

**戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)**  
**統合型材料開発システムによるマテリアル革命**  
**研究開発計画(案)**

**内閣府**

**政策統括官(科学技術・イノベーション担当)**

## 目次

研究開発計画の概要 .....	1
1. 意義・目標等.....	4
2. 研究内容.....	4
3. 実施体制.....	4
4. 知財管理.....	4
5. 評価.....	4
6. 出口戦略.....	4
1. 意義・目標等.....	5
(1) 背景・国内外の状況 .....	5
(2) 意義・政策的な重要性 .....	5
(3) 目標・狙い.....	6
Society5.0 実現に向けて .....	6
社会面の目標 .....	7
産業的目標 .....	7
技術的目標 .....	7
制度面等での目標 .....	7
グローバルベンチマーク.....	7
自治体等との連携 .....	7
2. 研究開発の内容.....	8
3. 実施体制.....	36
(1) 科学技術振興機構の活用 .....	41
(2) 研究責任者の選定 .....	41
(3) 研究体制を最適化する工夫 .....	41
(4) 府省連携 .....	41
(5) 産業界からの貢献.....	41
4. 知財に関する事項 .....	41
(1) 知財委員会.....	41
(2) 知財権に関する取り決め.....	42
(3) バックグラウンド知財権の実施許諾 .....	42
(4) フォアグラウンド知財権の取扱い .....	42
(5) フォアグラウンド知財権の実施許諾 .....	42
(6) フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転の承諾について.....	43
(7) 終了時の知財権取扱いについて .....	43
(8) 国外機関等(外国籍の企業、大学、研究者等)の参加について.....	43
5. 評価に関する事項 .....	43
(1) 評価主体 .....	43

(2) 実施時期 .....	43
(3) 評価項目・評価基準 .....	43
(4) 評価結果の反映方法 .....	44
(5) 結果の公開 .....	44
(6) 自己点検 .....	44
研究責任者による自己点検 .....	44
PDによる自己点検 .....	44
管理法人による自己点検 .....	44
6. 出口戦略 .....	45
(1) 出口指向の研究推進 .....	45
(2) 普及のための方策 .....	45
7. その他重要事項 .....	45
(1) 根拠法令等 .....	45
(2) 弾力的な計画変更 .....	45
(3) PDの履歴 .....	45

## 研究開発計画の概要

### 1. 意義・目標等

我が国が高い競争力を有してきた材料分野において、AIを駆使した材料開発手法の刷新に向けて諸外国で集中投資が行われ、ものづくりが大変革を迎えている。こうした手法が海外で先行して確立されると、我が国がそのための材料提供の役割に甘んじ、プレゼンスを急速に損なう事が危惧される。諸外国との競争を勝ち抜くために、産学官が協働して研究開発を加速することが必要不可欠である。

我が国が開発してきたマテリアルズインテグレーション(MI)の素地を活かし、欲しい性能から材料・プロセスをデザインする「逆問題」に対応した次世代型MIシステムを世界に先駆けて開発するとともに、MIを活用して、競争力ある革新的な高信頼性材料の開発や設計・製造・評価技術の確立に取り組み、発電プラント用材料や生体用材料、航空用材料等を出口に先端的な構造材料・プロセスの事業化を目指す。さらに我が国が蓄積してきた材料データベースの活用や新たなプロセス・評価技術に対応したデータベースの充実を図るなど、サイバーとフィジカルが融合した新たな材料開発による「マテリアル革命」を加速する。

### 2. 研究内容

逆問題に対応したMI基盤技術を確立するとともに、実用材料の開発に対する効果を実証するため、我が国が強みを有し国際的な要求が高まっている最先端の構造材料・プロセス開発にMIを適用する。

### 3. 実施体制

岸輝雄プログラムディレクター(以下「PD」という。)は、研究開発計画の策定及び推進を担う。PDが議長、内閣府が事務局を務め、関係省庁や専門家で構成する推進委員会が総合調整を行う。国立研究開発法人科学技術振興機構運営費交付金を活用して公募を実施する。同法人内に選考委員会を設置し、適切な評価のうえ、推進委員会と連携しながら、研究開発計画に基づき最適な研究課題を臨機応変に選定し、大学、国立研究開発法人、民間企業等によって構成される研究チームを構成し、研究課題を実施する。同法人のマネジメントにより、各課題の進捗を管理する。

### 4. 知財管理

各課題とも事業化を見据えた知財戦略を立てて研究開発に取り組むこととする。知財委員会を国立研究開発法人科学技術振興機構に置き、各受託機関で出願される知的財産の動向を把握・管理するとともに、産業利用の際の利便性向上につながるよう各受託機関と調整を行う。

### 5. 評価

ガバニングボードによる毎年度末の評価前に、PD及び研究主体による自己点検を実施する。研究の推進にはTRL管理を徹底するとともに、3年を目途に研究課題の評価を実施し、必要に応じて研究チームを再編する等により、高い研究開発レベルが維持できるようにする。加えて、情報流出に細心の注意を払いつつ国内外の専門家によるピアレビューを実施する。

### 6. 出口戦略

- ・逆問題に対応する次世代MIシステムの実装・産業界による利用
- ・MIの適用例として産業用発電プラントや航空機機体・エンジン等の最先端材料・プロセスを想定し、材料/重工メーカーと連携して成果を実装

## 1. 意義・目標等

### (1) 背景・国内外の状況

AIを活用した材料開発手法については米国・欧州等の各国で集中投資が行われている。主な取り組みとして、米国 Northwestern 大(Questek)やフィンランド国研 VTT が、欧米企業に対するコンサルティングツールとして、実材料に対応したマルチスケール・マルチフィジックス計算技術の開発でリードしている。他方これらは、一般の民間企業が自ら使える汎用性に乏しく、企業が自ら活用して材料開発に取り組む技術とはなっていない。

我が国では、これまで、国内メーカー各社とともにMIに取り組み、材料分野に強みやノウハウを有するメーカー各社が課題に応じて自ら使える汎用開発支援ツールとして開発を進め、世界に先駆けてプロセスから性能を一貫予測するためのシステムを構築してきた。この素地を活かし、世界で初めての取り組みとして、欲しい性能から実際の材料・プロセスをデザインする逆問題対応型MIの開発に取り組み、それを実際の先端材料・プロセスに適用し開発効率化を実現する。

具体的には、逆問題に対応する次世代型MIシステムを開発・実装し、産業界による利用につなげるとともに、我が国が強みを有する先端的な構造材料やプロセスの開発に活用する。例えば、先端的な構造材料としては、鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金・金属間化合物などの金属系材料に加え、構造材料としての利用が広がっているセラミックス、高分子材料、特に、これらの複合材料を想定する。また、先端的なプロセスとしては、3D 積層造形を中心とした金属粉末を原料とする 3D プロセス技術、複合材料の 3D 造形技術など、対象分野において刷新が起りつつあるプロセス技術を想定する。

### (2) 意義・政策的な重要性

MIを活用し、従来より国際的に高いレベルにある日本の材料科学技術及び素材産業のポテンシャルを最大限に活かした先進材料・プロセス開発を行っていくことが必要である。

例えば航空機産業は、構造材料が目指す比強度、耐熱性、信頼性のいずれも最高レベルが要求される産業分野であり、産業発電用ガスタービン等の環境・エネルギー分野など他産業への波及効果も大きい。特に昨今は、将来の中小型機をはじめとした需要拡大や次世代機の開発も見据え、機体軽量化を実現する複合材料に対し耐火性などの新たな機能や高い設計自由度といった新たな付加価値が国際的に希求されている。

さらに、3D 積層造形をはじめとした新たな粉末プロセス技術は、産業用発電プラント等の複雑形状部材のほか、人工関節等の生体用材料への適用、波及効果やさらなる用途拡大が期待できる。

こうした多様な先端的な構造材料・プロセスの開発にMIを導入して開発・制作期間の大幅短縮、コスト大幅削減を実現することで、我が国の素材産業の更なる国際競争力強化に貢献する。

# 統合型材料開発システムによるマテリアル革命



図表1. 課題名の全体構想

## (3) 目標・狙い

### Society5.0 実現に向けて

- ・第5期科学技術基本計画における Society5.0 実現に向けた 11 のシステムの1つである「統合型材料開発システム」に対応して、これまで構築してきたMIの成果を活かし、材料科学(フィジカル)と情報科学(サイバー)の本格的な融合を実現する。
- ・材料開発コストを 50%以下、材料開発期間を 50%以下に低減するとともに、材料の新しい機能を引き出す逆問題MIを開発し、その有効性を実証するとともに、民間企業や研究機関等に広く活用される体制を構築する。
- ・逆問題MIを活用しつつ、設計自由度の高い複合材料や耐熱合金の最先端プロセスの開発を行い、発電プラント等の環境・エネルギー産業や航空機産業、健康・医療産業等で実部材として活用される目途をつける。

## 社会面の目標

- ・MIを活用した先端的な材料・造形プロセス開発に係る研究拠点・ネットワークを構築し、イノベーションのための国際連携、人材育成を推進する。

## 産業的目標

- ・産業界が活用できる逆問題対応型MI利活用のための拠点を構築し、材料開発時間の大幅短縮・効率化・コスト削減を実現する。
- ・MIを活用した新たな材料・プロセスによる国産部品の供給により、航空機向け部材や産業用発電プラント、生体向け材料等の受注シェア拡大及び産業規模拡大を実現する。

