

「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」

(事後評価)

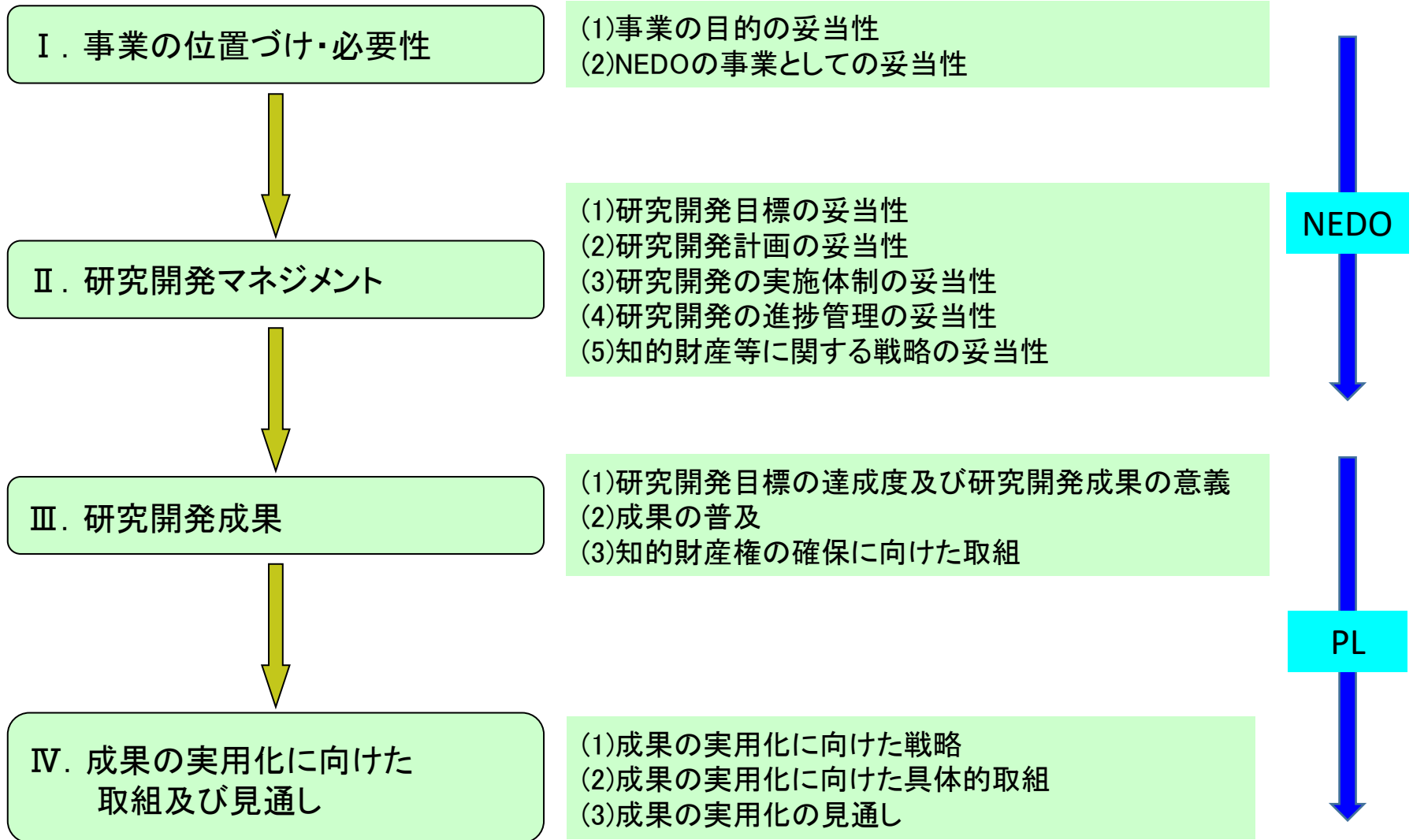
(2016年度～2022年度 7年間)
プロジェクトの概要 (公開)

NEDO

材料・ナノテクノロジー部

2022年6月20日

発表内容



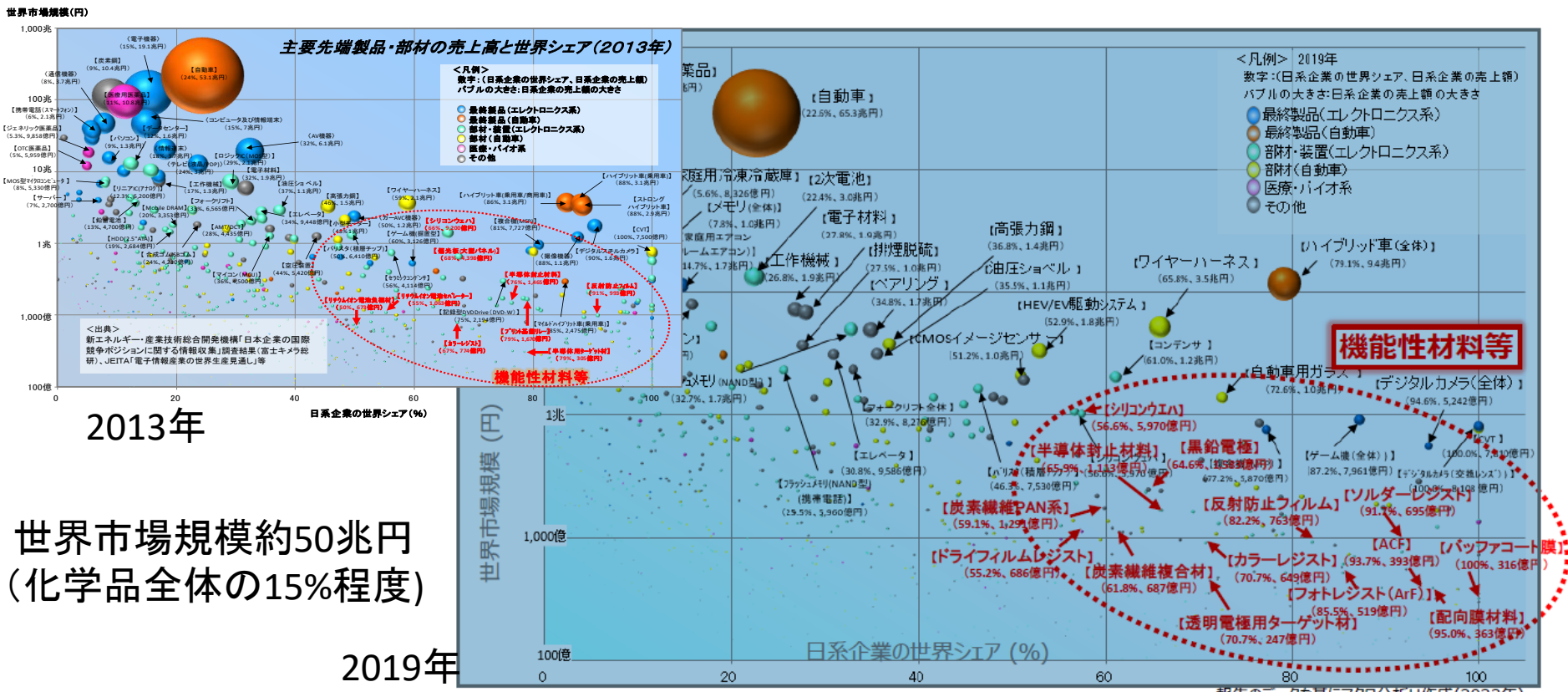
1. 事業の位置付け・必要性 (1) 事業の目的の妥当性

◆ 事業実施の背景と事業の目的

● 機能性材料... (機能による分類) 光学材料、磁性材料、導電・絶縁材料、伝熱・遮熱材料、触媒、...

(形態による分類) 粒子、繊維、フィルム、シート、膜、...

- ✓ 機能性材料が生み出す機能によって製品の付加価値が発現され製品の差別化が図れる。
- ✓ 機能性材料は、個々の市場規模は小さいが、各々で高いシェアを確保。



<出典> 新エネルギー・産業技術総合開発機構「2020年度日系企業のITサービス、ソフトウェア及びモノの国際競争ポジションに関する情報収集」調査結果

◆事業実施の背景と事業の目的

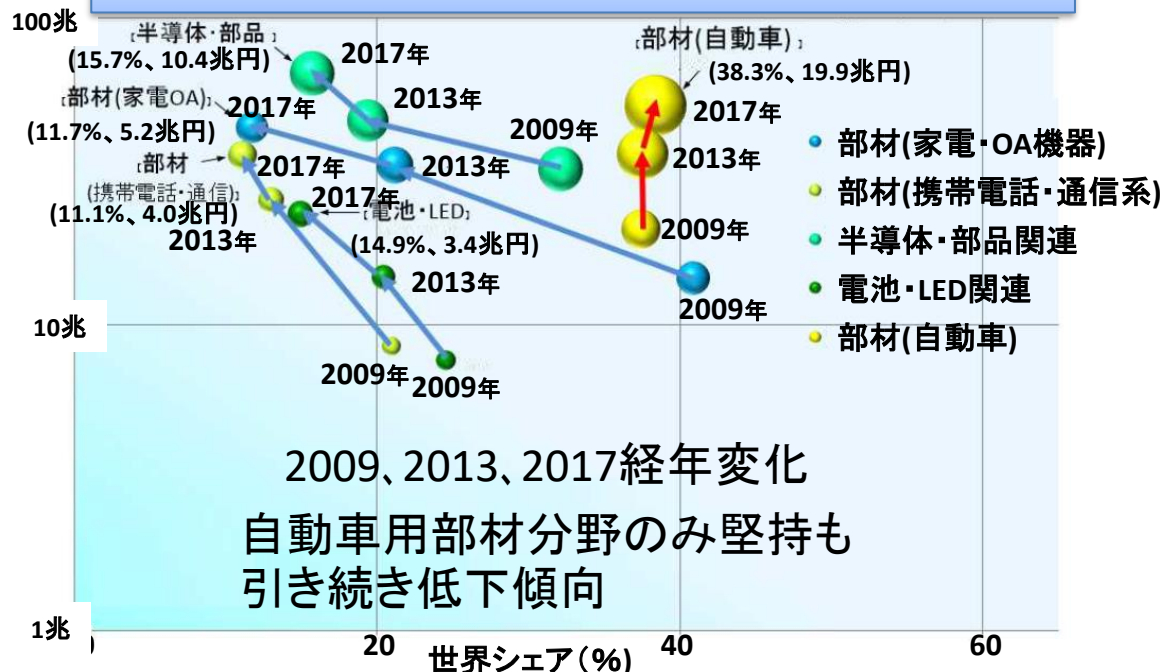
● 機能性素材（例：電子材料）を巡る環境の変化

- ユーザー側の製品サイクルの短期化
- 新興国メーカーの参入と積極的な投資
- 多数ある日本企業間の競争激化



市場シェアの低下とコモディティ化の加速

日系企業のポジション変化（中間材）



課題の解決に向けて

- ユーザー産業ニーズへの迅速な対応やそれらを取先行した開発・提案を可能とする**イノベーションの質とスピードの高度化**（経験と勘からの脱却）
- 増大する研究開発費用や設備投資に対応できる企業体力の確保

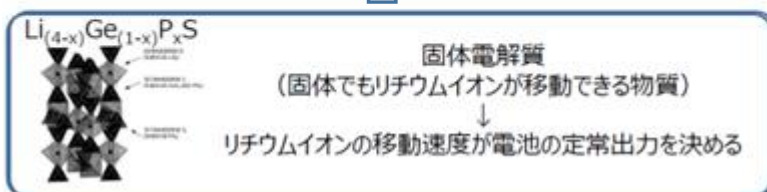
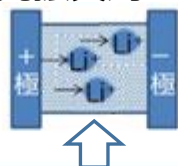
◆国内外の研究開発の動向と比較

- 米国では2011年、「Materials Genome Initiative (MGI) ~for Global Competitiveness」を発表。材料探索から商品化までの期間半減を目指している。
- 欧州もMARVEL、NOMADなどの計算科学、データベース構築、ビッグデータ分析ツールに関するプロジェクトを開始。中国や韓国も追随。

	特徴	具体的取り組み	代表的期間
米国	<ul style="list-style-type: none"> データ科学の競争力を重視 早期に国としての取り組みを開始 	<ul style="list-style-type: none"> (2011) Materials Genome Initiative (\$1億/年) (2014) MGI Strategic Plan 	NIST、NSF、DARPA、MIT、デューク大、ノースウエスタン大、アルゴン研究所
EU	<ul style="list-style-type: none"> Computational Materials Engineeringに重点 	<ul style="list-style-type: none"> (2014) MARVEL (2015) Novel Materials Discovery (6億円/年) 	ETHZ、EPFL、UNIBAS、UNIBE、UNIFR、UNIGE、USI、UZH、LMU München、UCD、フホルト大、ケンブリッジ大、MPCDF
中国	<ul style="list-style-type: none"> 新素材は戦略的振興産業との位置付け 	<ul style="list-style-type: none"> 国家中長期科学技術発展計画 (2006-2020) China MGI (2016年度 約48億円) 	中国科学院、中国工学院
韓国	<ul style="list-style-type: none"> “フォロワーからリーダーへ”が目標 	<ul style="list-style-type: none"> (2013) 第3次素材・部品発展基本計画 (2015) Creative Materials Discovery Project 	韓国科学技術院

出典：三井物産戦略研究所レポート情報を基にNEDOが改訂

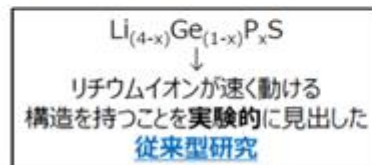
出典：文科省研究振興局



海外では、インフォマティクス的な手法を活用し材料開発を既に実施！

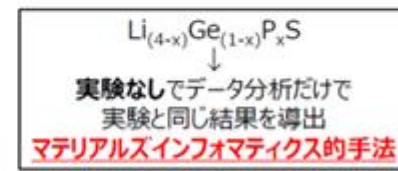
国内

2011年5月：国内A社 特許出願
(特許公開は2012年11月)



海外

'12年10月：韓国B社・MIT論文公開
*この系の開発情報なく、突然特許公開前に論文発表



米国“Material Genome Initiative”の中心研究者が深く関与し推進

出典：文科省研究振興局

◆他事業との関係

材料設計 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

- ・マルチスケールシミュレーション開発
- ・高速試作・革新プロセス技術開発
- ・先端計測技術開発
- ・AIを活用した材料開発手法の開発

SIP革新構造材料/MIシステムの開発

- ・性能まで予測する開発システム構築
- ・各モジュール開発とその統合化
- ・プラットフォームの基盤構築



内閣府

第1期2014～2018
第2期2018～2022

構造材料
(CFRP、耐熱合金、セラミックス)

2016～

有機機能性材料
(誘電材料、断熱ポリマ-
機能性化成品(触媒)
CNTコンポジット)

経済産業省

施策間連携

文部科学省

Mi²i

情報統合型物質・材料開発イニシアティブ
"Materials Research by Information Integration" Initiative

2015～2020

情報統合型物質・材料イニシアティブ

- ・基礎データベースの整備
- ・データ解析ツールの開発
- ・物質探索の成功事例の創出

磁石材料
蓄電池材料
伝熱制御・熱電材料

↑
材料設計
↓
物質探索

有機材料

無機材料

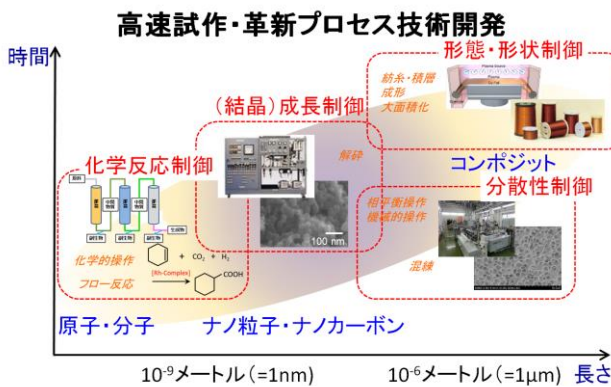
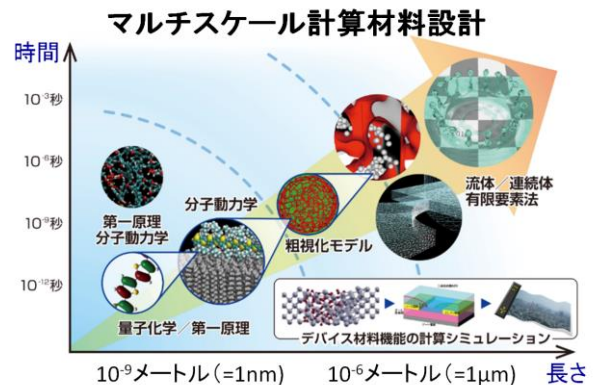
無機材料

