する実用的なソフトウェア基盤を実現することができました。

Q2. MatBrainの“その先”とは？

脱炭素社会を見据えたデータ駆動型の材料開発や、化学物質の迅速な安全性チェックなど、世の中に散らばっている化学・材料に関する膨大なデータを収集、整理して構造化することの重要性が高まっています。また、企業内部に眠っている過去の実験データや技術文書から情報を取り出して活用できれば、研究開発業務の大幅な効率化が期待できます。このよ

うな化学・材料DXやマテリアルズ・インフォマティクスを支援するため、情報科学やAIを活用したデータベース構築、データ分析、データマネージメントなどを支援するソフトウェアおよびプラットフォームの開発を通じて、社会に貢献していきたいと考えています。

NEDO担当者からのコメント

「超先端材料超高速開発プロジェクト」では、最先端の材料開発を行う一方、過去の研究開発の蓄積を時間を越えて生かすツールの開発にも取り組んできました。ソフトウェアの販売に至ったことで、化学・材料分野のデータ駆動型開発への貢献が期待されます。

Innovator

File.20

ボールウェーブ株式会社

代表取締役社長
赤尾 慎吾 さん

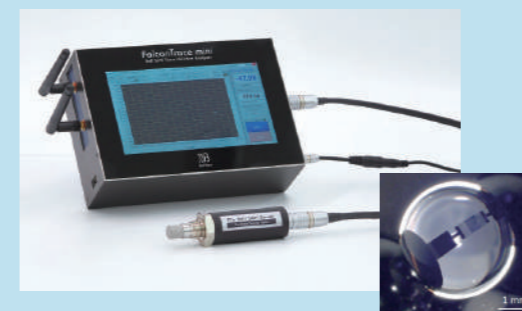


東北大学で発見した
新しい原理の「ボールSAWセンサ」
を応用し、微量水分計、
超小型ガスクロマトグラフを製品化

J-Startup



日本語HP <https://www.ballwave.jp/>
英語HP <https://www.ballwave.jp/english/>



ボールSAW微量水分計と3.3mmボールSAW素子

- 1999年 ボールSAW原理の発見と基本特許出願。
- 2014年 JST CRESTプロジェクト「ボール SAW センサを用いた小型・高速・高感度な微量水分計ユニットの事業化」に採択。
- 2015年 ボールウェーブ株式会社設立。
- 2017年 ハイエンド微量水分計「FT-700WT」発表。
- 2019年 小型高速微量水分計「FT-300WT」の本格販売を開始。JAXA Innovation Hubに「多種類の揮発性物質に対する高感度・高精度な可搬型ガスクロマトグラフの開発」に採択。
- 2020年 NEDO PCAプロジェクト「ボールSAW微量水分計の半導体産業への展開」に採択。先端半導体向け微量水分計組み込みプロジェクト本格化。手のひらサイズのボールSAWガスクロマトグラフ「Sylph」の販売開始。
- 2021年 2021年NEDO TRYプロジェクト「空気中のウイルスを1分以内に検出するボールSAWセンサの開発」に採択。

Q1. NEDO支援事業をどのように活用？

まったく新しい原理である「ボールSAW (Surface Acoustic Wave)」を世界で初めてセンサとして応用する「ボールSAWセンサ」を開発、製造しました。その最初の商品であるボールSAW微量水分計「FalconTrace」シリーズを上市しました。微量水分計は極小線幅の次世代半導体製造プロセスの高純度材料ガス中の不純物測定を目的としており、センサ製造の歩留まりの向上を目指す量産設備の開発をNEDO PCAプロジェクトにて行いました。

現在、センサヘッドの防爆認定が取得でき、各所においてテストを実施中です。

Q2. ボールウェーブの“その先”とは？

2020年初頭から流行している新型コロナウイルス感染症は、感染者の呼気に乗ってエアロゾルに含まれる多量のウイルスが環境空气中に放出されることで感染が拡大するという、これまでにない制御の困難な新規感染症であることが判明しています。現在、ウイルス検出にはPCR検査や抗原検査が用いられていますが、手間と時間がかかるという難点があります。

ボールウェーブはコア技術であるボールSAWを用いたケミカルセンサにバイオエンジニアリング技術を加えることで、空気中に漂うエアロゾルから直接ウイルスを検出するセンサの開発をNEDO TRYにより着手しています。

NEDO担当者からのコメント

ボールSAWセンサ技術の独自性は非常に高く、着実に実績を積み上げられています。この技術の応用範囲をさらに広げ、身近な社会問題の解決にも活用されていくことを期待しています。

StarT!Ps
from NEDO

中小企業・スタートアップ企業に役立つ情報 "T!Ps" がここに

中小・スタートアップ企業支援

「このサイトでどのようなことができるのか？」

動画を用いてご紹介しています。



<https://startips.nedo.go.jp/about/>