## 技術的目標

- ・MIを活用して、先端的な複合材料や金属の3D積層をはじめとした粉末造形等の革新的なプロセスの開発に係る技術を確立する。

## 制度面等での目標

- ・材料・プロセス開発に関するMIを用いた新たな試験・評価方法の確立およびその標準化を目指す。

## グローバルベンチマーク

- ・我が国が強みを有している材料技術について、昨今、海外の主要国、特にアジア諸国からの追い上げが顕著。また、AIを活用した材料開発手法について、米国・欧州等で集中投資が行われている。
- ・我が国では、高品質な材料データの蓄積を有する強みを活かし、これまで国内メーカー各社とともにMIに取り組み、材料開発に強みやノウハウを有するメーカー各社が、課題に応じて自ら使える汎用開発支援ツールとして開発を進め、世界に先駆けてプロセスから性能を一貫予測するためのシステムを構築してきた。この素地を活かし、世界で初めての取り組みとして、欲しい性能から実際の材料・プロセスをデザインする逆問題対応型MIの開発に取り組み、それを実際の先端材料・プロセスに適用し開発効率化を実現する。
- ・MIと我が国が強みを有する材料技術を統合し、我が国が強みを有する先端的な材料・プロセスの開発に取り組むこととするが、今後さらに詳細な国際ベンチマーク調査を実施し、戦略的に研究開発を進めていく。

## 自治体等との連携

- ・特定の技術に強みを有する地方大学や、高度な技術の蓄積を有する公設試験研究機関等の最先端技術を結集し、MIを用いた先端材料開発をオールジャパンで推進する。
- ・地域自治体と連携した成果発信等を行うとともに、産業振興・人材育成に貢献する。

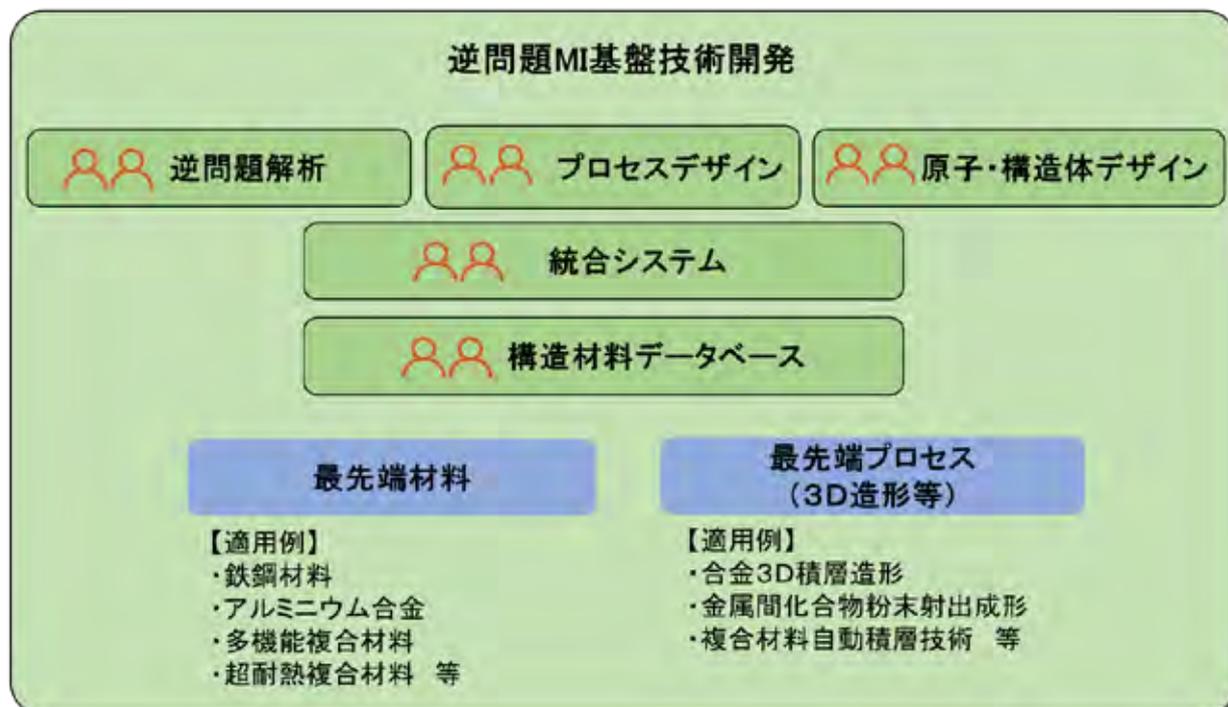
## 2. 研究開発の内容

PD・サブPDの指揮の下、MI基盤技術の開発を行う領域を設定し、逆問題に対応した次世代型MIシステムの開発に取り組むとともに、MIを活用して新たな材料・プロセス開発を実現することを目指す。

国際的に高いレベルにある日本の材料科学技術・素材産業のポテンシャルを最大限に活かす適用例として、比強度、耐熱性、信頼性のいずれも最高レベルが要求される航空機産業のほか、産業用発電プラント等の環境・エネルギー分野や、人工関節等の生体用材料の用途を想定し、鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金・金属間化合物などの金属系材料に加え、構造材料としての利用が広がっているセラミックス、高分子材料、特に、これらの複合材料の開発を想定する。また、先端的なプロセスとして、3D 積層造形を中心とした金属粉末を原料とする 3D プロセス技術、複合材料の 3D 造形技術など、対象分野において刷新が起りつつあるプロセス技術を想定する。

### 研究開発体制(案)

- 逆問題に対応したMI基盤の開発と、MIの適用例としての先端材料・プロセス開発を一体的に実施。
- 適用する各材料・プロセスごとに、**サイバー(MI)とフィジカル(材料開発)の実質的な連携**を構築。
- 原則各チームで**企業・大学(国研)双方の Co-leader制**を敷き、産学連携を着実に実施。



図表2. 本課題の研究開発体制

## (A) 逆問題 MI 基盤技術開発領域

### 概要

マテリアルズインテグレーション(以下、「MI」という。)は、材料科学の理論および経験則、材料の実験データおよび様々なデータベースを、計算科学とデータ科学の融合により組合せ、計算機上で材料のプロセス、構造、特性、性能の連関を予測するシステムを実現して、効率的な材料の開発やプロセスの革新を可能にする統合型の材料工学と定義される。我が国ではこれまで、世界に先駆けて MI を具現化すべく、SIP「革新的構造材料」(以下、「第 1 期」という。)において、鉄鋼材料の溶接部を例題として、MI システムの開発を行ってきた。その結果、疲労、クリープ、水素脆化、脆性破壊といった構造材料にとって重要な性能について、溶接プロセスから一貫して予測するための、各種計算モジュール及び材料工学的に計算モジュールを連関させたワークフロー、さらに、ワークフローに沿って逐次計算を実行していく統合システムの開発に成功しつつある。

新素材が社会の革新を引き起こすマテリアル革命を推進していく上で、MI の高度化と重要な材料領域への応用展開が喫緊の課題となる。Society5.0 を支える革新的な材料をいち早く開発し社会に実装していくことが重要であるとともに、材料開発の仕組みそのものを、Society5.0 の考え方、すなわち、サイバー(ものづくり)とフィジカル(MI)の融合によって、飛躍的に効率化していく必要がある。

世界を見ると、AI を活用した材料開発に投資が加速している。複雑な構造を有する材料を AI が開発できるのか、特に、長期間の信頼性を求められる構造材料において、AI が開発した材料が受容されるのか等、議論が分かれるところである。しかし、実現すると、我が国が強みを有する材料分野において、破壊的な技術革新をもたらすことになる予想される。

従来の材料工学に、近年、発展著しい情報工学を活用していくことが重要である。我が国は、材料分野において、材料工学の知見、ものづくり技術、高品質なデータの蓄積において、世界的に優位にある。情報工学によって、これらの蓄積を最大限に活用するとともに、さらに、効率的にこれらの蓄積を拡大していくことを企図する必要がある。

以上の認識に基づき、MI 基盤領域においては、これまでに開発してきた MI を素地とし、材料工学と情報工学を融合して、材料開発手法の刷新を目指す。我が国の材料分野での強みを生かし、世界に先駆けて、破壊的なイノベーションを起こす。具体的には、重要な材料分野への応用を念頭におきながら、MI の高度化、特に、欲しい性能から材料・プロセスを最適化する逆問題に対応した新しい MI 基盤の確立に取り組む。逆問題のアプローチとしては、順問題の解析技術に AI 技術を組み合わせることで効率的に探索を行う方法が有効と考えられる。ここでは、(A-1)逆問題解析技術の先行的開発、(A-2)様々な先端的なプロセスに逆問題を適用するための新たな計算モジュールの開発、(A-3)原子から構造体をデザインする技術の開発、(A-4)これらを統合して逆問題開発を可能とする統合システム、及び、(A-5)構造材料開発の基盤となるデータベースの開発も行い、これを合わせて、逆問題 MI 基盤の確立を目指す(図 A-0-1)。

まず、(A-1)逆問題解析技術の先行的開発においては、第 1 期で開発した計算モジュール・ワークフローを直接的に活用できる材料・プロセスを対象に、AI 技術と組み合わせる逆問題を解析する手法について研究開発を行う。加えて、必ずしも計算モジュール化になじまないプロセスに対しても、効率的な逆問題解析手法を検討する。

並行して、(A-2)において、先端的な材料・プロセスに逆問題を適用していくために、様々なプロセスに対

応可能な計算モジュール群の開発を進める。ここで開発される計算モジュール群を活用し、(A-1)で開発した逆問題手法を取り込みながら、先端材料・プロセスにおける具体的な適用例において逆問題アプローチによる開発効率化に取り組むことになる。

さらに、構造体レベルでの逆問題適用のために、(A-3)では、原子レベルから構造体をデザインするために必要な解析技術を開発する。機体やエンジン部品などの構造体レベルで要求される性能は、複数の特性を満足する必要がある。また、これらの特性が、原子・分子から構造体レベルの様々なスケールでの内部構造に依存する。ここでは、複数の物理現象を同時に扱いながら、スケールを接続するという高度な技術の開発が必要となる。