有機材料

機能材料

構造材料

集中研究拠点で三位一体の研究開発



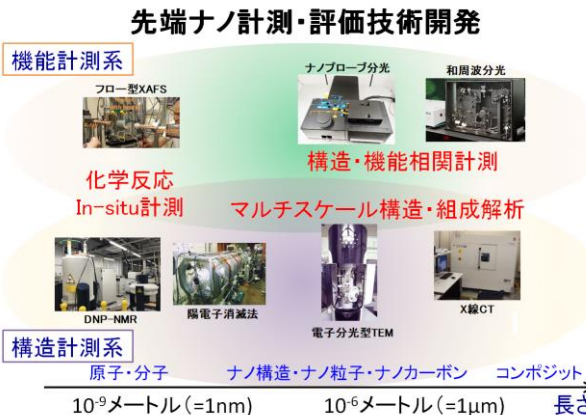
モデル材料（有機系機能性材料）を対象として

・計算科学（シミュレーション技術）のマルチスケール化による材料物性予測技術の確立（順方向予測）

・実サンプル試作の高速かつ自在な製造が可能なプロセス技術の確立

・従来観測出来なかった状態の機能や構造を精密に観測する先端計測技術の確立

・上記で創出したデータを活用してAIを学習させ、AIを用いて特定の材料物性の発現条件の予測技術を確立（逆方向予測）



👉 従来の延長線上にない材料探索技術の確立で
 開発スピードの加速化
 （試作回数・試作期間1/20を目標）

◆政策的位置付け



(写真は首相官邸のWebページより)

●総合科学技術・イノベーション会議

内閣総理大臣のリーダーシップの下、科学技術・イノベーション政策の推進のための司令塔として、わが国全体の科学技術を俯瞰し、総合的かつ基本的な政策の企画立案及び総合調整を行う。

中長期的な
方針を策定

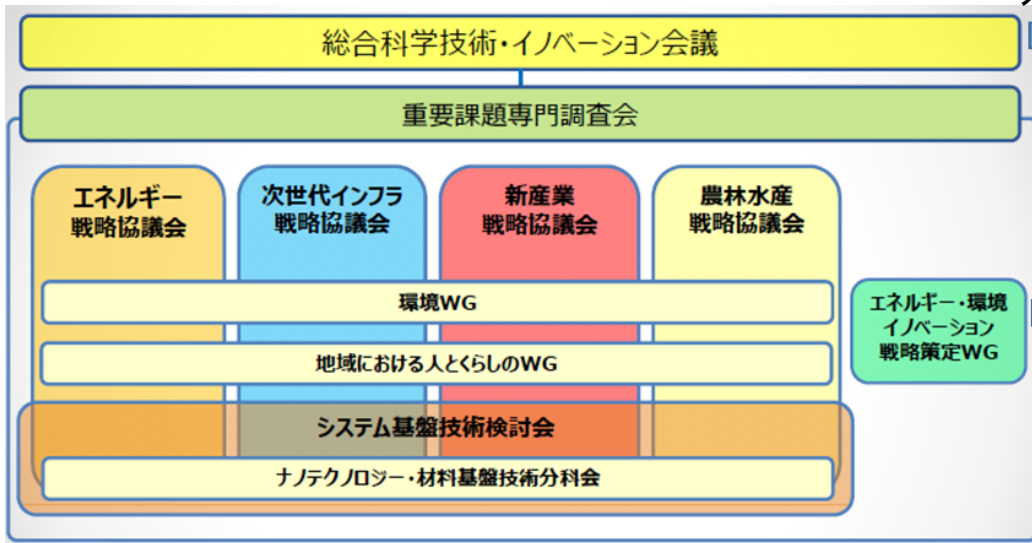
第5次科学技術基本計画

第3章 経済・社会的課題への対応
 <持続的な成長と地域社会の自律的発展>
ものづくり・コトづくりの競争力向上

具体論を
毎年策定

科学技術イノベーション総合戦略

経済・社会的課題への対応
 (1) 持続的な成長と地域社会の自律的発展
 Ⅲ. ものづくり・コトづくりの競争力向上
ii) 総合型材料開発システム

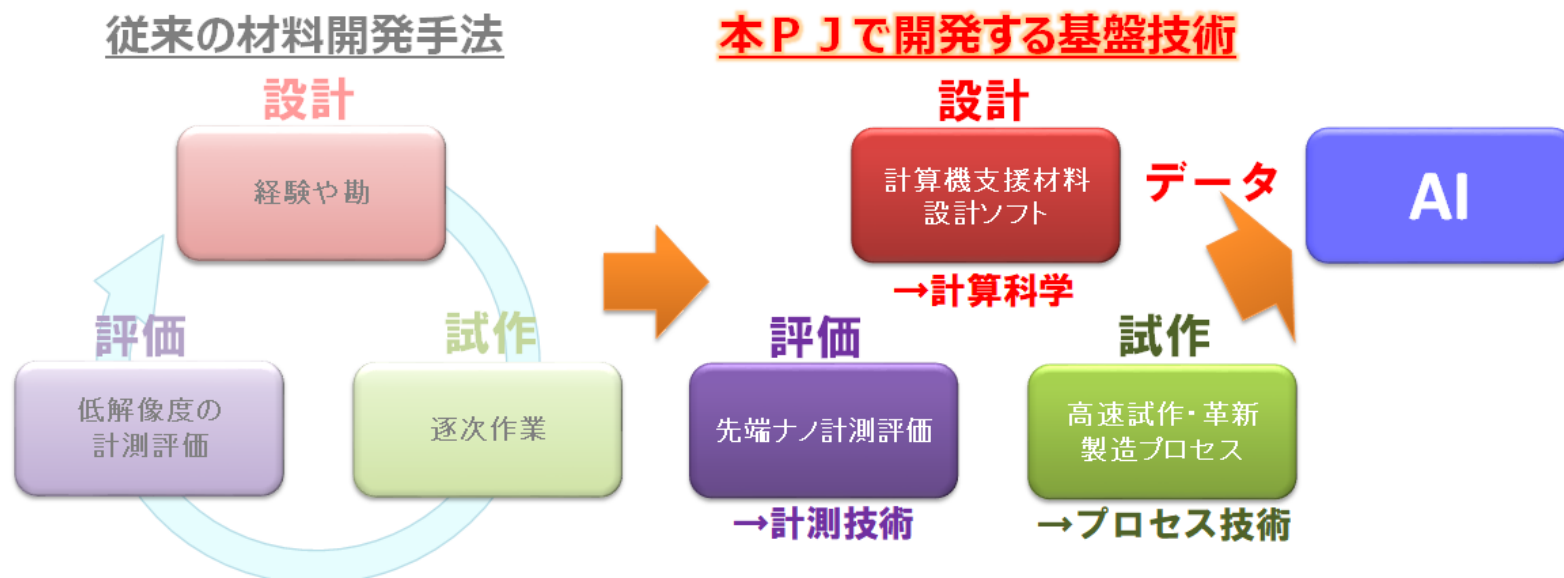


システム	分類	施策番号	期間	施策名
統合型材料開発システム	マテリアルズインテグレーション	材・文01 (継続)	H27~H31	情報統合型物質・材料開発の推進 (マテリアルズ・インフォマティクスの推進)
		材・経02 (新規)	H28~H33	超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト
		も・経05 (新規)	H28~H32	CPSIによるデータ駆動型社会の実現

「ものづくり・コトづくりの競争力向上」の文脈で**重要施策として位置づけ**

◆NEDOが関与する意義

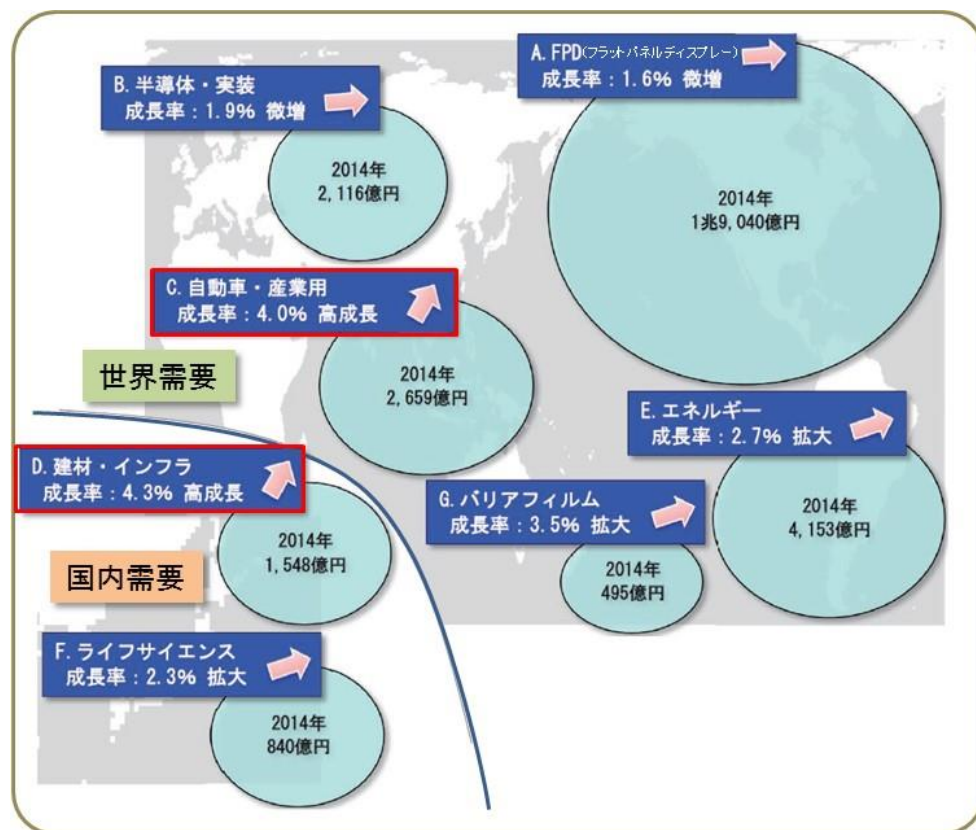
- 機能性材料産業全体の底上げのために、従来の「**経験と勘**」に基づく実験的手法に頼らず、更に個別の材料開発の対応ではなく、**共通基盤性の高い新たな材料開発手法**を開発する必要がある。
- 有機系機能性材料を対象として計算科学を中心に高速試作プロセス技術、先端計測技術と一体で開発することで材料開発の効率化・加速化を図る。更に「**データを創出**」し、AIに学習させ、特定の材料物性の発現条件の予測技術の確立(逆問題解決) に対して挑戦。
- 一企業、一大学では出来ない複雑かつ**リスクの高い**技術開発であるため、**国研、大学、企業を一拠点に結集させて共通基盤技術**の開発を行うため、NEDOの関与が必要不可欠である。



NEDOがもつこれまでの知識、実績を活かして推進すべき事業として「機能性材料分野の戦略」でも位置付けられた

◆実施の効果(費用対効果)

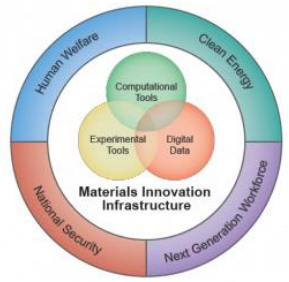
- プロジェクト費用の総額 138億円(7年間推定)
- 売上予測 2兆円市場獲得(2030年)
- CO2削減効果 360万t/年(2030年)



左図は一例。「機能性フィルム」では堅調な市場成長が続く。本プロジェクトでは機能性素材全般の共通基盤技術として日本素材産業の市場獲得への貢献を目指す
(出典:機能性材料分野の技術戦略)

◆ 研究開発目標と根拠

● Materials Genome Initiative (2011~)



目標: This initiative offers a unique opportunity for the United States to discover, develop, manufacture, and deploy advanced materials **at least twice as fast as possible today**, at a fraction of the cost.

● SIP革新構造材料/MIシステムの開発 (2014~)



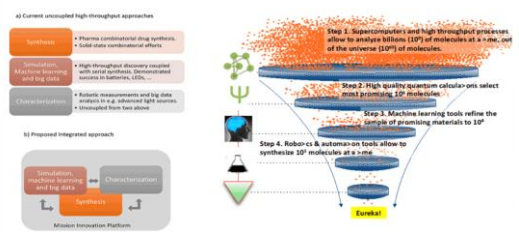
目標: 構造材料を対象としてシミュレーションや数学的アプローチを活用しながら「**構造材料開発の時間を一桁**(開発時間を90%短縮)短縮するのに役立つことを証明」

● 情報統合型物質・材料イニシアティブ (2015~)



目標: 産業界の物質・材料研究開発課題に対して、データ駆動型物質・材料科学を用いることにより、有効なソリューションを**短期間**で開発・提供する

● (参考) Mission Innovation Clean Energy Materials Innovation Challenge(2018~)



目標: The Materials Acceleration Platform, or MAP, aims to **reduce the materials development cycle from 10 to 20 years to 1 or 2 years.**

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

◆ 研究開発目標と根拠

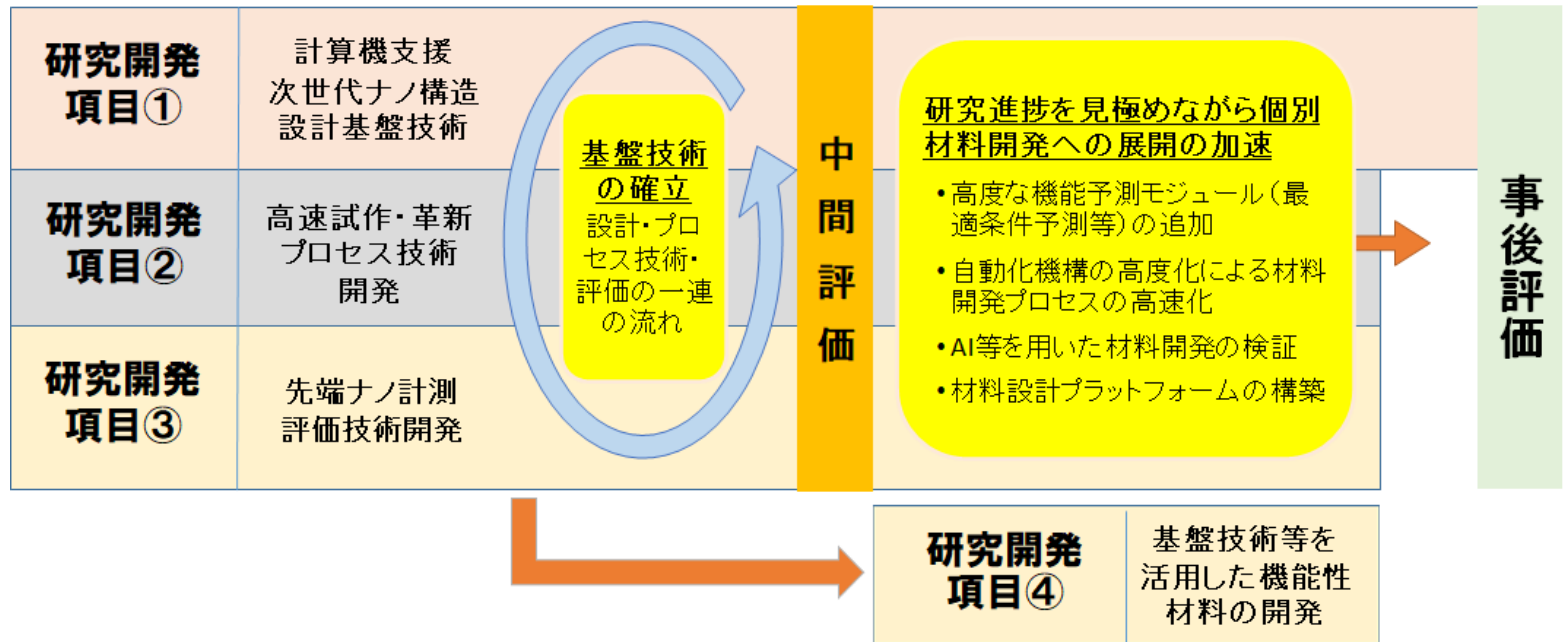
アウトプット目標: 高機能材料・部材の研究開発支援を可能とする高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術を駆使して革新的な**材料開発基盤を構築**を目指す。これにより従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間1/20の短縮を目指す**。(難易度の高い目標を設定)