これらの要素技術を統合する(A-4)逆問題対応 MI 統合システムの開発では、新たに開発される逆問題技術や先端的な材料・プロセスに対応した計算モジュール等を実装し、これらによって逆問題解析ができるように統合システムの大幅な機能強化が求められる。さらには、使い勝手やセキュリティの強化等、MIの社会実装を進めていくために必要な改善も同時に行っていく必要がある。

最後に、構造材料の開発の基盤となる(A-5)構造材料データベースの開発では、構造材料特有のデータベース構造を研究開発し、実験及び計算データを効率的に蓄積して逆問題に活用できる構造材料データベースを構築する。

なお、MI 統合システムと構造材料データベースは密接に連携し、材料データ、計算モジュール、ワークフローという計算道具を有機的に活用して、逆問題で構造材料を開発して行くことになる。

以上の取り組みにより、金属・セラミックスから高分子、さらに、これらをマトリックスとした複合材料までをカバーし、求められる性能から材料・プロセスを最適化するための次世代型 MI 基盤の確立を目指す。

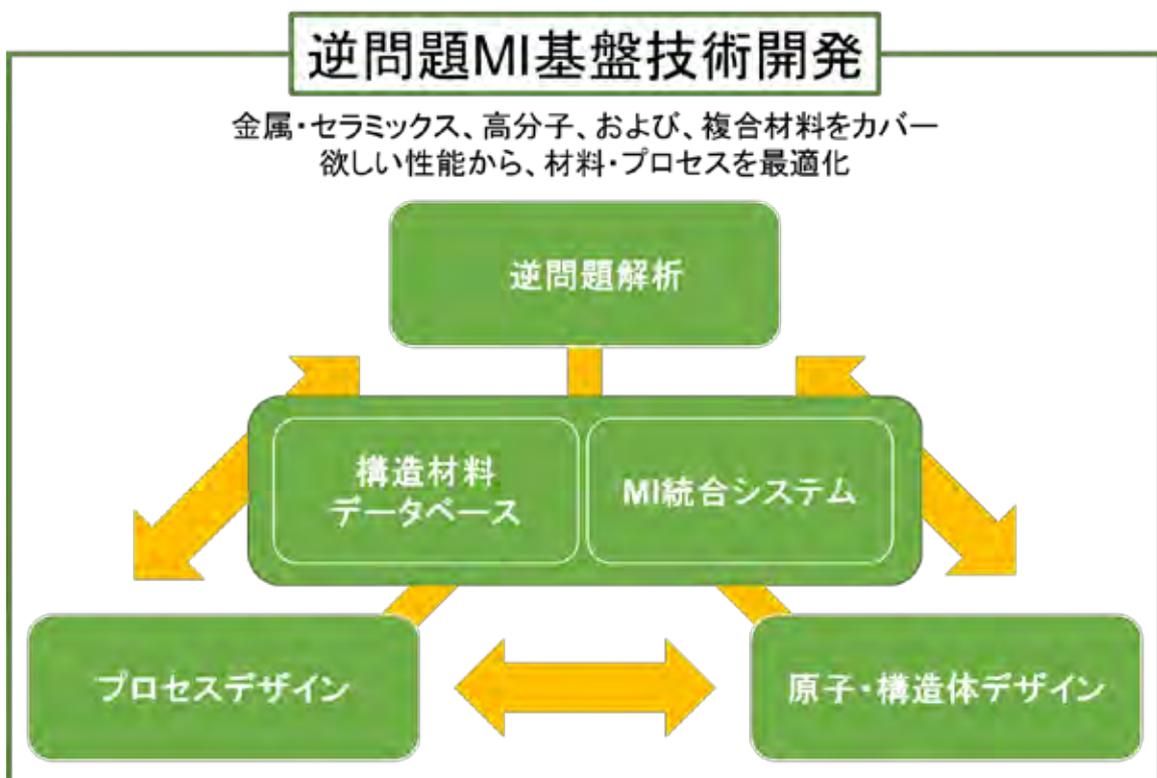


図 A-0-1 逆問題 MI 基盤技術開発の全体構成

## (A - 1) 逆問題解析

これまで我が国では、理論、経験則、数値計算、データベースなどを融合することにより、構造材料の構造や性能を予測するための計算モジュール群やデータベース群から成るシステムを、鉄鋼材料溶接部を例題として開発してきた。溶接過程は、凝固、変態、粒成長、析出など、鉄鋼材料の構造を決定する多くの現象が同時に発生する複雑なプロセスであるため、ここで培われた構造予測モジュールは、溶接以外の金属材料製造プロセスにも拡張可能であり汎用性が高い。また、溶接部での複雑な微視構造を持つ材料や構造体が、負荷応力や温度などの使用条件に対してどのような時間依存の性能を発揮するかに関して、疲労、クリープ、水素脆化、破壊靱性の各性能を対象として性能予測モジュールの開発を行った。これらの計算モジュール群がフレキシブルに接続可能なシステムの開発により、性能の一貫予測が可能となってきた。また、データ同化手法により計測困難な材料パラメータの推定も可能となっている。

しかしこれまでの予測システムは、基本的には組成などの材料条件、製造や利用加工などの材料プロセス条件から性能を予測する順問題を取り扱うシステムであった。一方、鉄鋼材料においては 1.5GPa 級の次世代超高張力鋼、アルミニウム合金においては 750MPa 級の高強度材料の開発が進められている。しかし、強度は破壊靱性、耐環境性、溶接性とのトレードオフの関係にあり、これら材料の実用化にあたっては性能バランスの最適化が不可欠である。したがって、材料開発の時間の短縮を図るためには、これまで個別に開発してきた各性能予測モジュールを連携させて最適化を図るための新たなアプローチが必要となる。また、先端的な 3D 積層造形用の粉末製造技術など、全ての個別プロセスの物理モデルの構築が困難である課題については、研究開発における試行回数の飛躍的な削減や効率的なプロセス探索技術が求められている。

そこで本研究開発においては、これまで開発を行ってきた鉄鋼材料やアルミニウム合金等を主な対象とした性能予測の順問題のシステムをベースとして、スパースモデリングやデータ駆動等の情報科学・データ科学の手法を駆使することにより、性能バランスの最適化および逆問題解析が可能な枠組みについての研究開発を進める。さらに、この逆問題解析手法を適用することにより、自動車・航空機をはじめとする輸送機器において今後ますます必要とされる先端的な性能を有する鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金粉末材料などについて、材料開発の一層の加速を図ることを目的とする。

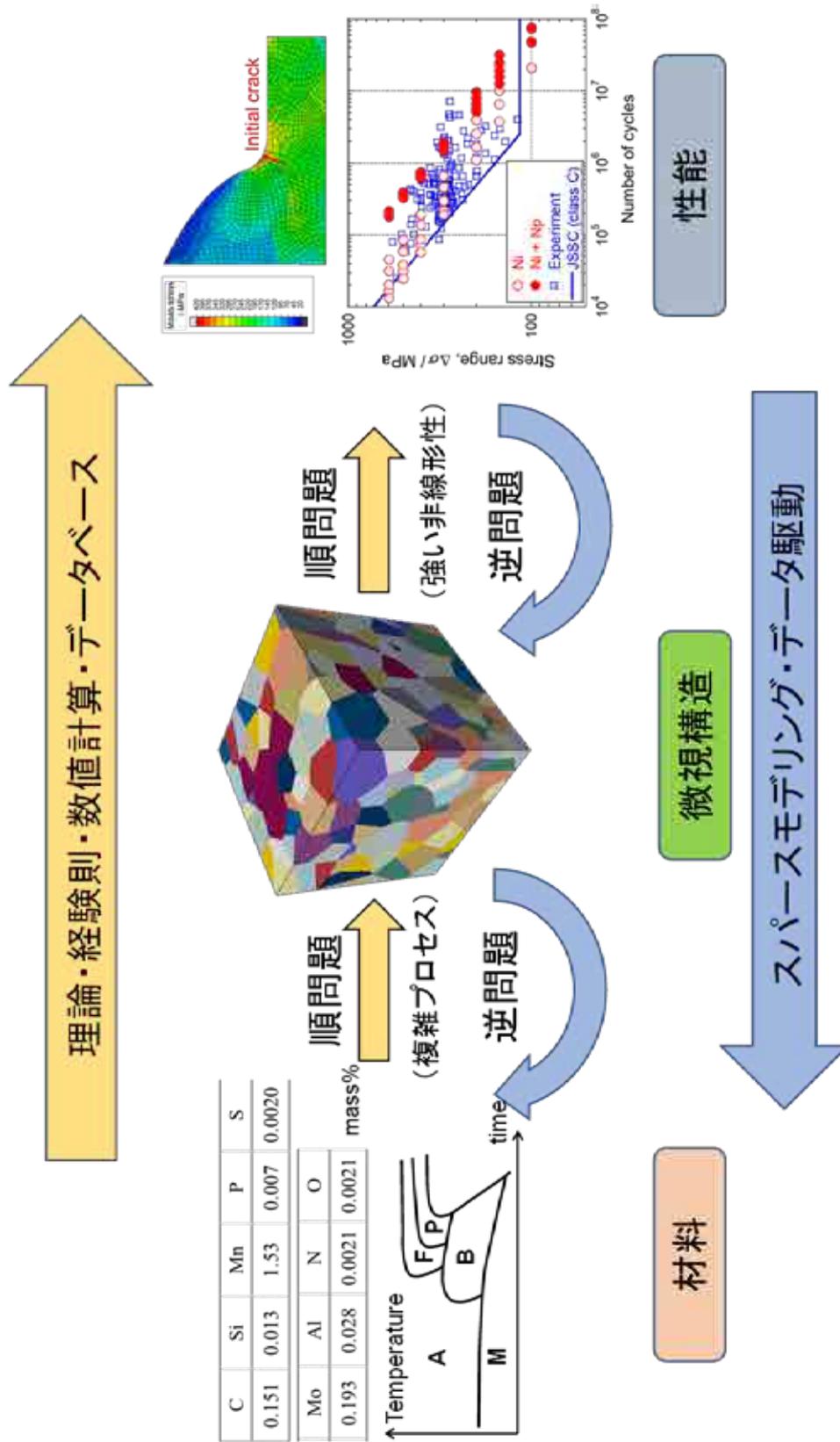


図 A-1 逆問題解析研究開発概念図

## (A - 2) プロセスデザイン

プロセス、構造、特性、性能は、材料工学の四大要素であり、これらの連関を解明し、つなぐことが材料開発の本質である。従って、先端的な材料・プロセスに逆問題を適用するためには、これら材料工学四大要素をつなぐための計算モジュールの開発が不可欠である。ここでは、先端プロセスとして、特に、金属粉末を原料とする三次元(以下、「3D」という。)造形技術を取り上げ、これを先端的な耐熱材料開発に適用していくために必要な計算モジュールの開発に取り組む。具体的には、共通する物理現象についての解析モジュールや、個々の材料に応じた予測モジュールを開発し、先端的な材料・プロセスに逆問題を適用するための計算モジュール基盤を構築する。