研究開発項目	中間目標(2018年度末)	最終目標(2021年度末)	根拠
① 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術	対象となる機能を構造、組成等から導き出せる 新規のマルチスケール計算シミュレータを構築する 。	構築した新規マルチスケール計算シミュレータを活用する事により、 AI(機械学習やデータマイニング等))を活用した材料探索手法を確立する 。またプロジェクト終了後の開発した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・運営体制の計画を示す。	有機系機能性材料に対してAIを活用した材料開発手法を確立するには、AIが学習するための「データ」が必要となるが、そのための有効なデータベースが存在しない。このため本プロジェクトでは新規なシミュレーション、高精度なプロセス手法・計測手法でのAI学習用の「データ創出」を指向している。プロジェクト後半でAIを活用した材料開発の本格的な実施を行う為に プロジェクト前半までに必要な基盤技術(シミュレーション開発や高速プロセス手法、新規計測手法)の確立に目途をつける中間目標設定とした 。
② 高速試作・革新プロセス技術開発	研究開発項目①「計算支援次世代ナノ構造設計基盤技術」で開発するシミュレータの高精度化に貢献するために、シミュレーション結果(構造)に対応する サンプルを精密に作製可能なプロセス手法を確立する 。	中間目標までに開発したプロセス手法について高速化を図り、PJ全体目標である従来の材料開発と比較して 試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する 。	プロジェクト後半は前半で確立した基盤技術の高度化を行いながら、それぞれの技術でAI学習用データを創出し、AIを活用した材料開発手法を確立することにより 試作回数・開発期間1/20の短縮を目指した 。
③ 先端ナノ計測評価技術開発	研究開発項目②「高速試作・革新プロセス技術開発」で試作されるサンプル等を “非破壊”または“In situ”で評価を可能とする計測手法を確立する 。	中間目標までに開発した計測手法を汎用化するとともに、計測時間の高速化を図り、PJ全体目標である従来の材料開発と比較して 試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する 。	また本プロジェクト終了後に、開発した技術(特にシミュレータ、AI活用ノウハウ)を 継続的にブラッシュアップされる体制を構築することが重要である ことから、得られた成果・技術の管理・運営体制の計画をプロジェクト実施中から検討し、最終成果物として示す目標とした。

◆ 研究開発のスケジュール

(考え方)

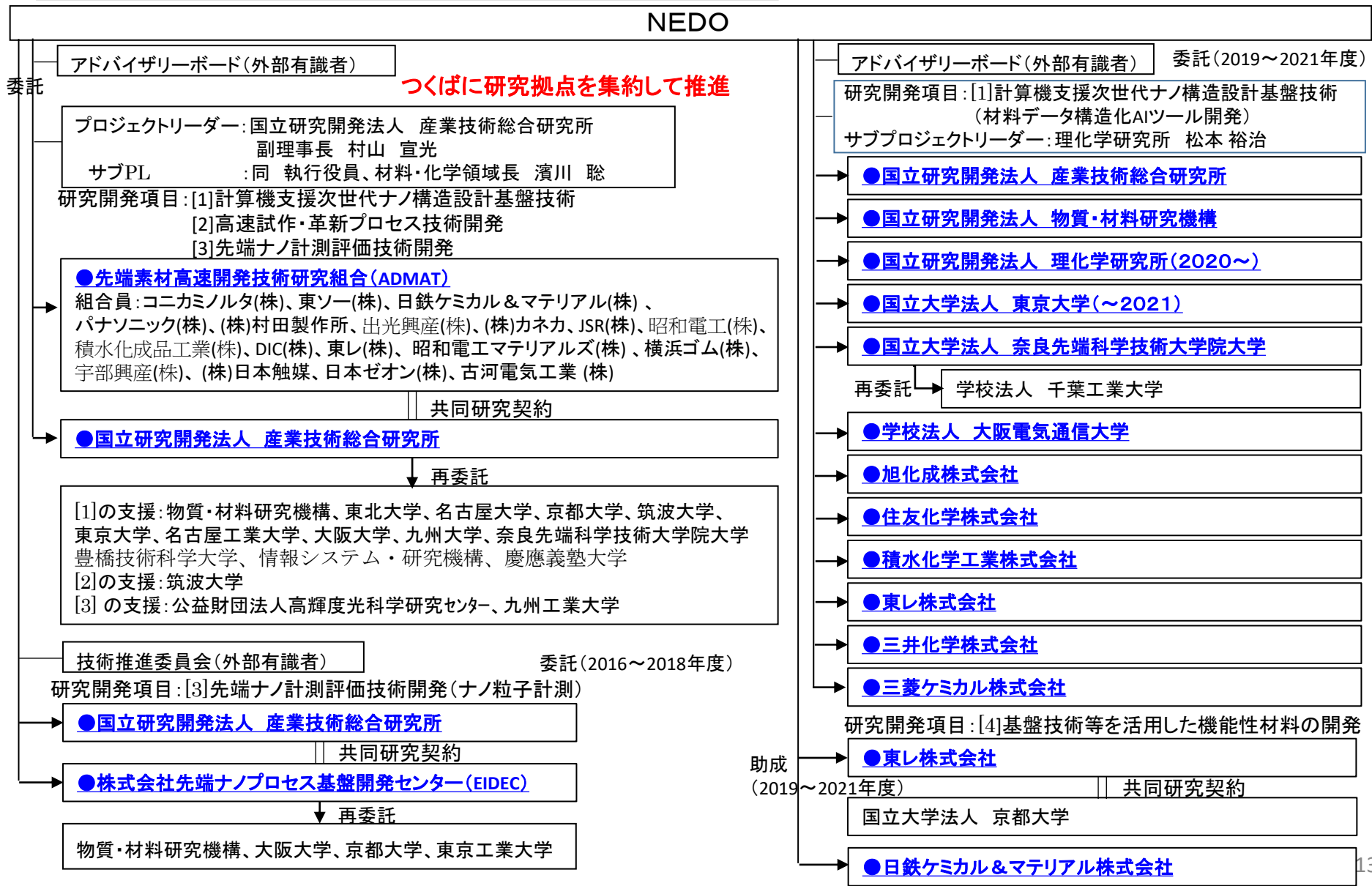
- ・最終出口となる有機系機能性材料のAIを活用した「材料開発手法の確立」は、**従来の材料開発とは全く異なる手法**
- ・AIを学習させるには「データ」が重要だが、世界中に有効な「データベース(セット)」が存在しない
- ・従ってPJ前半までにシミュレーションの開発やプロセス、計測で「**データ創出**」を可能とする環境を整備
- ・PJ後半では前半技術の高度化に加え、AI等を用いた材料開発の検証を実施(材料開発手法の開発)



※研究開発項目内の各テーマの開発スケジュールは事業原簿参照

2. 研究開発マネジメント (3) 研究開発の実施体制の妥当性

◆ 研究開発の実施体制



◆ 動向・情勢の把握と対応

基盤技術の適用範囲拡大のための追加公募の実施



情勢	対応
<p>PJ開始当初(2016年度)から基盤技術の適用範囲拡大を目指すため、モデル材料の拡大を検討していたところ、NEDOの技術戦略研究センターの「ナノカーボン戦略」において、CNTやグラフェン等の応用製品開発が、従来の試行錯誤的な開発手法では開発スピードに限界があり、新手法であるマテリアルインフォマティクスを活用すること推奨されていたと共に、有識者ヒアリングを通じて、ナノカーボン応用製品開発が本PJで開発中の拡張OCTAなどと相性が良いことが判明。</p>	<p>2017年度に本PJのモデル材料として「ナノカーボン材料」を追加して公募を行い、古河電気工業株式会社と日本ゼオン株式会社を実施者として採択し、先端素材高速開発技術研究組合の構成員に追加して研究を開始した。(基盤技術の適用可能性拡大に努めた)</p>



経済産業省のConnected Industries施策への取組み

情勢	対応
<p>経済産業省が推進しているConnected Industries施策に対応して素材分野検討WGが大臣に答申した素材開発強化に向けた対応策として「AI活用型素材開発のための標準データフォーマットの整備」が今後、国で対応すべき課題として提言された。(2018年5月)</p>	<p>有機機能性材料の「データ創出」を指向している本PJにおいて、公知の「データ収集」を新機軸として加え、実施内容を具体化する為に、2018年度6月より「今後の材料開発に必要な共通データプラットフォームに関する調査」を開始、その調査結果を受け、2019年度に公募実施、2国研、3大学、6企業を実施者として採択し、研究を開始した。</p>

◆ 研究開発の進捗管理

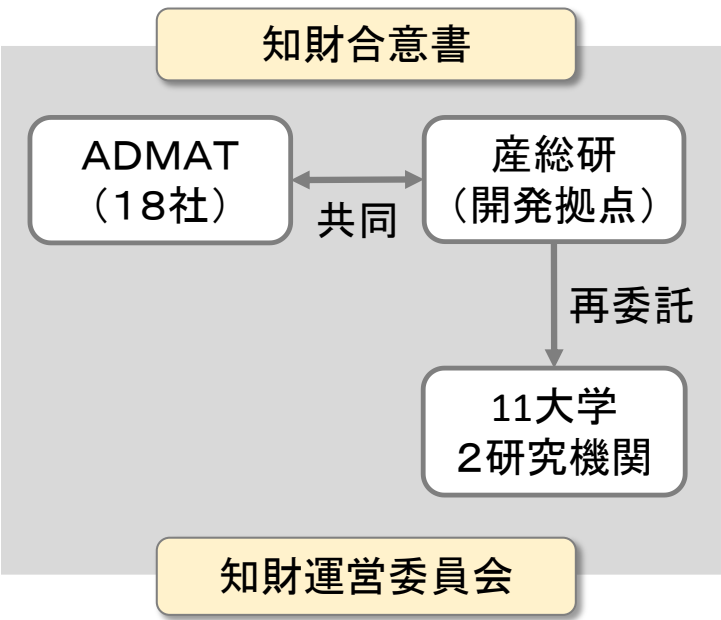
会議名	主なメンバー	目的・対象	頻度	主催者
アドバイザリーボード ・ 技術推進委員会	・外部有識者 ・PL、SPL、TL	・プロジェクト全体の方向性、 目標設定の妥当性等を議論 ・全テーマ対象	年2回程度	NEDO
研究進捗報告会 ・ 全体ミーティング	・PL、SPL、TL ・実施機関研究者	・全体での成果創出に向け、 全関係者で事業の進捗を共有し、 テーマ間連携を図る ・全テーマ	3か月に1回	実施者
運営企画会議	・PL、TL ・ADMAT事務局	・研究体運営の意思決定 ・進捗報告・確認	1か月に1回	実施者
ワーキンググループ	・TL ・AIST研究者 ・ADMAT技術委員	・技術ディスカッション ・計算、プロセス、計測の単位でWGを開催	1か月に1回	実施者
知財運営委員会	知財運営委員会規程メンバー	・特許出願、对外発表に関する報告、調整、アドバイス	随時	実施者

**各レイヤーで研究進捗確認会議を設置
プロジェクトに直接関与していない外部有識者の意見も取り込み客観的な視点も踏まえたプロジェクトマネジメントを実施**

◆ 知的財産権等に関する戦略

- ▶ 「NEDOプロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」に基づき、参画機関にて「知財の取扱いに関する合意書」を策定。
- ▶ 合意書では、知財運営委員会や知財の帰属、秘密の保持等、プロジェクトの出口戦略において、重要となる知財ルールを整備
- ▶ NEDOでのデータマネジメント基本方針策定を先取りし、データ等に関して、利用権の帰属等取り扱いを規定

- 事業活用を見据えて、計算科学関連の知財を開発拠点に集約する。
- 透明性の高い知財運営を行う。



【知財合意書】

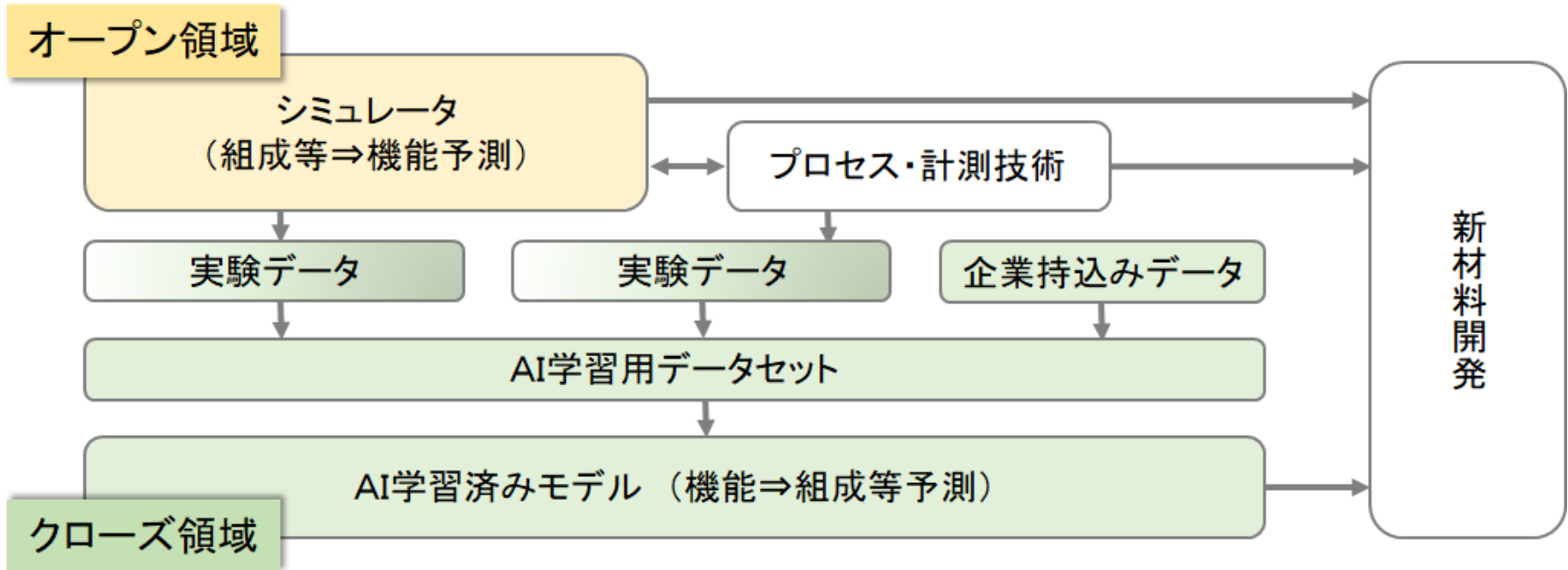
- 知財集約: 開発拠点にサブライセンス権(再実施権)付きの通常実施権を付与し、知財の一元管理によりスムーズな事業活用を図る。
- 現行制度で知財権が不明確なデータ等に関して、利用権の帰属など取扱いを規定している。
- 共有知財は互いに自由・無償実施を原則とするなど、プロジェクト内においてBIPを含めた積極的な相互活用を図る。