ここで開発した様々なプロセスに関する計算モジュール及び3D構造解析技術は、先端的材料・プロセスに逆問題を適用し、材料やプロセスをデザインするために活用していく。具体的な開発項目を以下にまとめる。

- ・ 材料開発のための共通的基盤モジュール  
金属粉末の溶融凝固過程や焼結過程など共通する物理現象に関するモジュールを開発する。
- ・ 3D積層造形構造制御モジュール  
3D積層造形を対象に、非平衡プロセスを積極的に活用した合金設計技術を開発し、耐熱性と造形性を両立させた新合金提案技術を確立する。インラインモニタリング技術の開発とデータ蓄積、予測結果との比較検証を通じて、モジュールの完成度向上を図る。
- ・ 3D粉末鍛造構造・性能連関解析モジュール  
粉末焼結及びビレットングによって得られた一次素材は、ニアネット鍛造及び熱処理によって、3D形状と構造が制御され、クリープ、疲労等の性能が決まってくる。ここでは特に、耐熱部材で重要となるクリープと疲労が重畳したクリープ疲労について、性能から最適な3D粉末鍛造条件を決定するための基盤となる、構造と性能を連関させる技術を確立する。

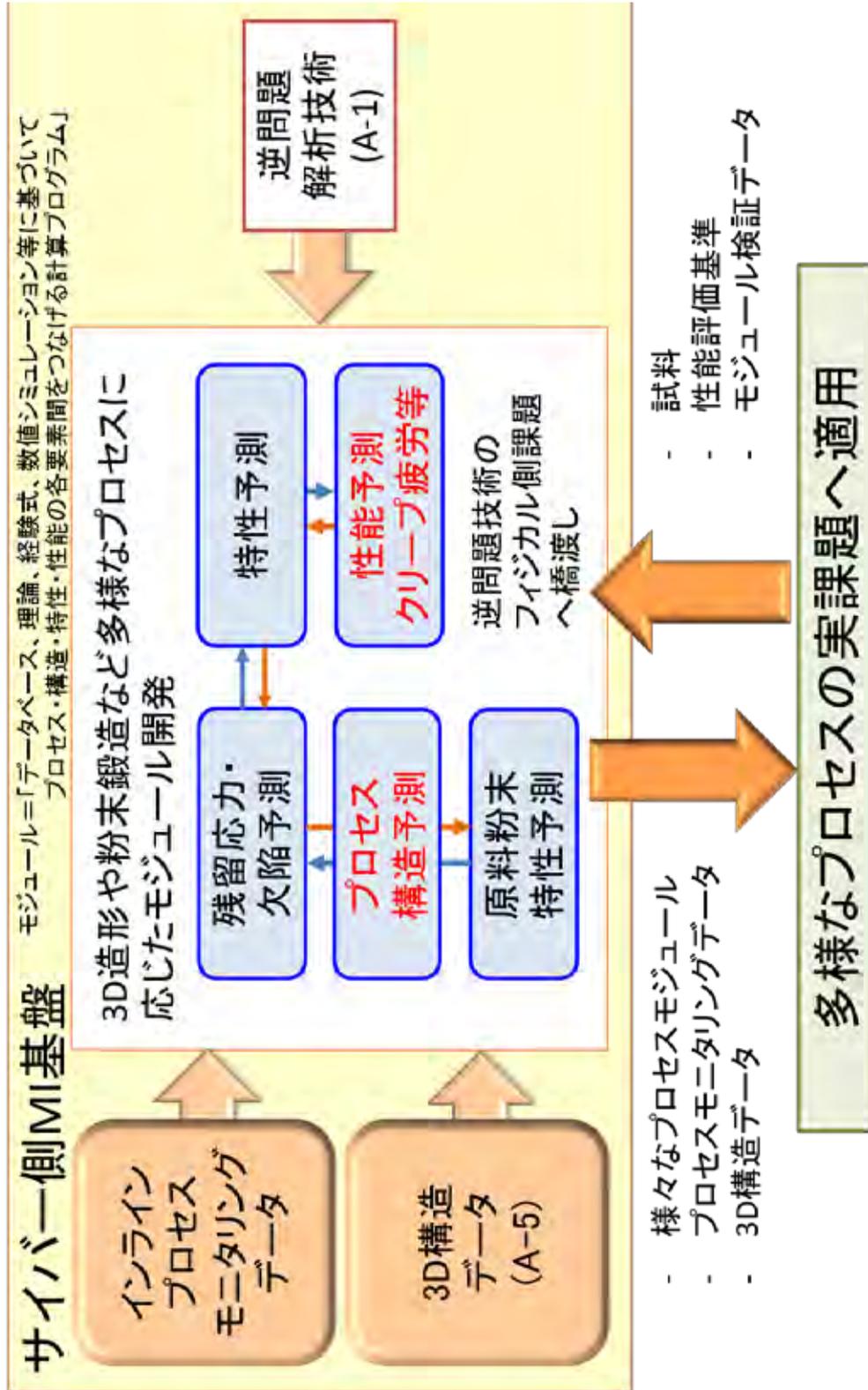


図 A-2 プロセスデザイン研究開発概念図

### (A - 3) 原子・構造体デザイン

逆問題を適用して、原子レベルから構造体をデザインしていくためには、複数の物理現象(マルチフィジックス)を同時に扱いながら、原子・分子から構造体までのスケール(マルチスケール)を繋いで行く技術が必要となる。ここでは、このマルチフィジックス・マルチスケールの問題が先鋭化される航空機用高分子系複合材料を適用例として、機体(構造体)レベルで逆問題を適用するための基盤技術を取り上げる。これまで我が国では、量子化学計算に基づく架橋反応を含む分子スケールから簡易機体設計まで扱えるマルチフィジックス/マルチスケールシミュレーション技術を開発してきた(図 A-2-1 左図)。このような取り組みをボーイングは”Atoms to Aircraft”と名付けている。

ここでは、高分子系複合材料の機体適用を具体的な適用対象として、より開発現場での適用を可能とすべく、シミュレーションツールをさらに発展させる。具体的には、多成分系ネットワークポリマーの開発研究から構造部材設計、マニファクチャリングに至るまでを一気通貫に扱え、かつ逆解析に基づき最適化までを扱えるマルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)シミュレーターを開発し(図 A-2-1 右図)、それをもとに多機能複合材料あるいは最適構造部材を提案する。その実現に向けた開発項目は次のようなものである。

- ・ ネットワークポリマーを対象とした散逸分子動力学法(DPD)の構築
- ・ DPD あるいは全原子 MD を利用したマルチフィジックス解析
- ・ 繊維間干渉を考慮に入れた自己無撞着場理論(SCF)の構築
- ・ エポキシ樹脂系ネットワークポリマーの組成設計・実験との比較
- ・ 実験とマルチフィジックス解析の両方を教師データとした新規材料提案
- ・ 連続体スケールまでを取り込んだマルチスケールモデリングの構築
- ・ 複合材料の自動積層における成形モデリングとそれに基づくモニタリング提案
- ・ 応力集中軽減を考慮した自動積層構造部材に対するマルチスケール最適設計

中でも、ナノ～マイクロスケールの相分離構造を有する複合材料向け多成分ネットワークポリマーの特性評価、特にエポキシ樹脂の反応過程で生じる相分離構造形成をシミュレーションによりモデル化し、それを実構造部材にまでスケールアップする取り組みは、ボーイングにも先んじた世界で初めての試みである。日本の戦略物資である炭素繊維あるいは複合材料の優位性を保つためには、ソフト面での技術確立が必要不可欠である。

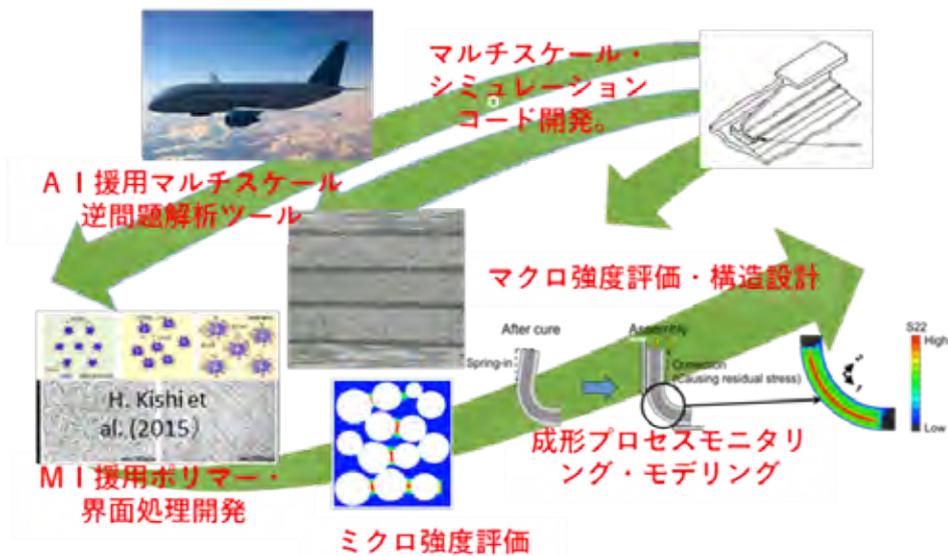
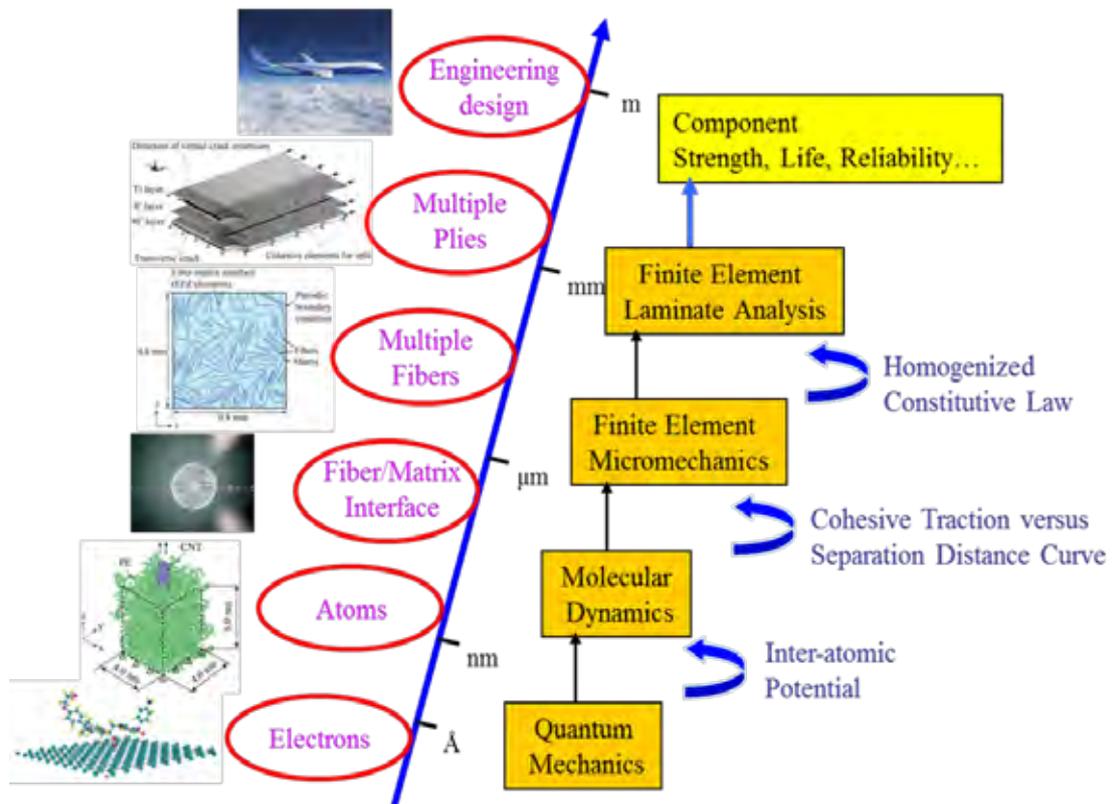


図 A-3 原子・構造体デザイン研究開発概念図

## (A - 4)MI 統合システム

逆問題対応型 MI システムを材料開発に活用していくためには、逆問題に対応できる統合システム基盤の開発に加え、ユーザビリティの向上が必須となる。さらに様々な実問題に適用するためには、(1)、(2)、(3)と連携して、新たに開発されたワークフローやモジュールを統合システムに実装し、材料開発のための計算が円滑に行われるための支援が必要となる。

そこで、統合システムの開発は、「逆問題対応統合システム基盤の開発」、「ユーザビリティの改良・開発」、「実問題への適用」の 3 項目について、以下に示す開発を行い、逆問題に対応できる MI システム基盤の構築を目指す。

### 逆問題対応統合システム基盤の開発

様々な階層の不均一を伴う材料に対して逆問題を適用するためには、プロセスから性能という方向の順問題を解く要素技術において、物理現象が緻密に記述され、かつ、それに基づいた計算を発散や停止といった不安定さを抱えることなくロバストに実行できることが、必須となる。さらに現実の課題では様々なスケールや物理現象を複合的に解くためのワークフロー(以下、「WF」という。)が必要である。

そのために、第 1 期で開発した MI システムの基盤を大幅に強化する。具体的には、まず、個々のプログラムの高度化、これまでに構築された様々な API(アプリケーションプログラムインタフェース:MI-API(接続に関する API)、DB-API(計算データベース操作に関する API)、語彙-API(語彙情報に関する API)など)、および、データベース機能について、逆問題に対応できるように大幅に機能強化を図る必要がある。

この緻密な物理記述に裏付けされたロバストな順方向の計算技術を、AI が自在に制御することで、逆問題を解くことができる。したがって、逆問題に対応できる基盤システムとして拡張していくためには、逆問題を解くためのアルゴリズムの実装と、AI が順方向計算を自在に制御するための新技術の開発が必須となる。ここでは、最新の AI 技術に基づいた逆問題アルゴリズムと WF-API(ワークフロー操作のための API)を開発し、MI システムに実装することによって、逆問題に対応した基盤システムの拡張を達成する。

ワークフローは材料工学における問題の解き方そのものとみなすことができる。従って、これらをデジタル的に蓄積してネットワーク化することで、機械可能な形で材料分野における専門知識を構造化できることになる。このいわばデジタル教科書を用いると、類似の問題について素早く解き方を調べたり、思いもかけない解決のルートを発見することが可能となる。ワークフローのネットワーク化をいかに達成するかが課題である。ワークフローは、それ自体が概念と概念の接続そのものであり、概念は語彙(専門用語)によって表現される。従って、語彙と語彙との関係を構造化できれば、ワークフローのネットワーク化が可能となると考えられる。以上のアイデアに基づき、第 1 期で開発した語彙管理の機能を、材料工学の知識ネットワーク化を企図として、大幅に機能強化する。異なる材料、異なるプロセス技術の技術者間の知見をつなげることができるよう、概念の関係性を記述する仕組みを実装することで、知見のネットワーク化を図る。このためには語彙解析システムや語彙可視化システムが、登録される語彙群や実験・計算データを参照しながら、人間の思考

と同期しながら知見を引き出す工夫が必要となる。具体的には、語彙や材料のデータベースにおける検索について、容易性、高速性、および、スケーラビリティを確保したシステムの開発が求められる。

- ・ ユーザビリティの改良・開発

幅広い分野の MI システムユーザ層を獲得することが重要であることから、課題を持つ各ユーザが直感的に扱えるグラフィカルユーザーインターフェース(以下、「GUI」という)を、ユーザの意見を集約しながら実現していくことが重要である。また様々な API を開発することから、個別の問題に応じた機能開発やデータ収集を可能とする枠組みの開発も想定される。ユーザーの直感を引き出すインタラクティブな GUI を実現するために、AI 技術を活用したデータ解析機能(エラー処理、ログ収集、可視化機能も含む)の開発も必要となる。さらに遠隔からのアクセス機能の強化、さらに、セキュリティに関する技術を含めてシステム拡張を行う。

- ・ 実問題への適用

実際の問題に適用するためのフェーズでは、(A-1)、(A-2)、(A-3)で開発されたワークフロー、モジュール、逆問題アルゴリズムなどの研究成果をシステムに実装し、逆問題で材料を開発するツールとして仕上げていく必要がある。実装する開発物の入出力の理解や整理、汎用化、大規模化、ロバスト性確保などプログラムの高度化を協働して行い、これらの成果をシステム側に実装をする。

# 逆問題対応統合システム基盤強化

順問題での緻密な物理表現、安定な計算を担保 逆問題で利用するシナリオへの対応



図 A-4 MI 統合システム研究開発概念図

## (A - 5) 構造材料データベース

構造材料は原子から構造体までの幅広い範囲で様々なサイズにおいて階層的な不均一を有しており、これを構造と呼ぶ。構造は、プロセスと特性を結びつける結び目に位置しており、プロセスが構造を支配し、構造が特性を支配する。さらに、これに加えて、使用環境までを考慮することで、性能を考えることができることになる。構造材料開発のために材料データを高度に活用していくためには、階層的な不均一構造の記述方法が鍵となる。さらに、階層的な不均一構造情報をデジタル化することに、大きなボトルネックが存在する。材料の構造は、様々な顕微鏡技術で画像として蓄積されるが、これを階層化した形で分類し、定量化してデジタル情報化していく作業は、構造画像についての豊かな知見を有した専門家に頼るしかなく、時間とコストが非常にかかっている。加えて、従来の材料工学では、技術的な制約のため、構造の二次元的な情報に基づくモデルの構築がなされてきたことにも留意する必要がある。本来、三次元的に特徴付けられる材料の構造情報をそのまま活かすことで、プロセス、構造、特性、性能のつながりをより本質に基づいて理解できるようになることが期待される。

以上の認識に基づき、プロセス、構造、特性、性能のつながりを記述し、逆問題に対応するための構造材料特有のデータベース構造について研究開発を行う。具体的には、構造材料の特性、性能を支配する材料の内部構造に着目し、格子欠陥から析出物、結晶粒構造などの、階層的に構成される材料の内部構造を、階層間で関係付けながら記述するための手法を開発し、プロセス、特性、性能と日もづけるためのデータベースを構築する。さらに、材料工学四大要素の中で、プロセスと特性を結びつける「構造」に関して、3D 情報を効率的にデータベース化するための技術を開発する。材料の性能や特性は、ナノスケールから数百  $\mu\text{m}$  スケールまで、非常に幅広いスケール範囲に及ぶ階層的で 3D 的な幾何特徴を有する構造に大きく左右され、この構造はプロセスによって大きく変化する。従って、逆問題的に欲しい性能から最適なプロセスを決定していくためには、性能とプロセスを結びつける材料の構造に関して、定量的な 3D 情報をデータベース化しておく必要がある。ここでは、様々なプロセス条件下で形成された構造に関するマルチスケールな 3D 情報を、効率的に蓄積する手法を開発する。