【知財運営委員会】

- 代表者(5~7名)で構成する委員会を定期的(週1回)に開催すると共に、成果届等の審議結果はプロジェクト全参加者に周知している。

◆ 知的財産権等に関する戦略

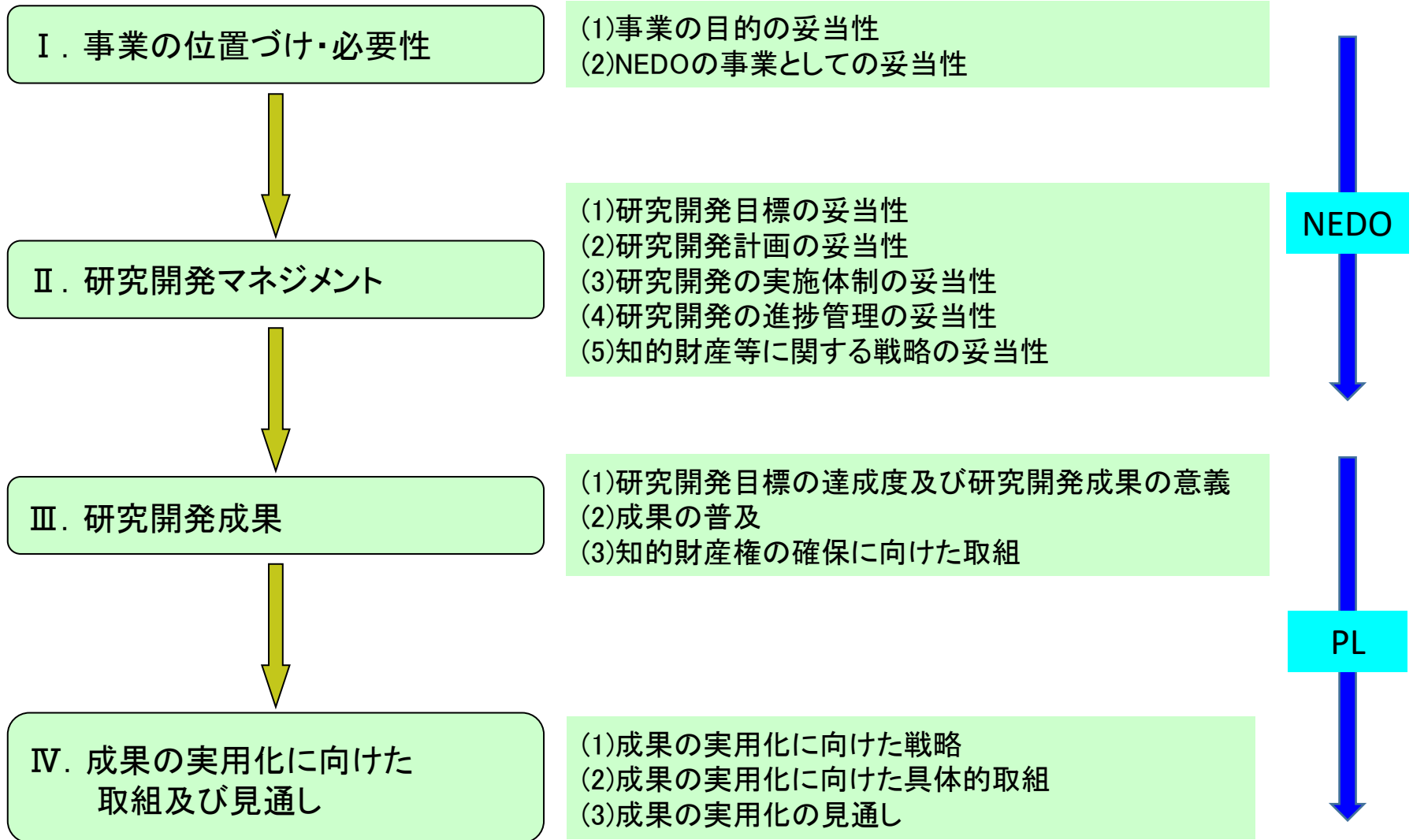
- 【オープン&クローズ戦略】**
- シミュレータは、開発技術の普及と新市場形成に向けたオープン領域と捉え、プログラムを積極的に公開して広範な利活用を図る。
 - AI関連技術(データセット、学習ノウハウ、学習済みモデル)は、市場競争力を確保のためのクローズ領域と捉え、独占的利活用を見据えた知財管理を図る。



▶ 独立行政法人 工業所有権情報・研修館の知財プロデューサ派遣事業を活用して、つくば集中研拠点の知財マネジメントを支援

発表項目	まとめ
1. 研事業の位置付け・必要性について	
1) 事業の目的の妥当性 (p2-7)	日系企業の重要分野における世界シェア確保にむけて材料開発のスピードアップを図るものである。
2) NEDOの事業としての妥当性 (p8-9)	企業・大学単独では不可能な技術開発。国研、大学、企業を結集させての開発に、NEDOの関与は必要不可欠。
2. 研究開発マネジメントについて	
1) 研究開発目標の妥当性 (p10-11)	海外、国内の先行PJに遜色のない、チャレンジングな目標を設定。
2) 研究開発計画の妥当性 (p12)	前半は基盤技術の確立、後半はAI等を用いた材料開発の検証を実施。普及のためのシミュレータ公開や、成果の普及や活用のための助成事業も導入。
3) 研究開発の実施体制の妥当性 (p13、14)	研究拠点を集約して研究開発を開始。適用範囲拡大のための追加、経済産業省施策への取組みとしての追加など、柔軟な見直しも実施。
4) 研究開発の進捗管理の妥当性 (p15)	プロジェクト外の有識者を招いての会議や、実施者内部の各階層での各種会議体を設置し適切に管理。
5) 知的財産等に関する戦略の妥当性 (p16-17)	プロジェクト終了後を見据え、データの取り扱いも含んだ方針や、「オープンクローズ戦略」を知財専門家協力のもと策定。

発表内容



「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」 (事後評価)

(2016年度～2022年度)

5. プロジェクトの概要説明資料 (公開)

5. 2 「研究開発成果、成果の実用化に向けた取り組み 及び見通し」について

2022年6月20日

研究開発計画：計算・プロセス・計測の連携

原子

反応・
重合

低分子/
高分子

高次
構造

高分子反応/
表面修飾

複合材料(有機/
有機・無機)

成形加工
(積層/配向)

マルチスケール計算
シミュレータ技術

ハイスループット合成



計算機支援
次世代ナノ構造
設計基盤技術



スーパー
コンピューター

機能性材料開発

高速試作・革新
プロセス
技術開発

先端
ナノ計測評価
技術開発



電子分光型電子顕微鏡

高速かつ自在な製造が
可能なプロセス技術

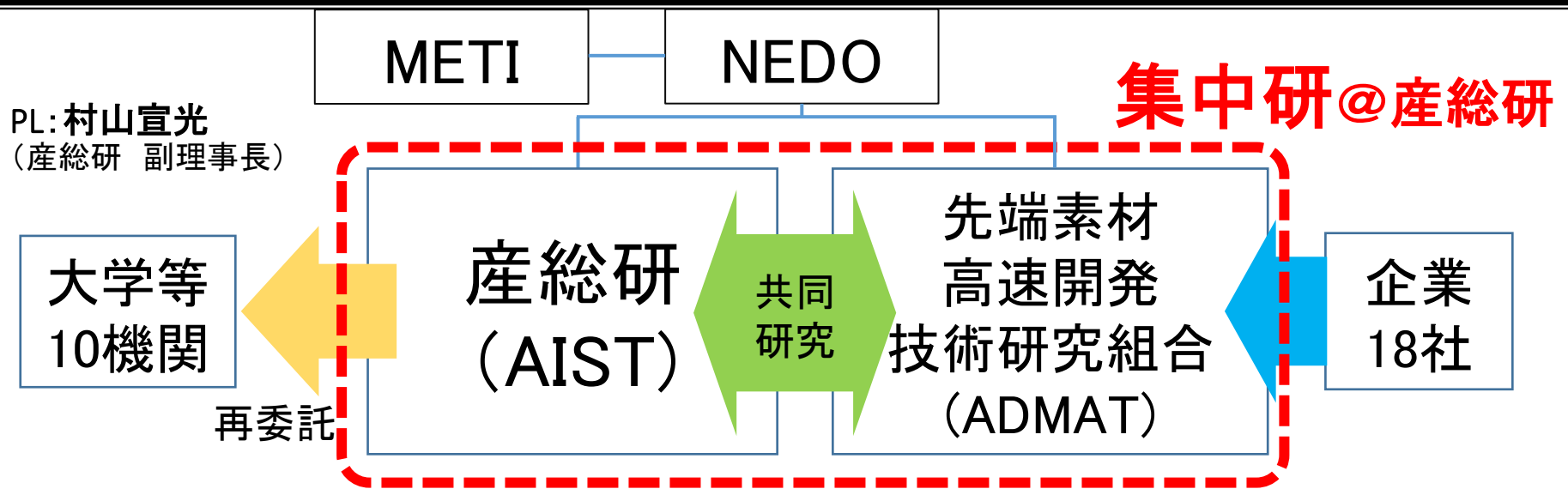
機能と構造の関係などを
精密に解析する先端計測技術



陽電子消滅法

計算/AI・プロセス・計測の連携による
研究開発促進(開発期間1/20)

研究開発の実施体制 (2022/3時点)



先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)

- 設立年月日 : 2016年 7月12日
- 理事長 : 北弘志(コニカミノルタ(株) 技術フェロー)
- 組合員(18社) : 出光興産(株)/ 宇部興産(株)/ (株)カネカ/ コニカミノルタ(株)/ JSR(株)/ 昭和電工(株)/ 昭和電工マテリアルズ(株)/ 積水化成品工業(株)/ DIC(株)/ 東ソー(株)/ 東レ(株)/ 日鉄ケミカル&マテリアル(株)/ (株)日本触媒/ 日本ゼオン(株)/ パナソニック(株)/ 古河電気工業(株)/ (株)村田製作所/ 横浜ゴム(株)

年次計画

第1期(3年)

第2期(4年)

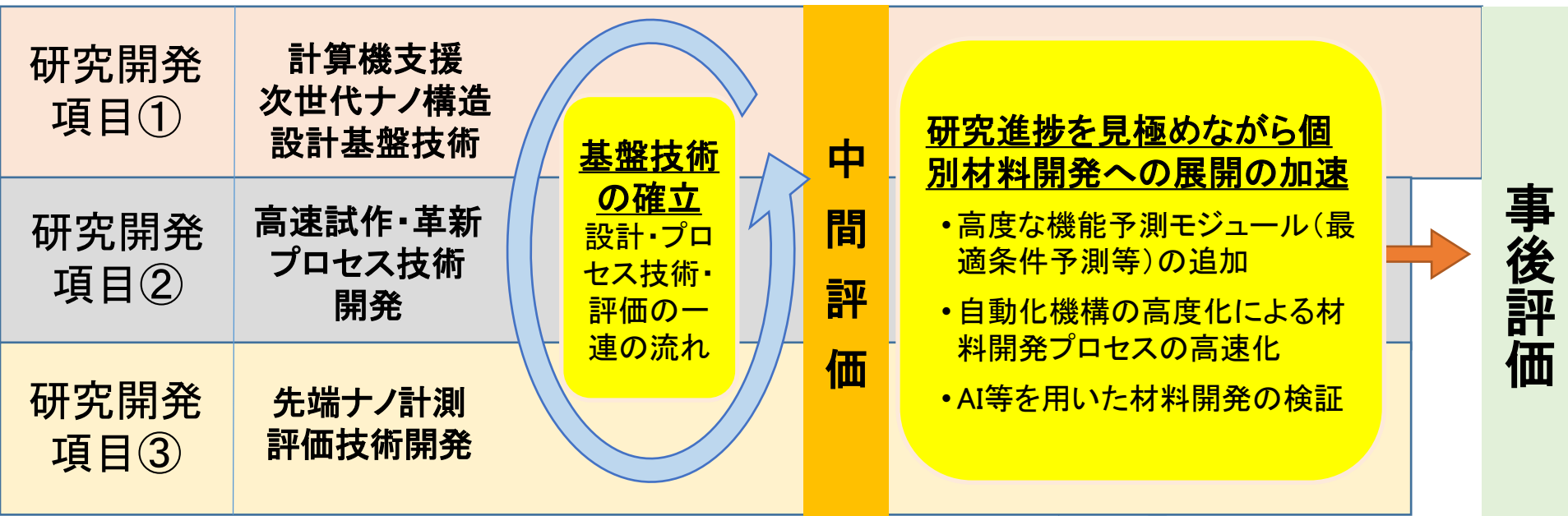


個別技術の開発

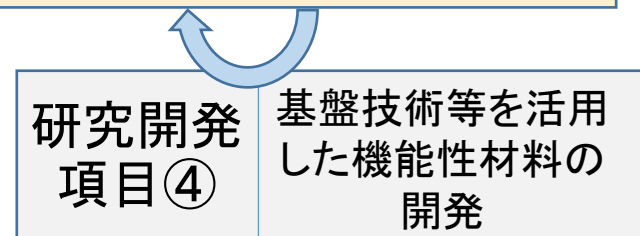
モデル材料等を利用した
一連の流れの確立

基盤技術システムの高度化、および
革新的機能性材料の自動創製

<委託事業>



<助成事業>



◆ 研究開発項目毎の中間評価時の達成状況

研究開発項目	中間目標	成果	達成度
[1] 計算機支援次世代 ナノ構造設計基盤 技術 (計算科学)	対象となる機能を構造、組成等から導き 出せる新規なマルチスケール計算シミュ レータを構築する	<ul style="list-style-type: none"> ・9種の(機能別)順方向予測マルチス ケールシミュレータの公開 ・AI環境の整備 ・触媒インフォマティクスによる逆方向予 測実現に向けて先駆的な成果 	◎ (計画を前倒 してAI活用を 実施)
[2] 高速試作・革新 プロセス技術開発 (プロセス)	研究開発項目[1]で開発するシミュレータ の高精度化に貢献するために、 <u>シミュレー ション結果に対応するサンプルを精密に 作製可能なプロセス手法を確立する</u>	<ul style="list-style-type: none"> ・粒径制御したナノ粒子の短時間合成に 成功 ・ポリマーナノコンポジット/微細発泡体の 連続製造試作装置の開発 ・反応機構と触媒活性種の解明 	○
[3] 先端ナノ計測評価 技術開発 (先端計測)	研究開発項目[1]で開発するシミュレーショ ンの高精度化に必要な計測手法として、 <u>研究開発項目[2]で試作されるサンプル等 を“非破壊”又は“in situ”で評価を可能と する計測手法を確立する</u>	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノ粒子の個々の相変化の測定に成功 ・難計測材料(ポリイミド)の空孔評価に成 功 ・微細発泡体構造のマルチスケール解析 を実現 	○

◎ 大きく上回って達成、○達成、△達成見込み、×未達

◆ 研究開発項目毎の最終目標に対する達成状況

研究開発項目	最終目標	成果	達成度
[1] 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術(計算科学)	構築した新規マルチスケール計算シミュレーターを活用する事により、AI(機械学習やデータマイニング等)を活用した材料探索手法を確立する。これにより従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。	<ul style="list-style-type: none"> マルチスケール計算シミュレーター群および機械学習・データ科学ソフトウェアを開発 プロジェクト成果を集約し、データレポジトリを収納・運用するためのデータプラットフォーム群を構築 プロジェクト成果をモデル素材群に活用し、その全てに対して試作回数・開発期間が従来の概ね1/20以下となる事を確認 <u>秘匿ニーズと共用ニーズの矛盾を解決する情報技術を開発し、データプラットフォームに備えるといった当初の計画を超えた成果をあげた</u> 	◎
[2] 高速試作・革新プロセス技術開発(プロセス)	中間目標までに開発したプロセス手法について高速化を図り、従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。	<ul style="list-style-type: none"> 精密プロセスおよびハイスループット装置活用技術を開発 開発プロセス技術と機械学習とを組み合わせ、試作回数・開発期間を概ね1/20の短縮に貢献 	○
[3] 先端ナノ計測評価技術開発(先端計測)	中間目標までに開発した計測手法を汎用化するとともに、計測時間の高速化等の手法で従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間1/20の短縮に貢献する。	<ul style="list-style-type: none"> マルチスケールで測定できる計測機器群や、構造と物性の相関が測定可能な計測機器群を開発 “非破壊計測”、“In situ計測”の実現、計測の高速化も達成 これらの結果を[1]計算科学、[2]プロセスにフィードバックすることにより、「試作回数・開発期間の従来の1/20以下」に貢献 	○