- ・ 構造材料データベース構造の開発

鉄鋼溶接部、アルミ合金溶接部に関する材料データを活用し、先行して、これらの材料について、産学官でデータベース構造について検討を進める。その際、材料オントロジーなどの階層連関を記述するための情報工学的な枠組みを最大限活用し、構造材料におけるデータ活用に資するデータベース構造を構築する。逆問題 MI を適用する先進的な材料・プロセスについても、適用例においてデータが蓄積され次第、同様に検討を開始する。検討作業及び実装には、国際的な連携が欠かせないので、Granta MI など構造材料データベース事業を展開している機関と協力し、事実上の標準化が進むように展開を図る。

- ・ マルチスケール 3D 構造解析技術開発

従来、一断面の画像からだけでは、その 3D 形態を想像することは難しく、判別には卓越した専

専門家の支援が不可欠となっている。構造のマルチスケールな 3D 情報を効率的に蓄積するためには、断面画像から構造を自動判別しセグメンテーションする機械学習モデルの確立が望まれている。ここでは、任意の二次元画像における構造判別並びに構造因子の自動抽出を可能とするシステムの構築を行う。並行して、現状の 3D 構造観察技術に存在するスケールギャップを解消し、マルチスケール 3D 構造解析を可能にする技術を開発する。特に、構造材料として最も重要なマイクロ～サブミリ領域における 3D 構造観察技術を対象とする。

## 中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

### (A - 1) 逆問題解析

- ・既存の順問題モジュールの逆問題モジュールへの展開
- ・高強度鋼の構造・性能予測のための順問題モジュールの確立
- ・高温用鋼の構造・性能予測のための順問題モジュールの確立
- ・低温用鋼の構造・性能予測のための順問題モジュールの確立
- ・アルミニウム合金の構造・性能予測のための順問題モジュールの確立
- ・粉末製造プロセス条件と粉末特性のデータ取得と蓄積，データベースの構築を開始。
- ・プロセス最適化のためのデータ科学技術開発

### (A - 2) プロセスデザイン

- ・非平衡状態図を活用した材料設計技術の基礎確立
- ・3D 積層造形プロセスのインラインモニタリングシステムの構築完了
- ・3D 粉末鍛造プロセスにおいて、構造とクリープ疲労性能を関連づけるための技術基盤の確立

### (A - 3) 原子・構造体デザイン

- ・マルチフィジックス・マルチスケール(MP/MS)シミュレーターにおけるプラットフォームの確立
- ・MP/MS シミュレーターによる順解析を行い、高精度に実験結果を予測可能とする
- ・MP/MS シミュレーターによる逆解析ツールの確立

### (A - 4) 逆問題対応 MI 統合システム

- ・操作面におけるユーザ利便性の確保
- ・DB の高速検索、スケーラビリティに関する効率化、DB 構造の改訂
- ・API 統合化、新規開発によるアプリケーション構築技術の実現

### (A - 5) 構造材料データベース

- ・鉄鋼溶接部、アルミ合金溶接部を対象にした構造材料データベース構造の設定
- ・設計した構造材料データベース構造に基づく実装
- ・先行事例材料を対象に機械学習による構造自動判別技術の基礎構築
- ・マルチスケール 3D 解析のための装置および手法構築の完了
- ・3D 構造情報データベースの構築を開始

## 最終目標(2022 年度末時点)

逆問題に対応し、金属、セラミックス、高分子、及び、複合材料といった幅広い材料の開発に活用可能な、次世代型 MI 基盤を確立する。さらに、MI 基盤を活用して材料開発を加速させため産官学が協働できる MI オープンプラットフォームの制度及び体制を整える。このために、以下の最終目標を設定する。

### (A - 1) 逆問題解析

- ・新規開発した順問題モジュールの逆問題モジュールへの展開
- ・先端的な鉄鋼材料およびアルミニウム合金において、逆問題解析による材料開発の適用例を創出
- ・耐熱合金粉末製造プロセスにおける最適化のための逆問題手法の確立

### (A - 2) プロセスデザイン

- ・3D 積層造形プロセスの一貫予測に必要な構造予測、性能予測モジュールの実現
- ・3D 粉末鍛造プロセスの一貫予測に必要な構造予測、性能予測モジュールの実現
- ・非平衡プロセスを積極的に活用した新合金提案技術の確立

### (A - 3) 原子・構造体デザイン

- ・MP/MS シミュレーターにより、最適な多機能複合材料を提案
- ・MP/MS シミュレーターにより航空機を念頭に置いた構造部材あるいは部分構造の最適設計を行い、航空機における他の材料に対する複合材、あるいは薄層複合材の優位性を提示
- ・実験データと MP/MS シミュレーターを組み合わせることによる、多機能複合材料に関するデータベース構築とマテリアルインフォマティクスへの適用
- ・実験的プロセスモニタリングと MP/MS シミュレーターを組み合わせリアルタイムモニタリングを実現
- ・MP/MS シミュレーターを駆使することで、世界に先んじた自動積層構造部材の最適設計法を提案

### (A - 4) 統合システム

- ・セキュリティ面におけるユーザ利便性の確保
- ・DB の高速検索、スケーラビリティ確保を実現する DB 構造の実装
- ・開発した API による自由なアプリケーション構築の実現
- ・逆問題に対する様々なアルゴリズム(逆問題モジュール)の実装
- ・逆問題に対して得られた知見を蓄積できるようなシステムの構築
- ・実問題を抱える拠点との連携の実現

### (A - 5) 構造材料データベース

- ・逆問題 MI が適用される先端材料・プロセスについて、順次、構造材料データベース構造を設計し、データベースを構築
- ・国際的な事実上の標準化に向けて、設計したデータベース構造の公開
- ・マルチスケールで構造を正確に解析し、必要に応じた画像解析による 3D 情報抽出技術の完成
- ・要求される構造情報を正確かつ迅速に提供する体制の構築と逆問題事例へのデータ適用

## (B) 逆問題 MI の実構造材料への適用

本プロジェクトで開発する逆問題 MI 基盤技術を、素材製造から構造体まで作り込む一連のプロセスに適用し、実用的な構造材料の開発において期間、コスト等が低減される事を実証し、逆問題 MI を社会実装していくための先行事例を創出する。逆問題 MI 基盤で開発される様々なデータベース、計算モジュール、ワークフロー、データ科学手法を、対象となる材料・プロセスに合わせて使いこなす技術を開発する。さらに、必要に応じて、適用対象の材料・プロセスに固有のデータベース、計算モジュール、ワークフローを開発しながら、逆問題 MI を活用した材料開発を実施する。いわゆる材料開発だけを目的化するのではなく、逆問題 MI という材料開発手法の刷新につながる好例を作り上げている事に主眼を置く。

適用対象は、前段で述べた逆問題 MI 適用の好例となることが期待されるものであって、日本発の材料をはじめ我が国が強みを有し、国際的な要求が高まっている先端的な材料・プロセスを選定する。先端的な構造材料としては、鉄鋼材料、アルミニウム合金、耐熱合金・金属間化合物などの金属系材料に加え、構造材料としての利用が広がっているセラミックス、高分子材料、特に、これらの複合材料を想定する。また、先端的なプロセスとしては、3D 積層造形を中心とした金属粉末を原料とする 3D プロセス技術、複合材料の 3D 造形技術など、対象分野において刷新が起こりつつあるプロセス技術を想定する。

逆問題 MI が実用材料の開発に効果があることを実証するために、最終的に社会実装される材料・プロセスを対象とする。すなわち、開発した材料・プロセスは、参画する材料メーカー・重工メーカー等により、発電プラント用材料や生体用材料、航空機用材料等として実用化されるように、事業化のマイルストーンとなる開発目標が明確に設定される必要がある。さらに、事業化に向け成果を展開していくために、参画各社においては出口戦略を有するものとする。

なお、当該研究開発で開発されたデータベース、計算モジュール等は、開発材料・プロセスの事業化の妨げにならないよう留意しつつ、逆問題 MI 基盤に蓄積され、我が国の材料開発における競争力向上のために活用されるものとする。また、開発目標へ到達するまでの期間やコスト等が逆問題 MI を適用することによって低減されることを実証するために、比較参照するための類似の開発事例を有していることが望ましい。

以下に、本プロジェクトが志向する逆問題 MI の適用例を示す。

## (B - 1) MIを活用した複合材料の高付加価値化 < 多機能複合材料の開発 >

### 概要

力学特性向上による軽量化を目的に採用されてきた炭素繊維複合材料について、近年は、難燃性・熱伝導性・制振性などの機能性を付与することによるトータル軽量化・低コスト化が注目されており、航空機構造材等を実装可能な機能性付与技術の開発が重要となっている。一方、航空機システムの開発は、その複雑度が増すにつれて開発期間が90年代の倍以上に長期化しており、これを短縮する技術的アプローチが必要となっている。また、鉄道内装構造、自動車、パソコンなどの電化製品などにも複合材料の多機能化は広く課題となっている。

上記のとおり材料開発の要素として機能性が加わるなか、MI技術を初期段階から活用して複合材料への機能性付与をポリマー設計およびプリプレグ設計の観点から実施し、早期に実装可能な技術として確立し、部材の要素試験により実証する。