◆プロジェクトとしての達成状況と成果の意義

<達成状況>

- [1] 計算科学、[2] プロセス及び[3] 先端計測の各研究開発項目において、材料設計基盤の構築を行い当初の目標を達成
- 個別材料開発課題においては、従来の材料開発と比較して試作回数・開発期間の1/20の短縮を達成
- 国内素材産業の優位性を確保するため、プロジェクト成果の実用化に向けてコンソーシアム等を設立



<成果の意義>

- データ駆動型材料開発の普及により、プロジェクト終了後の国内素材産業の国際競争力の大幅な強化に寄与

◆研究開発項目と事業内容一覧

[1] 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術(計算科学)

- ① キャリア輸送マルチスケール計算シミュレータ
- ② 外場応答材料と複雑組織材料の大規模計算シミュレータ
- ③ 機能性ナノ高分子材料のマルチスケール計算プロセスシミュレータ
- ④ マルチスケール反応流体シミュレータ
- ⑤ 深層学習・機械学習(AI)、離散幾何解析

[2] 高速試作・革新プロセス技術開発(プロセス)

- ⑥ 自在なヘテロ接合素材の開発(ナノ粒子合成)
- ⑦ ポリマー系コンポジット材料プロセス(ブレンド・発泡)
- ⑧ 自在合成を可能にするフローリアクター(ハイスループット)
- ⑨ ナノカーボン材料プロセス

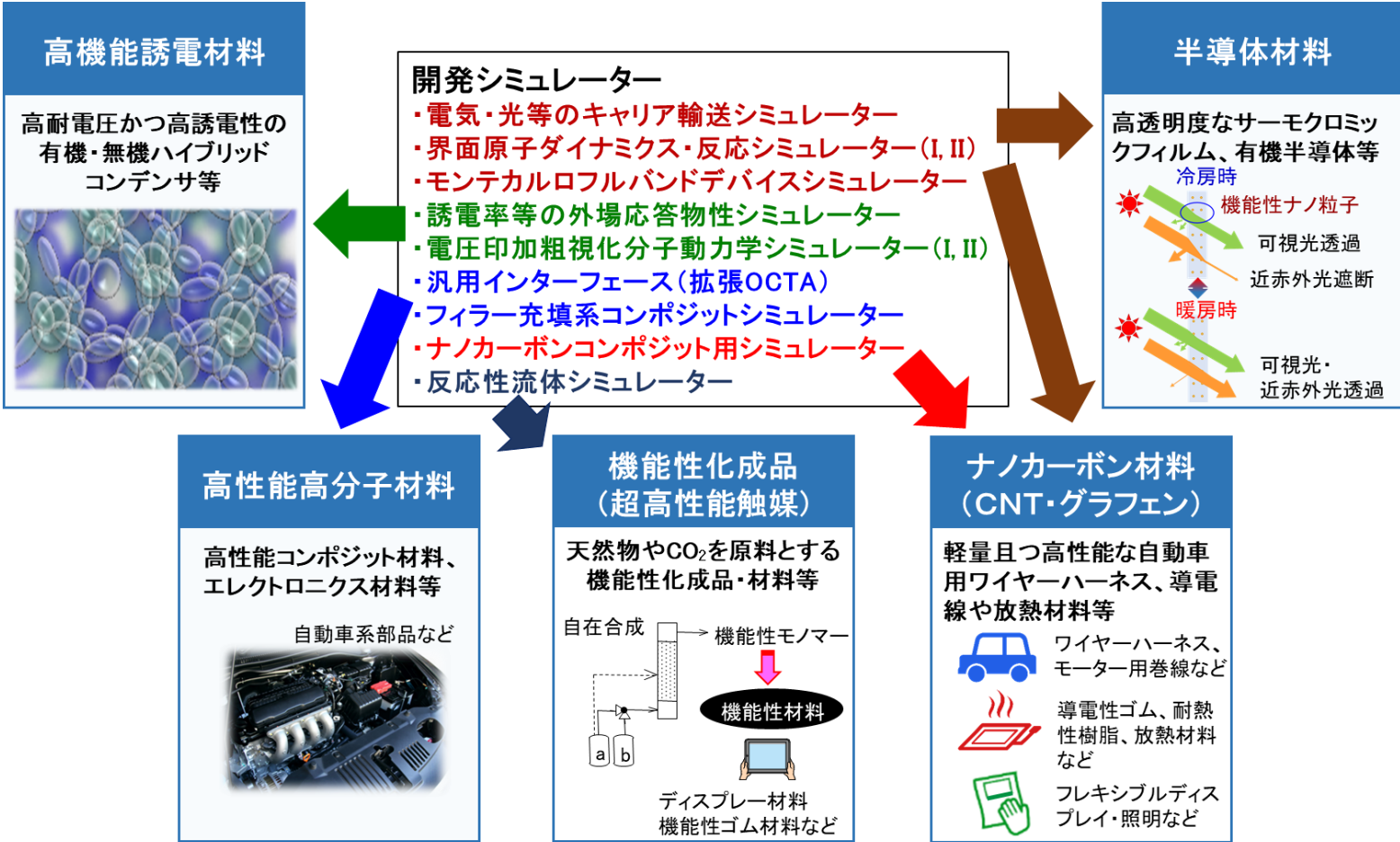
[3] 先端ナノ計測評価技術開発(先端計測)

- ⑩ 表面・界面構造計測/ナノ領域多物性評価(和周波/ナノプローブ分光)
- ⑪ 有機(無機)コンポジット材料3次元構造解析(TEM、陽電子消滅、X線CT)
- ⑫ フロープロセスの高感度 In Situ 計測(XAFS、NMR)
- ⑬ ナノカーボン材料の構造・特性評価

◆各個別テーマの成果と意義:[1] 計算科学

<順方向予測に向けた成果>

▪ 広範な時空間スケール、多様な材料・機能に対応したシミュレータ群を開発し順方向予測を加速。同時にオープン戦略により成果の普及を実現



◆各個別テーマの成果と意義:[1] 計算科学

<データプラットフォーム(DPF)の構築>

・プロジェクトにより得られた材料データをDPFとして整備。プロジェクト内での活用と同時に、実用化に向けた運用体制を整備

目的別に整備された5つのDPF

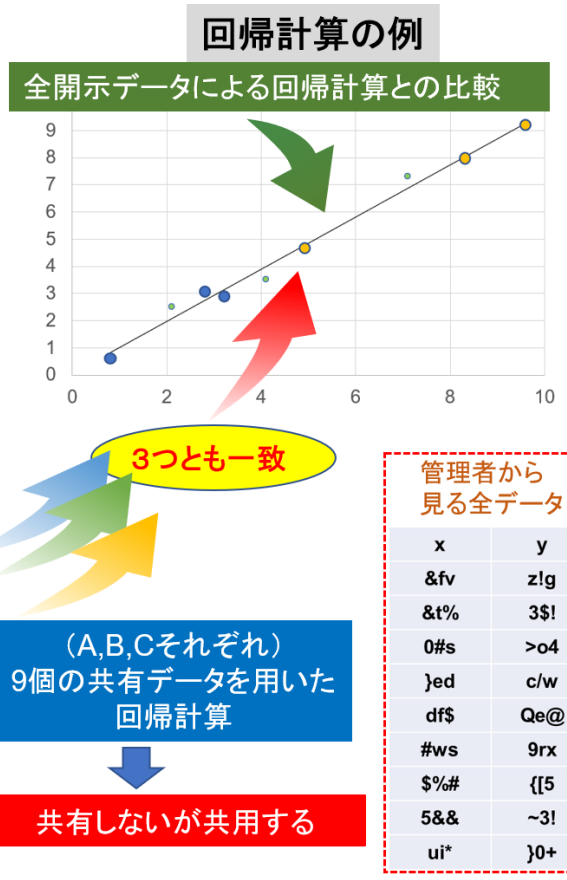
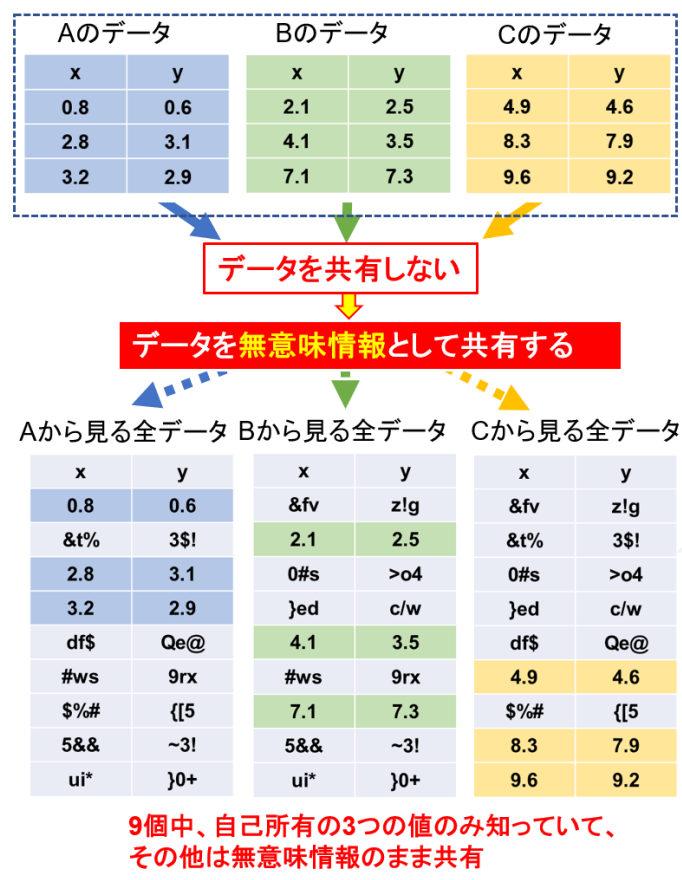
- ◆ **光機能性微粒子DPF**
調光材料、インク、医療分野イメージング、屈折率制御フィルター、感光材料 など
- ◆ **配線／半導体材料DPF**
電線材、フレキシブルデバイス、メモリ など
- ◆ **電子部品材料DPF**
フレキシブル回路基板材料、キャパシタ、高周波対応通信機器 など
- ◆ **機能性高分子DPF**
ゴム材料、放熱／断熱材料、アクチュエーター、微多孔膜 など
- ◆ **触媒DPF**
固体高分子形燃料電池用触媒、バイオマスを原料とする機能性化合物、CO₂の化学原料化 など



◆各個別テーマの成果と意義:[1] 計算科学

<秘匿共用技術の開発>

回帰計算に対する秘匿共用技術を開発

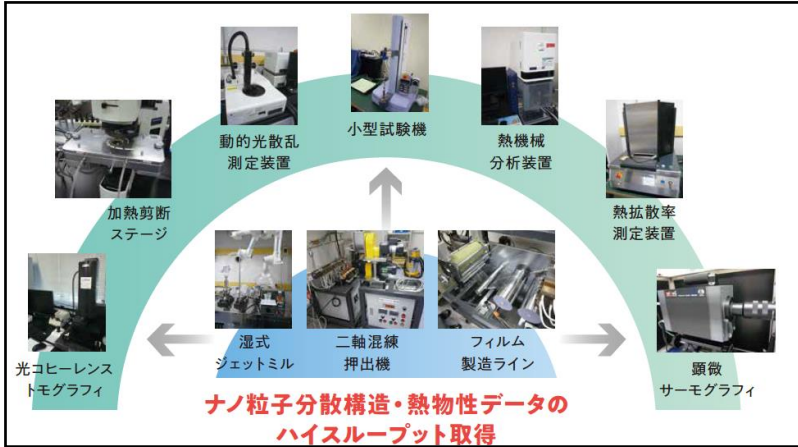


- ✓ AI 活用にはビッグデータが必要。1社のデータのみでは難しい：共用（≠共有）が必要
- ✓ 企業にとって材料データは他社に見せたくない：秘匿が必要
- ✓ データ駆動型材料設計の企業普及には相反する秘匿ニーズと共用ニーズを解決する技術が必要

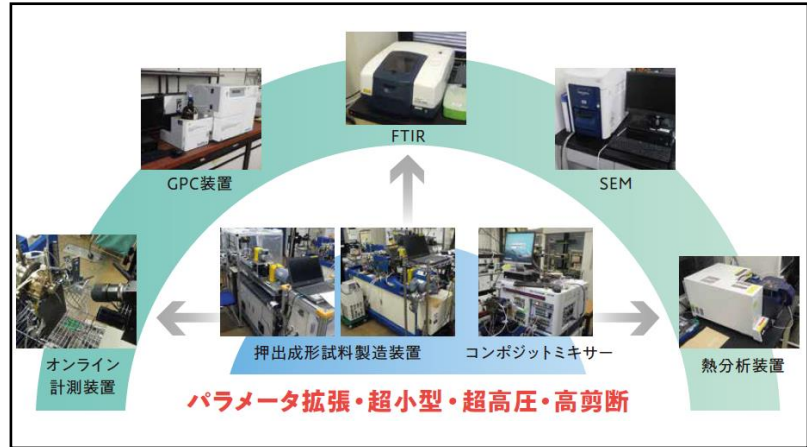
◆各個別テーマの成果と意義: [2] プロセス

- 4つの代表的なプロセスにおいて、ハイスループット試作、評価系を整備しデータ生成、集約システムを構築した

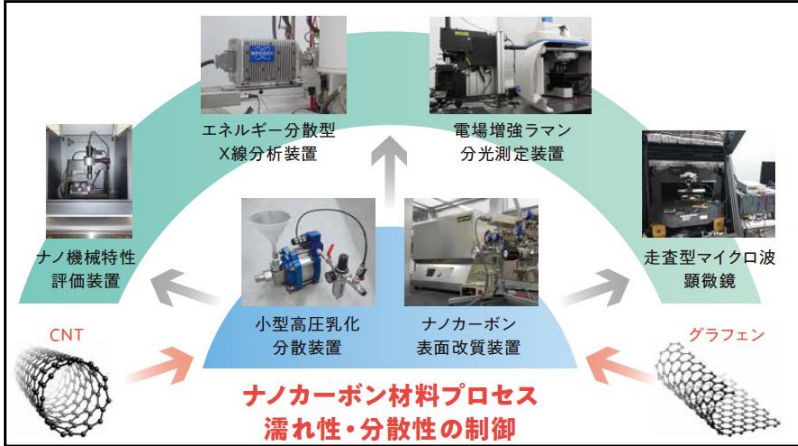
ナノ粒子分散ポリマー



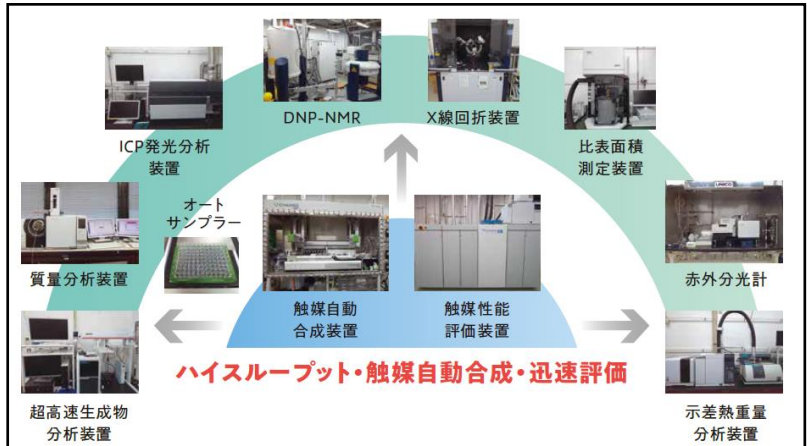
混練・発泡



ナノカーボン材料

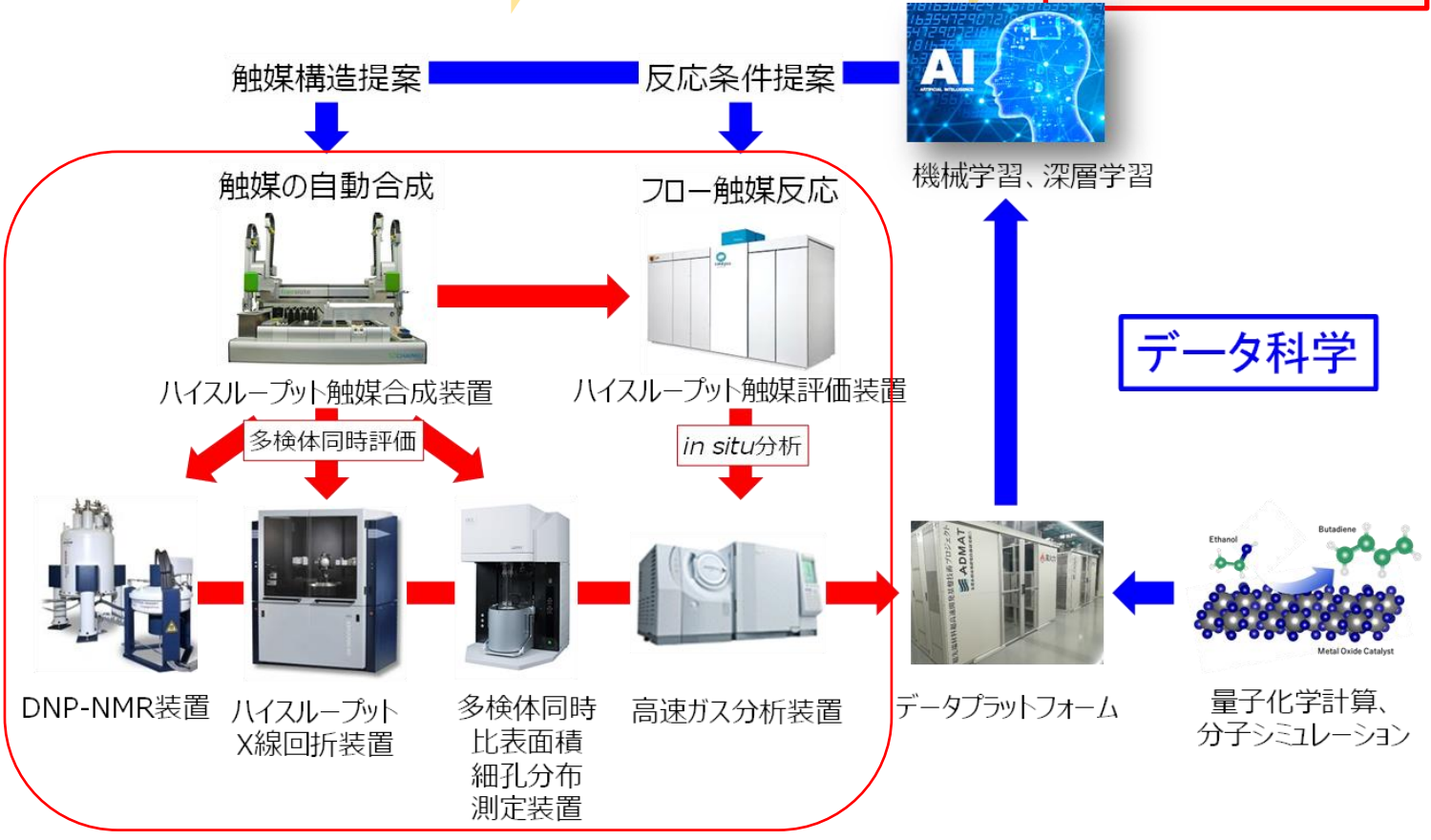
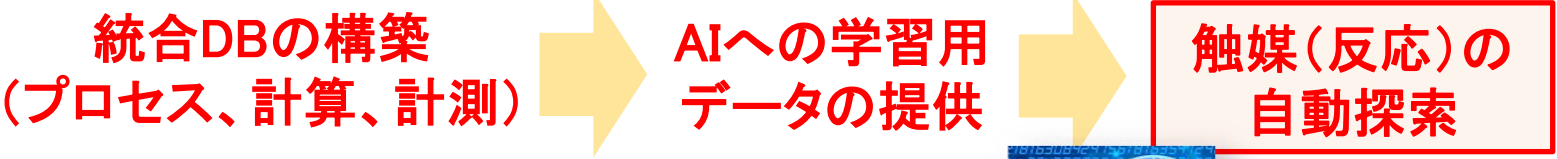


触媒



◆各個別テーマの成果と意義: [2] プロセス

- 触媒ハイスループットシステムと[1]計算科学(データ科学)との連携の事例



ハイスループットシステム

◆各個別テーマの成果と意義: [3] 先端計測

- 陽電子消滅法により、難計測材料(ポリイミド)の空孔評価に成功
- STEM-EELSにより、高分子不均一系の相構造、界面の高感度分析、構成元素の化学状態識別を可能にした
- XAFS測定により、金属ナノ粒子のフロー合成条件下での粒子の成長過程のその場観察を可能にした
- 共振器法により、ポスト5 G・6 G用途高周波材料開発に向け誘電体基板の温度特性を計測する技術を確立した

マルチスケール構造・組成解析

DNP-NMR



陽電子消滅法



電子分光型
電子顕微鏡



EDS軽元素
イメージング



X線CT



In-situ計測

ナノプローブ分光



和周波分光



構造・機能相関計測

◆各個別テーマの成果と意義: [3] 先端計測

• 先端計測基盤技術の位置づけ

局所構造・物性

- ・サンプル内のミクロ情報
- ・汎用計測では”見えない”情報
- ・組成・構造と物性(機能)の相関
→ 機能発現メカニズム

先端ナノ計測機器群

マルチスケール構造・組成解析

DNP-NMR

陽電子消滅法

電子分光型電子顕微鏡

EDS軽元素イメージング

X線CT

In-situ計測

ナノプローブ分光

和周波分光

構造・機能相関計測

データプラットフォーム

作製指針

プロセス情報

ハイスループットプロセス装置群

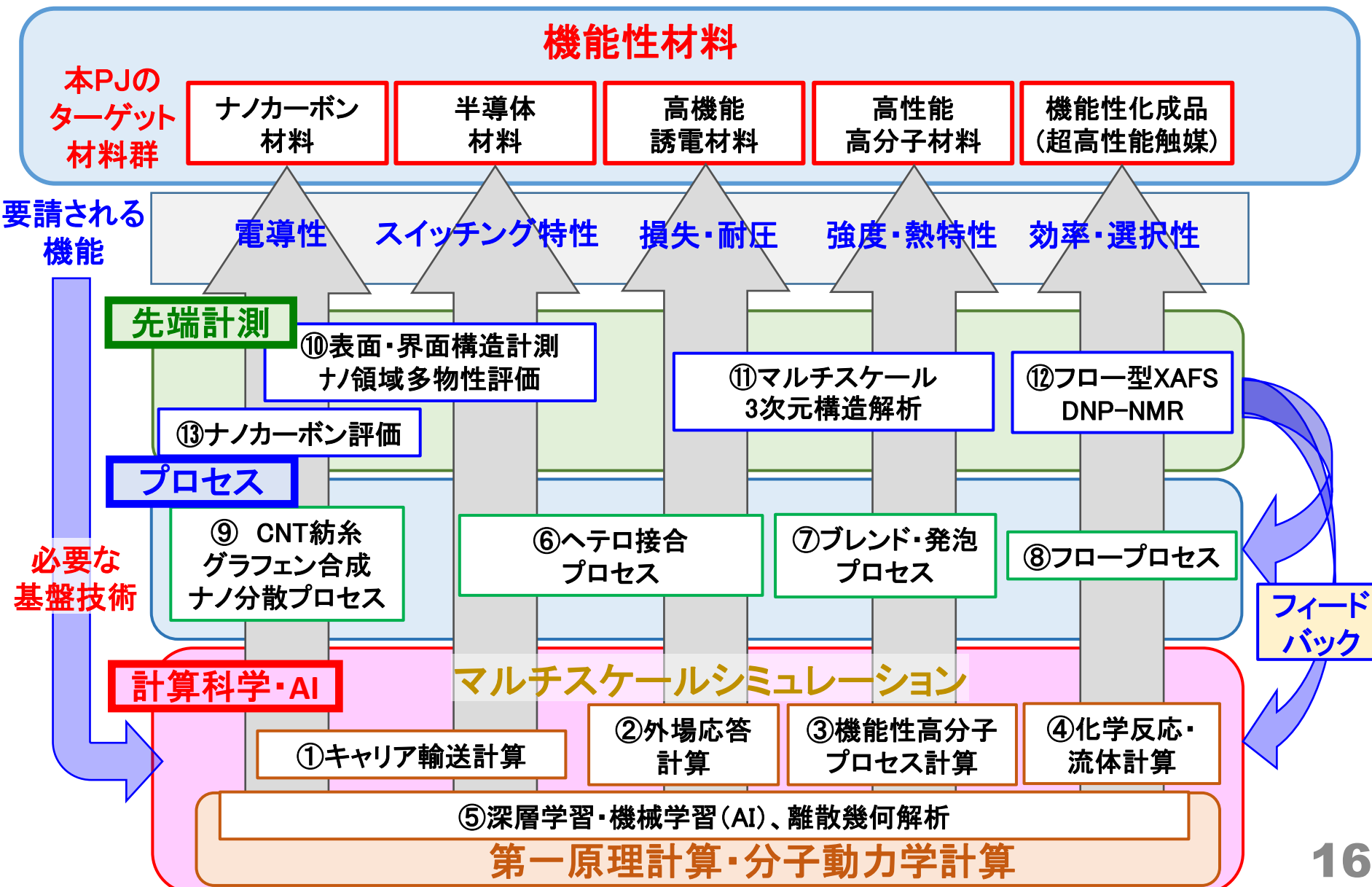
試作サンプル

構造・物性
(おもに平均的情報)

ハイスループット
(汎用)計測機器群

連携
役割分担

◆ 基盤技術の活用による機能性材料の開発スキームの構築



◆ 超超PJ成果で開発加速が想定される製品群

半導体材料

高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等

冷房時
可視光透過率>70%
近赤外光は遮断
機能性ナノ粒子

暖房時
可視光・近赤外光とも透過
機能性ナノ粒子

高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等

高性能高分子材料

高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等 自動車系部品など

機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等

フローリアクターによる自在合成 → 機能性モノマー → 機能性材料

ディスプレイ材料
機能性ゴム材料など

ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等

- 自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など
- 導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など
- フレキシブルディスプレイ・照明など

3. 研究開発成果

(1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

◆ 参画企業および産総研の個別材料開発課題と事業内容との関連

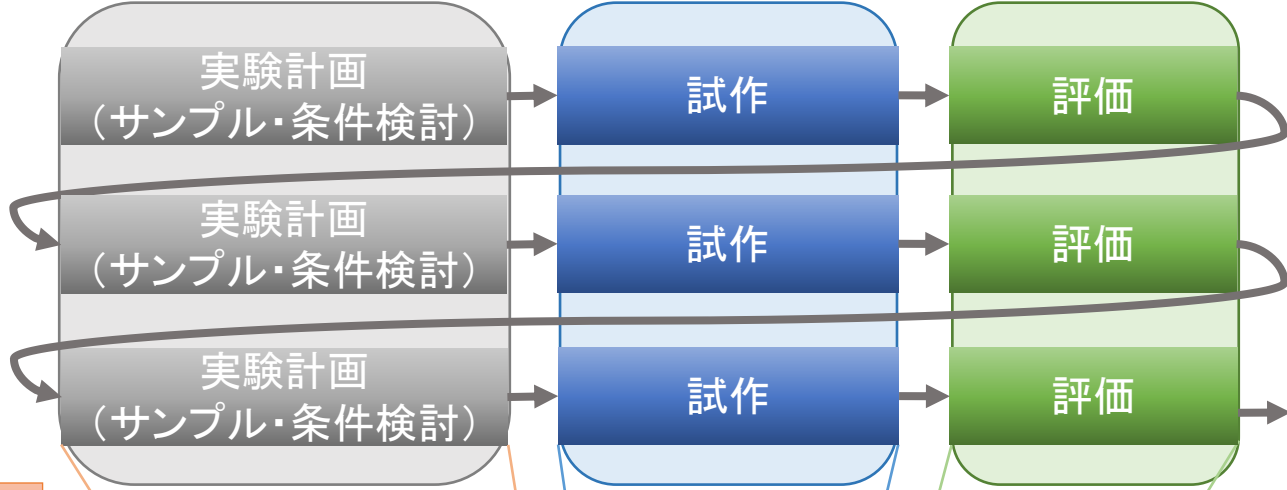
研究開発テーマ名	企業名	担当事業内容番号
(1) 半導体材料		
1 高機能光学材料の研究開発	コニカミノルタ	①、⑥
2 有機半導体材料の研究開発	東ソー	①、⑩
(2) 高機能誘電材料		
3 高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発	日鉄ケミカル&マテリアル	②、⑪
4 電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発	パナソニック	②、③
5 有機・無機ハイブリッド誘電材料の研究開発	村田製作所	②
(3) 高性能高分子材料		
6 複合系の反応設計の研究開発	出光興産	①、⑩
7 樹脂／無機フィラー複合材料の研究開発	カネカ	③、⑥
8 機能性合成ゴム材料の研究開発	JSR	③、⑪
9 フレキシブル透明フィルム(熱硬化性樹脂)の研究開発	昭和電工	⑤、⑧
10 ナノ発泡断熱材料の研究開発	積水化成品工業	③、⑦、⑪
11 スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発	DIC	⑦、⑪
12 革新分離材料の研究開発	東レ	③
13 異方性導電性フィルムの研究開発	昭和電工マテリアルズ	⑤
(4) 機能性化成品(超高性能触媒)		
14 多次元高度構造制御金属ナノ触媒の研究開発	宇部興産	④、⑧、⑫
15 CO ₂ を利用する有用化学品合成技術の研究開発	日本触媒	④、⑧、⑫
16 天然資源からゴム材料の研究開発	横浜ゴム	④、⑧、⑫
(5) ナノカーボン材料		
17 CNT複合材料の開発	日本ゼオン	③、⑨、⑬
18 CNT線材の開発	古河電気工業	①、⑨、⑬
19 大面積グラフェン高速合成および積層技術の基盤開発	産総研	①、⑨、⑬

黄色枠は、非公開セッションでの説明テーマ

◆ 個別材料開発課題の目標: 試作回数・開発期間の1/20の短縮

従来の材料開発

- 数多くの条件検討、試行錯誤の繰り返し
- 長時間の試作・評価



超超プロの目標

計算・AIによる
絞り込み

試作・評価のハイ
スループット化



3. 研究開発成果 (1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

◆ 個別材料開発課題の目標：試作回数・開発期間の1/20の短縮の成果

研究開発テーマ名	成果	達成度	期間短縮
(1) 半導体材料			
1 高機能光学材料の研究開発	・サーモクロミックフィルムにて近赤外線の制御幅60%を実現 ・銀ナノ粒子の高速試作と、粒子分散材料の光学特性制御に成功	○	1/18～1/20
2 有機半導体材料の研究開発	分子構造から結晶構造、有効質量を予測するスキームを確立し、開発期間を短縮	○	1/29
(2) 高機能誘電材料			
3 高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発	計算科学&機械学習を活用した低誘電材料の開発スキームを実証し開発期間1/20を達成した	◎	1/20
4 電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発	粗視化MDからFEMまでのマルチスケールSimで力学特性データを蓄積、サロゲートモデル化による高速スクリーニング手法を構築	○	1/19
5 有機・無機ハイブリッド誘電材料の研究開発	有機および有機・無機ハイブリッド材料に関して、誘電特性を評価するシミュレーション技術とデータ生成から候補材料の絞り込みまでを自動で行うシステムを開発し、高誘電率材料候補の絞り込みに成功した	◎	1/20
(3) 高性能高分子材料			
6 複合系の反応設計の研究開発	シミュレータで添加剤の挙動が明確になり、特性を説明する妥当な記述子の選択が可能になった	◎	1/25
7 樹脂/無機フィラー複合材料の研究開発	材料・プロセス条件-フィラー分散構造-材料特性の三者の相関解明に基づいた材料開発の有効性を実証した	◎	資料非公開
8 機能性合成ゴム材料の研究開発	・機能性合成ゴム材料についてシミュレーションを用いた順方向予測技術を開発した ・本技術による候補材料の絞り込みにより最大で1/19の開発時間短縮を見込む	◎	1/19
9 フレキシブル透明フィルム(熱硬化性樹脂)の研究開発	AI予測モデルの構築、固定化触媒の開発により開発期間を1/27に短縮可能であることを実証した	◎	1/27