従来の、力学特性を目的性能とするプリプレグは、剛性と靱性の機能分離を行うポリマーもしくはプリプレグとして設計され、成功を収めてきた。本開発では、これまでの力学特性向上を追求した従来型の力学ドメイン設計に加えて、新たに難燃性、熱伝導性、制振性などの機能性を付与するため、プリプレグへの機能性粒子やポリマーの配合により、最終的な複合材料として少なくとも1つの機能性ドメインを有する構造を目標とする。これを実現するプリプレグの設計をMIを援用して実施し、基礎的な力学的および機能性データを取得する。機能性ドメインの実装のために、機能性粒子やポリマーの最適な構造を特定し構造設計を実施、構造形成にかかわる反応中のパラメータ取得、実際のドメインの特性と燃焼性や熱伝導性に関する現象との相関を確認する。これらの実験データと機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づき、深層学習を利用した材料設計ツールを構築する。

最終的には構造材に必要な力学特性をもつ力学ドメインと、複数の機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築し、力学特性を維持/向上させつつ複数の機能性を付与した材料を設計し、また、MIを活用した多機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づく設計ツールを構築し、材料特性を高精度に予測する手法を確立する。設計したプリプレグは、複合材料部材を模擬した小スケールの要素試験により、効果の実証を行う。

MI技術により、最終製品すなわち機体構造からの逆解析と、材料の分子設計からの順解析のサイクルを回すことで、樹脂、炭素繊維、樹脂 繊維界面の特性から部材(製品)までの特性を予測し、開発期間を短縮する技術を確立する。具体的には、多成分系ネットワークポリマーの開発研究から構造部材設計、マニファクチャリングに至るまでを一気通貫に扱え、かつ逆解析に基づき最適化までを扱えるマルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)シミュレーターを開発し、それをもとに多機能複合材料あるいは最適構造部材を提案し、開発期間を短縮できる技術開発を行う。

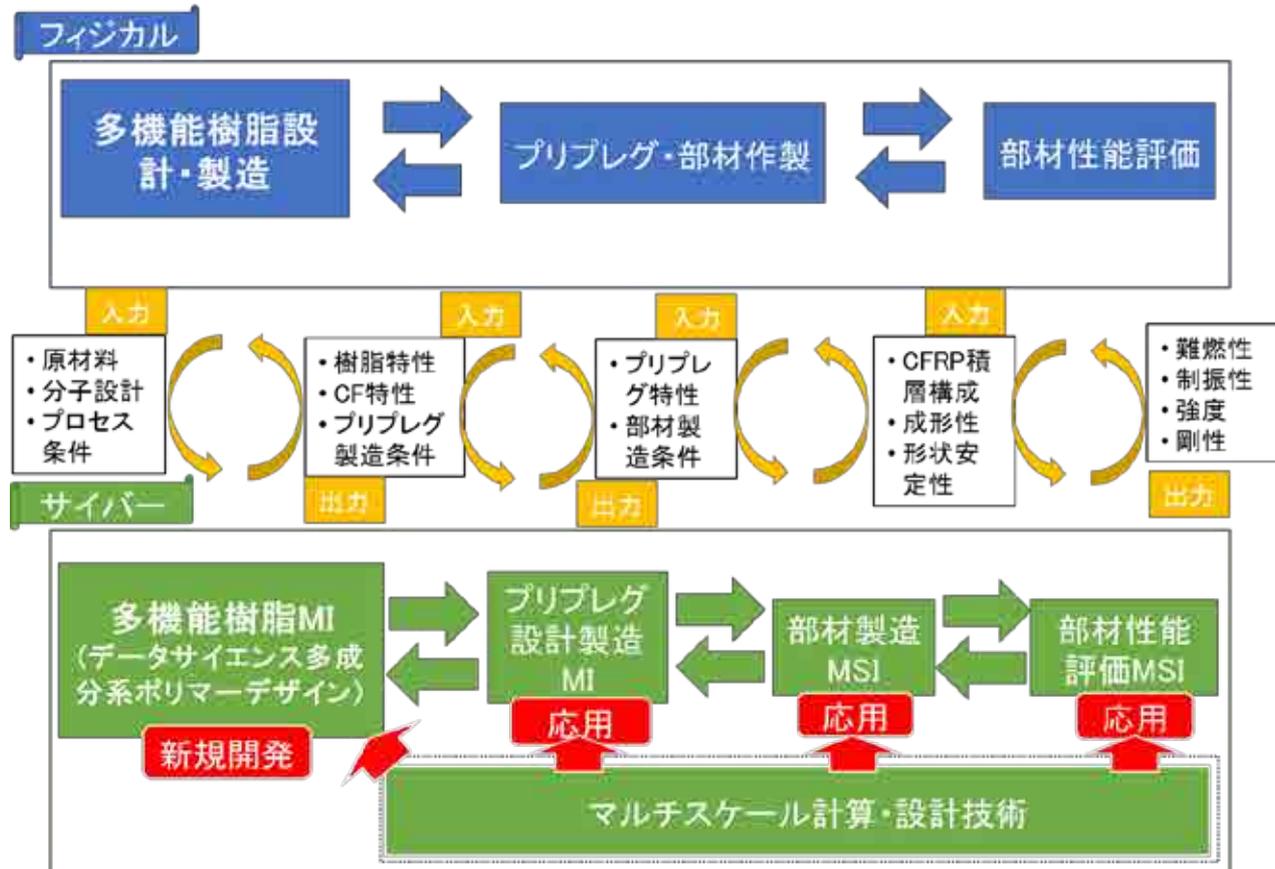


図 B-1 多機能複合材料の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

#### 中間目標(2020年度末時点の達成目標)

- ・力学ドメインと単機能ドメイン(難燃や制振など)をもつポリマー系、プリプレグ系の構築を達成し、基礎的な力学および機能性データを取得する。
- ・実験データと機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づき、深層学習を利用した材料設計ツールを構築する。

#### 最終目標(2022年度末時点)

- ・力学ドメインと複数の機能ドメインからなるポリマー系、プリプレグ系の設計データベースを構築し、力学特性を維持/向上させつつ複数の機能性を付与した材料を設計する。
- ・多機能ポリマー・プリプレグに関する階層的スクリーニングに基づく設計ツールを構築し、材料特性を高精度に予測しおよび基礎的な要素部材の特性を予測する手法を確立する。

## (B-2) MIを活用した複合材料の高付加価値化 < 薄層高自由度設計の実現・自動積層技術の開発 >

### 概要

炭素繊維複合材料を積極的に多用するBoeing787登場を契機に近年、航空機における複合材料の構造において自動製造装置の発達・導入が急速に進展している。この傾向は、炭素繊維複合材料による軽量化が期待される、風力発電用大型風車を筆頭に高速鉄道、高速船舶などにおいても顕在化しつつある。「ロボット積層」と言われる高速、高自由度積層を可能としたAFP(= Automated Fiber Placement)装置が欧州製を中心に進歩が著しい。こういった装置を導入すれば誰でも構造が容易に製造できるようになってきており、過去、日本が蓄積してきた複合材技術の国際競争力が急速に低下しつつある。再び日本が複合材技術で世界をリードするためには、ロボット積層に相応しい設計、製造手法の革新、標準化が必要である。当該素材では炭素繊維を始め日本メーカーが世界をリードしており、この素材での競争力を活かしながら、欠点や課題をMIとの連携にて改善・改質を進めていく。具体的には、高分子系材料である当該材料の課題である樹脂硬化収縮挙動は部品製造時の形状精度不良に直結し、航空機構造組立ての大きな障害、製造コスト増大要因となっている。また、ロボット積層では生産性は向上するが、熟練者による手積層品に比べ、積層精度悪化等によって内部品質が劣化し、製品の強度・剛性等、性能悪化に繋がっている。また、ロボット積層では、直線だけでなく、曲線に沿った積層をはじめ、炭素繊維の強さ等を活かした最適設計を実施できる機能を有するが、テープ間の隙間、干渉に伴う構造内部の品質欠陥を多数発生させてしまうことで品質、強度・剛性低下への悪影響があり、その利点である生産性向上が充分に実現できていない。

一方、ロボット積層のためのAFP装置は欧米が独占状態であり、日本独自の最高性能の複合材料や中間基材であるプリプレグがあっても、既存のAFP装置に適した材料設計、成形方法を獲得できていないために、欧米メーカーの要求に沿うことができなくなりつつある。中国を始めとする新興勢力はいち早く欧米のAFP装置を導入し、当該材料の製造研究に着手し始めている。

このような現状を踏まえ、ここでは二つの取り組みを目指す。第一は、汎用AFP装置を用い、日本でこれまで開発してきたプリプレグを用いて成形高精度化、AI援用の最適積層設計などを行うことにより、次期航空機ビジネスにすぐに参入することを目指すものである。第二は、日本独自技術である薄層プリプレグを用いた高自由度設計技術を目指し、国際競争力を高めるべく国産の自動積層装置の開発と合わせほぼ国産化を図ることを目指す。ここで実証された技術は、第一の取り組みで導入された汎用自動積層装置へ組み込むことも想定しており、今後の国際競争力強化の種として開発していく。

#### AI援用設計、製造自動化の実現

AFPなどの製造自動化における、日本における欠点を克服するべく、欧米で実用化が進められている汎用AFP装置を導入し、日本でこれまで開発してきたプリプレグを用いて成形高精度化、AI援用の最適積層設計などを行うことにより、日本独自の材料技術・高精度成形を実現し、次期航空機ビジネスにすぐに参入することを目指す。

このため、製品そのもの、あるいは製品製造のコスト競争力に繋がる技術をマルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)解析を核にしたMI技術との連携により、材料改善、改質を起点に逆に製品競争力、引いては日本の航空宇宙産業の力にしていく活動を進めていく。同時に複合材構造最適化・自動化の研究