3. 研究開発成果 (1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

◆ 個別材料開発課題の目標：試作回数・開発期間の1/20の短縮の成果(つづき)

研究開発テーマ名	成果	達成度	期間短縮
(3) 高性能高分子材料(つづき)			
10 ナノ発泡断熱材料の研究開発	計算による気泡核剤の最適化と超高压プロセスにより、ナノ発泡材料の試作高速化に繋がった	○	資料非公開
11 スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発	オンライン/オンサイト計測で取得したプロセスと物性データを機械学習に取り入れた開発スキームを構築し、開発期間の短縮とモデル材の耐衝撃性目標値を達成した	◎	1/8~1/32
12 革新分離材料の研究開発	分離膜の設計期間短縮に資するシミュレーション技術構築に成功	◎	1/20
13 異方性導電性フィルムの研究開発	シミュレーションデータベースを活用した複数目的に対する逆解析手法を開発した	○	資料非公開
(4) 機能性化成品(超高性能触媒)			
14 多次元高度構造制御金属ナノ触媒の研究開発	ハイスループットフロー合成装置を開発し、既存のバッチ法に匹敵する活性を有するPdコアPtシェル触媒の連続合成に成功した。さらに、新規コアシェル触媒発見のためのMI予測モデルを構築した	◎	資料非公開
15 CO2を利用する有用化学品合成技術の研究開発	計算-計測-プロセスの協働でモデル反応の反応機構を解明し、得られた設計指針を基に、添加剤不要なアルケンのヒドロキシカルボニル化によるカルボン酸合成反応を新規に構築した。環境調和性の高いフロー合成プロセスの実現につながる触媒反応の構築に短期間で達成した	○	資料非公開
16 天然資源からゴム材料の研究開発	・ハイスループット装置群やデータ科学活用により従来の1/22の期間で、世界最高活性のエタノールからのブタジエン合成用触媒開発に成功 ・開発触媒により合成のバイオブタジエンからゴムを合成、タイヤを試作	◎	1/22
(5) ナノカーボン材料			
17 CNT複合材料の開発	CNT複合材作製プロセスを確立し、機械学習による物性予測・逆問題解決を可能とした	◎	1/85
18 CNT線材の開発	計算による予測や線材の網羅的解析により導電性に重要な構造因子を把握し、導電性向上の指針を示した	○	1/20.1
19 大面積グラフェン高速合成および積層技術の基盤開発	グラフェンの高スループット連続合成、h-BNの大面積合成、グラフェン高移動度、MoS2の大面積合成、開発期間1/20短縮	◎	1/20

3. 研究開発成果 (1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

◆ 試作回数・開発期間短縮の成果事例(非公開部にて詳細説明)

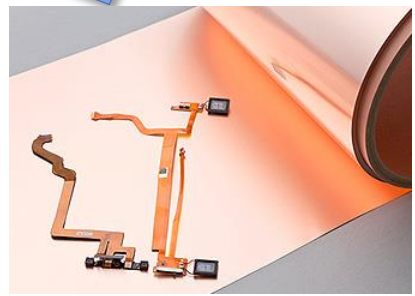
複数の要求特性を満たすフレキシブル透明フィルム開発の実験回数を大幅低減



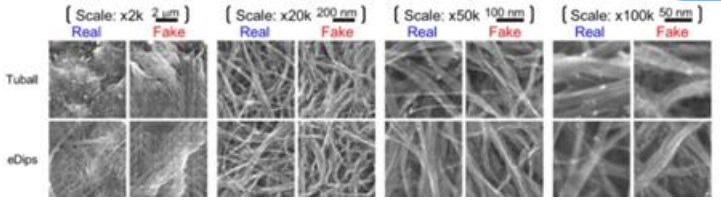
高速探索により開発された高活性ブタジエン合成触媒により、バイオマス由来のブタジエンゴムでタイヤを試作



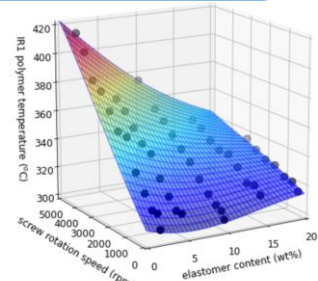
5G,6G向け高周波対応フレキシブル誘電材料の分子設計を仮想スクリーニングにより高速化



仮想実験によるキャパシタ用途CNT不織布の高速特性予測



プロセス・計測の高速化と機械学習による絞り込みにより、自動車用途ポリマーブレンドの衝撃強度向上を実現



分散インク用途、銀ナノ粒子分散液の光学特性制御と高速試作

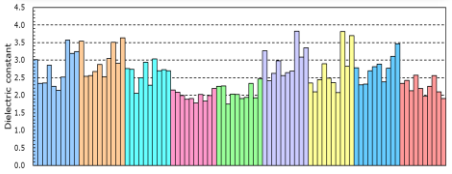


◆ 集中研方式によるシナジー効果の事例

5G,6G向け高周波対応フレキシブル誘電材料の分子設計
 — 企業課題における産総研、企業間、再委託(東京大学、統計数理研)連携 —

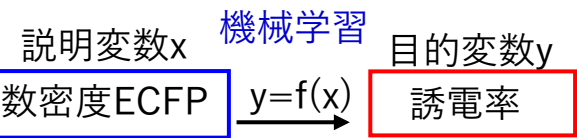
OpenMXによる誘電率計算

東京大学、産総研



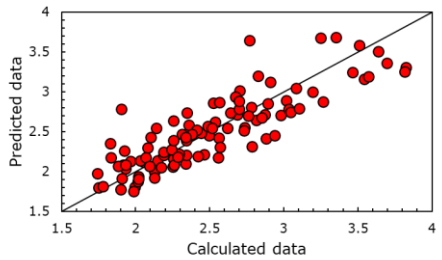
- 多機関の連携により初めて高度な絞り込みを可能にした
- 特に企業間連携は集中研方式により実現された

教師データ
820構造



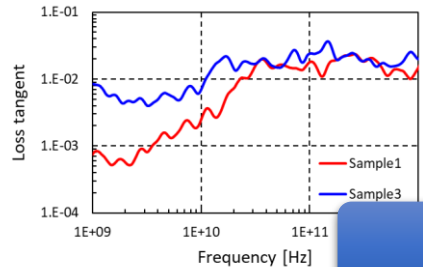
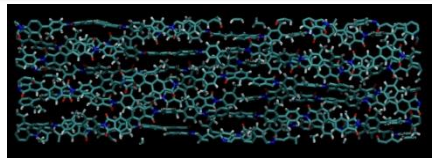
企業間連携

誘電率の回帰モデルの構築



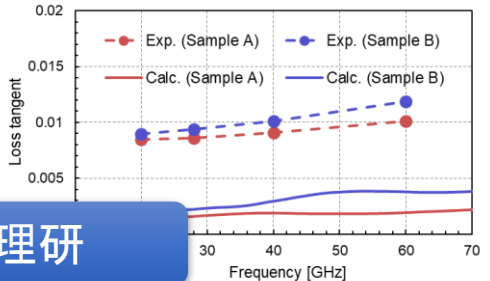
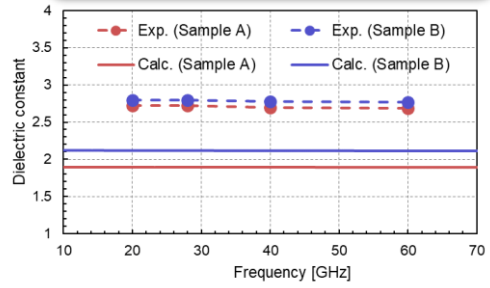
分子動力学シミュレーションによる誘電正接計算

産総研、企業間連携



試作・評価 2構造

産総研



8構造

統計数理研

◆ 成果の普及

	2016	2017	2018	2019	2020	2021	計
プレスリリース・ 報道等	1	3	3	5	3	10	25
論文	2	14	23	24	43	51	157
研究発表・講演	18	59	119	112	68	83	459
イベント出展		2	3	2	2	2	11
受賞実績				3	1	2	6

2022年3月31日時点の集計値

3. 研究開発成果 (2) 成果の普及

◆プレスリリース・報道等

番号	タイトル	掲載誌名	発表年月
1	計算・プロセス・計測による三位一体の研究開発体制の構築により「経験と勘」に頼らない機能性新材料の研究を加速	プレスリリース	2016/9/9
2	超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト様 事例ページ	HPE社Web	2017/8/23
3	先端素材超高速開発技術研究組合が1,024ノードのスーパーコンピューターを「高火力コンピューティング」から利用	さくらインターネットWeb	2017/9/1
4	人工知能(AI)で触媒反応の州立を予測ーキャタリストインフォマティクスで触媒の発見に道ー	プレスリリース	2018/1/31
5	技術で未来拓く50 次世代の「当たり前」実現	日刊工業新聞	2018/10/18
6	ナノ粒子でプラスチックの発泡を微細で均質にする方法を開発ー計算・プロセス・計測の三位一体の技術で発泡材料の開発が加速ー	プレスリリース	2018/11/26
7	人工知能(AI)を用いてポリマー設計・検証サイクルの試行回数を大幅低減	プレスリリース	2018/11/27
8	革新的機能性材料開発のためのマルチスケールシミュレータ群を開発ー国内産業による材料開発期間の短縮を目指して開発したシミュレータ群を公開ー	プレスリリース	2019/4/1
9	バイオエタノールからブタジエンを生成する世界最高の生産性を有する触媒システムを短期間で開発	プレスリリース	2019/7/22
10	マイクロ波加熱による機能性酸化ナノ粒子の高速合成法を開発ー迅速試作により機能性ナノ粒子の開発期間短縮に貢献ー	プレスリリース	2019/10/15
11	カーボンナノチューブ表面官能基の均一性をバンドル構造レベルで可視化する技術を開発	プレスリリース	2019/11/5
12	石油化学新聞社による東レR&Dに関する取材	石油化学新聞社	2019/5/21
13	人工知能(AI)の活用によりフレキシブル透明フィルム開発の迅速化を実証	プレスリリース	2020/4/13
14	合成化学者のための固体DNP-NMR	Chem-station	2020/7/9
15	ソフトアクチュエーターに必要な大変形材料の開発を加速	プレスリリース	2020/9/16
16	計算シミュレーションとAIを連携し、仮想実験環境の構築	プレスリリース	2021/4/27
17	カーボンリサイクル社会を実現する化学品原料(カルボン酸)合成技術を開発	プレスリリース	2021/6/18
18	バイオマス由来のブタジエンゴムでタイヤを試作ー持続可能な原料調達でCO2削減を促進ー	プレスリリース	2021/8/10
19	固体表面上の酸素原子を高分解能2次元NMRで測定する技術を開発ーDNP-NMRで高速・高分解能測定を実現、材料開発期間を大幅短縮ー	プレスリリース	2021/8/19
20	AIが生成した材料の構造画像を用い、物性を予測する技術を開発ー材料の選定から加工・評価までを高速・高精度に再現、材料開発を加速ー	プレスリリース	2021/8/30
21	ポスト5 G・6 Gの材料開発に向け、誘電体基板の温度特性を計測する技術を確立ー幅広い温度域での低損失化が要求されるミリ波帯材料の開発に貢献ー	プレスリリース	2021/8/31
22	ペトロテック座談会 「New Normal(新しい生活様式)の下での研究開発のアプローチ」	石油学会誌「ペトロテック」第44巻(2021年)9月号pp.586-596	2021/9/1
23	液晶がナノ構造をつくる際の新現象を発見ー分子が集まる動きをAIが見分ける技術で高機能材料の創製に臨むー	プレスリリース	2021/9/10
24	連続・自動合成法でPEFC向け高性能触媒の合成に成功、高効率合成も実現ー燃料電池の白金コスト大幅低減を目指すー	プレスリリース	2021/11/15
25	データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアムの設立に向けてー高度なデータ解析技術が拓く新たな材料開発の世界へー	プレスリリース	2021/11/25

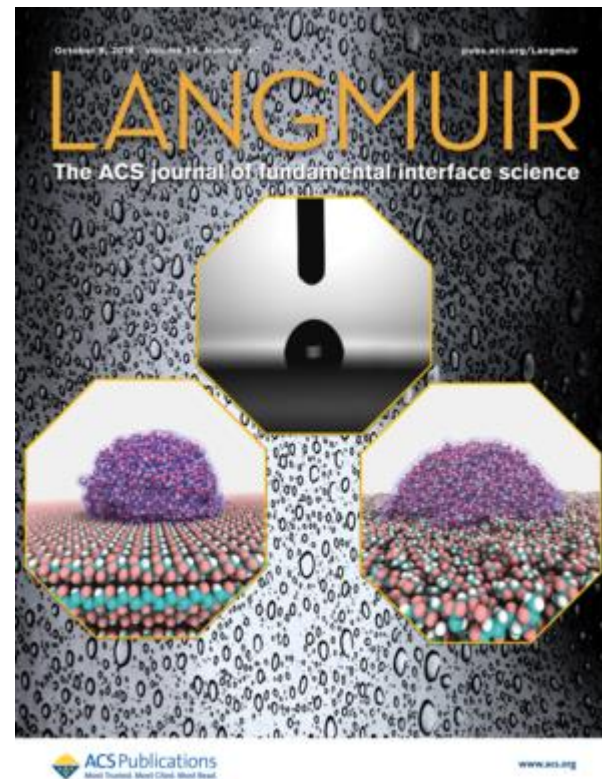
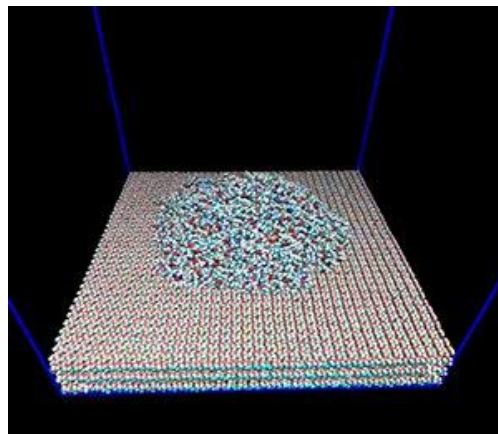
◆ 展示会出展等

番号	月日	場所	内容
1	2017/12/8	産総研(つくば)	DNP-NMRワークショップ
2	2018/2/14-16	東京ビックサイト	ナノテク展:出展及びワークショップ
3	2018/10/23-26	タウンホール船堀	CSJ化学フェスタ:出展
4	2019/10/15	東京ビッグサイト	CSJ化学フェスタ
5	2019/1/30-2/1	東京ビックサイト	ナノテク展:出展
6	2019/12/18	グランフロント大阪ナレッジキャピタル タルコングレコンベンションセンター	NEDOフェスタin関西2019
7	2020/1/29	東京ビッグサイト	nano tech 2020
8	2020/10/21	オンライン	第10回CSJ化学フェスタ2020 産学官R&D紹介企画
9	2020/12/9-11	東京ビックサイトーオンラインハイブリッド開催	nano tech 2021 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議
10	2021/5/26-5/28	オンライン	第70回高分子学会産学コミュニケーションセッション
11	2022/1/26	東京ビッグサイト東ホール&会議棟、オンライン、ハイブリッド開催	nano tech 2022 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議

◆受賞事例

2020年度日本化学会 第26回技術進歩賞受賞 (2021.3.23)

先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)研究員、東レ株式会社／北畑雅弘氏が、「分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発」により、公益社団法人日本化学会より「第26回(2020年度)技術進歩賞」を受賞



東レ株式会社ホームページより
<https://cs2.toray.co.jp/news/toray/newsrrs01.nsf/0/2D6DF045566376F1492586A0002165F8?open>

同業績は、アメリカ化学会『LANGMUIR』の表紙を飾る(2018.11.14)

◆ 知的財産権の確保に向けた取組

- NEDO「知財マネジメント基本方針」に準じて、開発拠点への知財集約及びデータ等の取扱いを明記した知財合意書を全参加者で締結し、知財運営委員会の設置による透明性の高い知財管理を図った。
- 主要な9種のシミュレータはじめ計17本のプログラムに対して、権利帰属及びプロジェクト期間中・終了後の利活用方針を策定した。
- 材料組成、製造プロセス、計測手法等に関して39件の特許を出願し、知財の確保を図った。
- プロジェクト取得データ等、知財集約対象となる特定の成果物を集約したデータプラットフォームを構築し、プロジェクト終了後の利活用方針を策定した。

	2016	2017	2018	2019	2020	2021	計
特許 ^{*1*2}		2	10	6	9	12	39
プログラム ^{*3}			3	8	5	1	17

2022年3月31日時点の集計値

*1 内訳：産総研単独(含再委託)17件、企業単独6件、企業－産総研共願16件
 *2 優先権主張出願を行ったものは優先権主張出願年度
 *3 同一プログラムのバージョンアップ版は一件として集計

◆本プロジェクトにおける「実用化」の考え方

本事業における実用化とは、本プロジェクトで開発したマルチスケールシミュレータやAI等の共通基盤技術が適切な管理の下、プロジェクト終了後も持続的にブラッシュアップ出来る運営体制を構築し、国内素材企業の材料開発支援に資することを言う

◆ 実用化に向けた戦略

プロジェクトにおける 実施内容

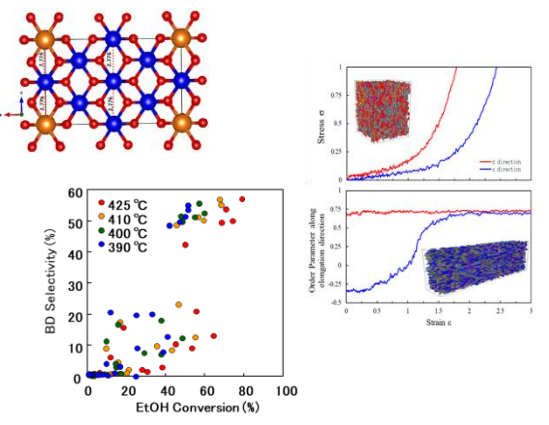
プロジェクト
終了

材料設計基盤の構築

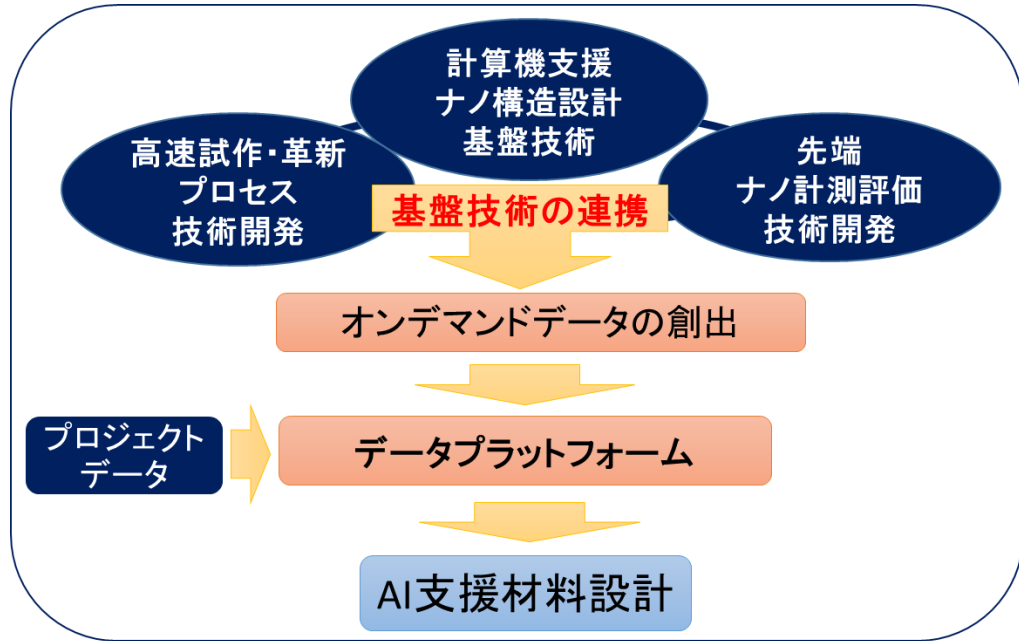


- ・技術
- ・設備
- ・知財
- ・データの集約

個別課題への適用



材料設計プラットフォーム (MDPF) の提供



ニーズ

ソリューション

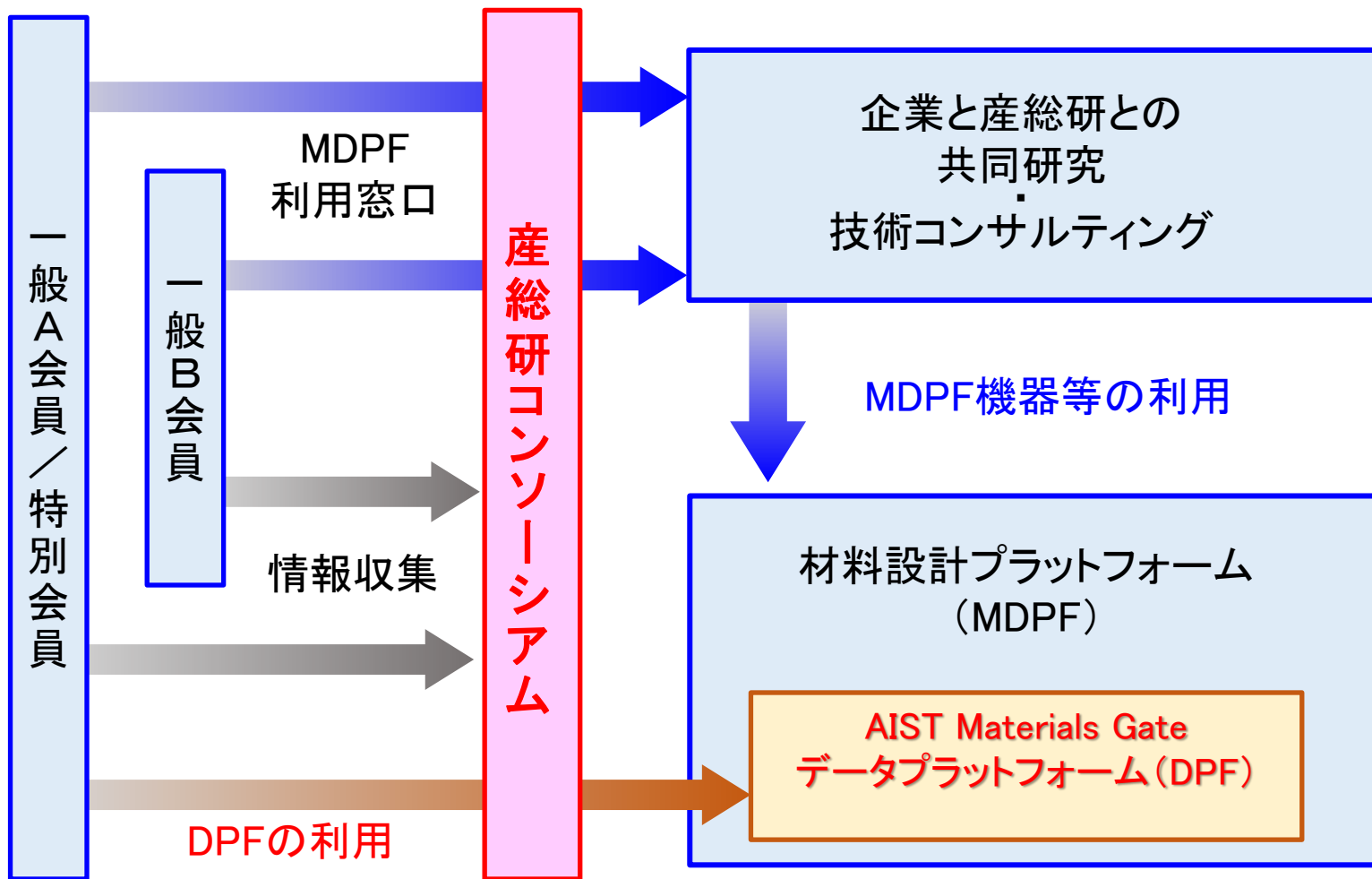


日本産業における
材料開発の加速



◆ 実用化に向けた具体的取組

コンソーシアムを窓口とした、共同研究・技術コンサルティングによりプロジェクト成果物を活用していく



◆データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアムの設立

【概要】

2022年4月1日設立

会長：濱川聡 産総研材料・化学領域 領域長

副会長：浅井美博 産総研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 センター長

幹事：コニカミノルタ(株)、日鉄ケミカル&マテリアル(株)

監事：出光興産(株)

会員数(2022年5月16日時点)

A会員 27社

B会員 2社

特別会員 法人1 機関、個人78名

連携会員(仮称) 法人2 機関、個人5名

【事業内容】

1. セミナー、技術交流会による最新情報の提供
2. 技術コンサルティングの窓口、および共同研究のマッチング
3. データプラットフォーム(DPF)利用と、チュートリアルによる 実習・人材育成
4. 外部データベースのワンストップ利用



◆人材育成:NEDO特別講座

【目的】

超超プロで得られた成果、知見を活用し、以下の活動を通して、データ駆動型材料開発技術の社会実装を拡大・促進する

【期間】

2022年3月－2023年3月

【事業内容】

1. データ駆動型材料設計技術利用推進講座の実施
 1. 基礎講座(受講申込者 約600名)
 2. 個社対応人材育成
 3. 産学官橋渡し人材の育成
2. 人的交流等の展開
 1. ワークショップ、ユーザー交流会等の企画
3. 周辺研究等の実施
 1. データ駆動型材料設計技術の高度化に関する研究
 2. シミュレータ機能拡張、新規データ創出等

The screenshot shows a web browser displaying the NEDO special lecture page. The page title is "NEDOプロジェクトを核とした人材育成、産学連携等の総合的展開 データ駆動型材料設計技術者養成に係る特別講座". The main content area features a large banner with the text "受講生募集中" (Recruiting Students) and a detailed description of the lecture's purpose and content. The page also includes a sidebar with navigation links and a footer with contact information.

産総研 材料・化学領域
NEDOプロジェクトを核とした人材育成、産学連携等の総合的展開
データ駆動型材料設計技術者養成に係る特別講座

ホーム > 産総研について > 材料・化学領域 > NEDO特別講座

受講生募集中

データ駆動型材料開発は、近年のコンピュータや人工知能の発展に伴い、研究開発の加速、新たな機能性材料の開発や試作、開発期間の大幅な短縮等の報告例が増加しており、今後の材料開発の基盤となるものと考えられています。そのため、わが国においてもデータ駆動型材料開発を担う人材の育成は重要となっています。

本特別講座では、有機系機能性材料に関するデータ駆動型材料開発技術の社会実装を拡大・促進するための「場」(拠点)を構築し、実際の素材に関連する高品質なデータや解析ツールを利用した実践的なデータ駆動型材料開発が行え、さらに企業における材料研究への展開、橋渡しの出来る人材を育成します。また、拠点を中心としてアカデミア及び企業等の多方面の人材交流を図る他、特定の材料に限らず、開発されたデータ駆動型材料開発技術の他材料への展開を目的とした周辺研究を実施します。

(NEDOホームページ「NEDOプロジェクトを核とした人材育成、産学連携等の総合的展開/データ駆動型材料設計技術者養成に係る特別講座」事業概要より)

講座実施期間： 2022年3月～2023年3月
 講座日数： 1回/月程度(全11回)

講座内容： データ駆動型材料開発に関する講義(基礎～応用、NEDOプロ成果を 中心に最新の技術動向等)とともに、体験講座ではシミュレーションプログラム等を利用してのデータの創出、AI等を用いたの材料物性予測、などの演習を行います。

募集人員： 定数は設けていません。
 (ただし、演習では制限させていただく場合がございます)

中間評価時コメントへの対応(NEDO評価部のまとめコメント)

指摘事項	アクション
1. 研究開発マネジメント	
各研究テーマにおいて大学や公的研究機関が果たす貢献内容をより明確に示し、集中研による一層のシナジー効果を期待する。	産総研をハブとして大学－企業、国研－企業、企業－企業の連携が生まれました。(p23)
データベースの公共性を鑑みながらデータの公開方法をよく吟味してほしい。	コンソーシアムにおいて共有データとして利活用を進めていきます。(p30-32)
2. 研究開発成果	
成果の普及については、論文、研究発表、展示会への出展は適切であったが、特許出願は、やや少なめであり、今後成果と共に増えることを期待する。	後半期において、個別課題の進捗により特許出願も増加しました(計39件)。(p28)
計算科学、プロセス技術、先端計測技術を相互に連携させながら、個別材料開発において、より高精度で広範囲な対象に適用出来るよう材料設計プラットフォームを継続的に発展させてほしい。	共同研究等による広範な利用が可能な材料設計プラットフォームを構築しました。(p30-32)
3. 成果の実用化・事業化に向けた取組及び見通し	
実用化に向けて具体的な運営体制やマイルストーンを示し、プロジェクト終了後にも国内企業が成果を継続的に利用できる仕組みを作ることが望まれる。	コンソーシアム、材料設計プラットフォームの運用体制を整備しました。(p30-32)
長い目で見た展開を見据え技術育成・人材育成にも取り組んでほしい。	NEDO特別講座による人材育成プログラムを開始しました。(p33)

項目	成果
3. 研究開発成果	
(1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義	<ul style="list-style-type: none"> • 試作回数・開発期間を1/20にするための、計算・プロセス・計測の各基盤技術を構築した • 19の個別材料課題に対して、試作回数・開発期間の1/20を概ね実証した • 当初計画を超えた秘匿計算技術を開発を実施した
(2) 成果の普及	<ul style="list-style-type: none"> • プレスリリース・報道25件、イベント出展11件をはじめ多数の論文、学会発表等により成果の普及を行った
(3) 知的財産権等の確保に向けた取組	<ul style="list-style-type: none"> • オープンクロズの切り分けを議論し、特許出願39件、プログラム17件登録を行い、必要な知的財産権の確保を行った
4. 成果の実用化に向けた取組及び見通し	
(1) 成果の実用化に向けた戦略	<ul style="list-style-type: none"> • 材料設計プラットフォーム構想に基づき、コンソーシアム、共同研究等の成果実用化の体制を整備した
(2) 成果の実用化に向けた具体的取組	<ul style="list-style-type: none"> • データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアムの設立 • 人材育成のためのNEDO特別講座を開始した
(3) 成果の実用化の見通し	<ul style="list-style-type: none"> • コンソーシアムは企業29社およびアカデミア(3法人、個人83名)で活動を開始する • NEDO講座基礎講座に対して約600名の申込者を得る

1. 基盤技術研究開発項目

- 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術（産総研）
- 高速試作・革新プロセス技術開発（産総研）
- 先端ナノ計測評価技術開発（産総研）

2. 個別材料開発課題(一部)

- 高機能光学材料の研究開発（コニカミノルタ）
- 高周波対応フレキシブル誘電材料の研究開発
（日鉄ケミカル&マテリアル）
- AI解析による熱硬化性樹脂フィルムの研究開発(昭和電工)
- スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発(DIC)
- サステナブル資源を用いたゴム材料の研究開発
ーハイスループットシステムとデータ科学の活用ー(横浜ゴム)
- CNT複合材料の開発(日本ゼオン)