成果を AI を援用した自動設計、養生(成形中に不整などを修正していく)システム化に繋げていく。

技術的にも市場的に急速に存在感を増している中国を含め、激烈な競争が予想される将来航空機開発等にて圧倒的な技術リードを獲得するためには、複合材の良さを活かしながら現行アルミ構造に負けない圧倒的な生産性を複合材製造にもたらす革新技術が必要である。硬化収縮挙動等高分子系材料特有の課題、あるいはロボット積層の適用に依る積層精度悪化等、従来の手積層に比べ、圧倒的な生産性向上の引き換えに失った品質上の課題を、高生産性を阻害させないで解決させ、複合材の良さである軽量・高強度、高剛性を活かすためには MI 技術を活用した材料改善・改質が必要である。マルチフィジックス/マルチスケール(MP/MS)解析を核にした MI 技術の活用により、ナノスケールでの素材、あるいは破壊経路の観察から始め、メートルサイズで現れる構造破壊現象、特に当該材料特有の破壊現象である剥離、層間に渡るクラック進展挙動の抑制を狙った当該材料の適用構造に相応しい新構造様式開発に至るまでの広範囲の課題に対し、マルチスケールの材料改善・改質研究を進め、最終的には炭素繊維複合材料を適用する製品の設計、構造、あるいは製品そのものを変革し、日本の高効率・高生産性ものづくり産業の力にしていく材料発の革新に繋がる研究開発を進めていく。

### 薄層・高自由度設計の実現

世界中で航空機部品等の複合材化が拡大している中、汎用の自動化装置/使いやすい材料の普及により、誰でも一定の性能・品質の製品を製造できる時代になりつつある。また Low Cost Country(LCC)の台頭等で低コスト化が進み、同じ土俵では我が国はコスト競争に勝つことが困難になってきている。そこで、これまでの常識・基準にとらわれない材料/設計/製造技術の開発により、高性能/低コスト製造を達成する技術確立を行い、我が国の複合材技術の優位性を確保する必要がある。

従前の航空機部品等の複合材化では、材料面、設計面、製造面の制約があり、真のパフォーマンスを発揮できていなかった。これに対して、本研究では、これらの制約を取り払い、設計・製造面の自由度を高め、複合材の特性を真のパフォーマンスに近づけて高性能化することを目指す。

具体的には MI 手法を取り入れつつ、複合材料の幅を自由に变化させる可変開織技術、材料幅・板厚が連続的に変化するような複雑な構成を持つ複合材の最適設計技術、これらを自動化する製造技術などを確立し統合することで、過去に前例のない構造最適化と低コスト製造により、他国を凌駕し我が国の複合材技術の優位性を確保する。

実施方法を以下に示す。「材料技術」、「設計・解析技術」、「製造技術」の三本柱を産・学・官の連携により推進し、国際競争力のある軽量複合材設計・製造を目指す。また、軽量化による材料費低減、装置開発を含めた短時間製造により、低コスト化に対しても、優位性を狙うものとする。



<sup>1)</sup>\* 繊維束を薄く均一に広げる技術、<sup>2)</sup>\* 層ごとに破壊現象をシミュレーションする解析方法

複合材開発には、素材に適した装置や設計が必要となるため、材料、装置、機体メーカーの連携が必要である。海外メーカーに先行されている川中(装置)産業を育成し、川上から川下までを一気通貫することで、開発スピードを向上させ、我が国の複合材の国際競争力を強化し、ゲームチェンジを狙う。

材料・設計・製造を繋ぐ MI 技術(マルチスケール計算・最適設計技術)を活用し、複合材の最適設計・製造を目指す。材料製造、部材製造、部材性能評価の開発段階でフィジカルとサイバーの突合せを行い、技術的なスパイラルアップを行う。また必要となる部材性能をどういった材料・設計・製造で達成するかを解く逆問題解析アルゴリズムを構築する。

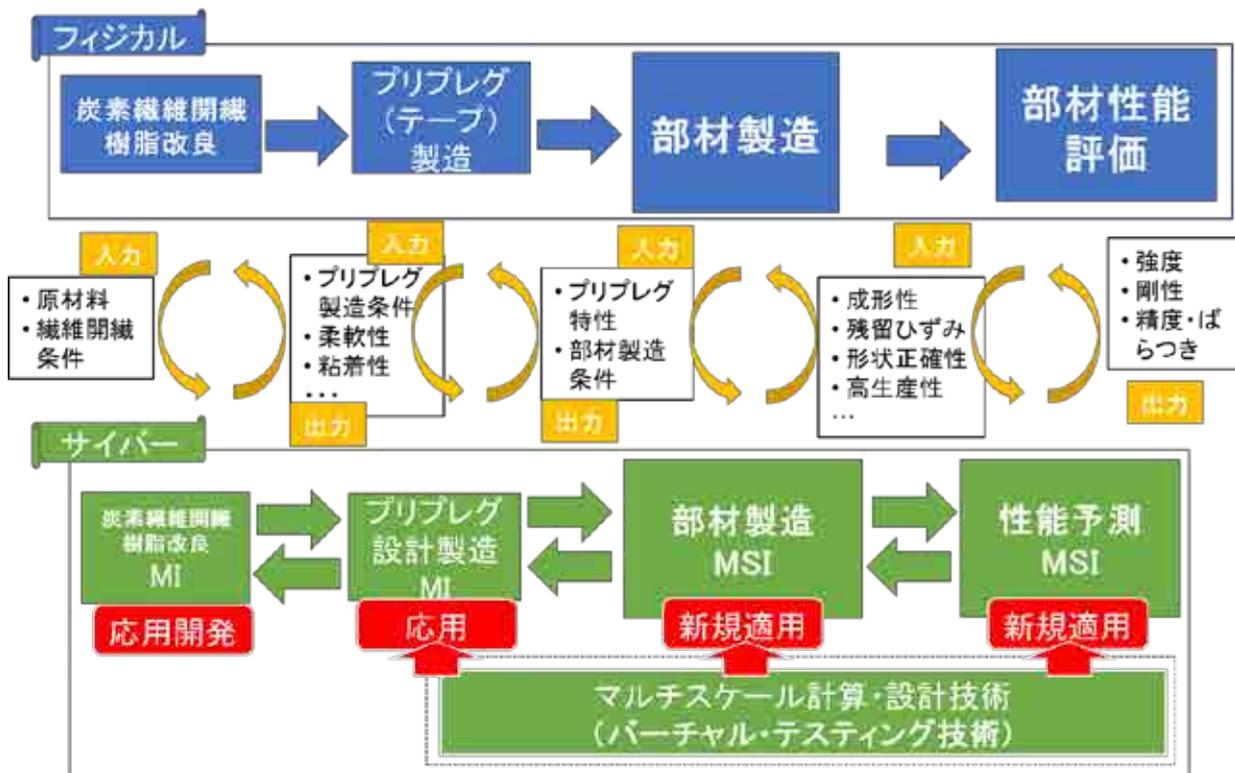


図 B-2 複合材料の設計自由度向上及び自動積層技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

**中間目標(2020 年度末時点の達成目標)**

- ・高分子系材料である炭素繊維複合材料の課題である樹脂硬化時収縮挙動、あるいは自動積層での強度・剛性、及び製造上の課題の整理と課題解決に向けた MI を活用した材料改善手法の方針設定
- ・最適設計・製造技術の開発 / MI 技術の実用化: 実証に向けた必要技術検討、小型要素レベルでの基本開発

**最終目標(2022 年度末時点)**

- ・複合材自動積層、及び高分子材料である複合材素材そのものの製品品質、製造性に拘る課題洗い出

し結果を基に MI を活用した材料改善スキーム明確化  
・最適設計・製造技術の開発 / MI 技術の実用化 : 大型要素・部分構造レベルでの検証、認証に向けた設計  
手法の標準化

## (B - 3) MIを活用した高強度・耐熱合金の造形プロセス開発 <チタン粉末3D 積層造形>

### 概要

金属粉末メーカー、造形メーカー、重工メーカー及び大学が粉末素材製造、積層造形、部材性能評価まで連携し研究開発を行い、国内での一貫生産が可能で世界的に競争力を持った Ti 部材積層造形部品の製造体制を築くことを目標に、以下の内容について、MI を活用した研究開発を実施する。

#### チタン合金の新規粉末製造プロセスの構築

素材製造プロセスの低コスト化のため、チタン粉末製造プロセスについて、最大の高コスト要因となっている原料コストの低減を目指す。本研究では原料製造の段階に新規のプロセスの導入や最適化を検討し、チタン合金粉末製造プロセスの構築を行う。

#### チタン合金積層造形プロセスの構築

新規の粉末は現状の高コストな粉末よりも粉末特性が異なる可能性がある。そのため積層造形プロセスにおいて必要な粉末特性について研究を実施し、新規粉末へのフィードバックを図りながら積層造形に適したプロセスを確立する。また積層造形においては、造形物に使用されなかった金属粉末のリサイクル法によって大きくコストが異なってくる。そのためリサイクルの影響についても研究を行い、競争力のあるチタン合金積層造形プロセスの構築を行う。

#### チタン合金積層造形部材の特性把握

実機適用を行うためには、部材特性の把握が必須である。そのため本プロジェクトにより開発されるプロセスにより製造された部材に対して、想定される部材に必要な特性評価を行う。得られた結果を粉末製造プロセスおよび造形プロセスにフィードバックを図る。

#### チタン合金積層造形部材のマイクロ組織の解明

一般的に、部材のマイクロ組織をコントロールすることにより特性コントロールを行うため、マイクロ組織と特性の関係を結びつけることが必要である。しかし積層造形で製造された部材は現行部材の大部分を占める鋳造、鍛造プロセスの部材とは大きく異なることが分かっており、コントロールに対する知見が少ない。そのため積層造形により形成されたマイクロ組織を解析を行い、特性との関係性を明らかにする。

の項目については新規粉末設計 MI 技術を開発し、これと連携を図ることにより、低コスト化粉末の特性評価を加速し、3D 積層造形プロセスへの反映を図っていく。

、の項目についてはMI 基盤で開発する共通的な3D 積層造形プロセス MI を、当該対象チタン合金粉末に適用し、特性評価や検査工程の効率化を図りつつ、開発現場で活用する方法を確立する。

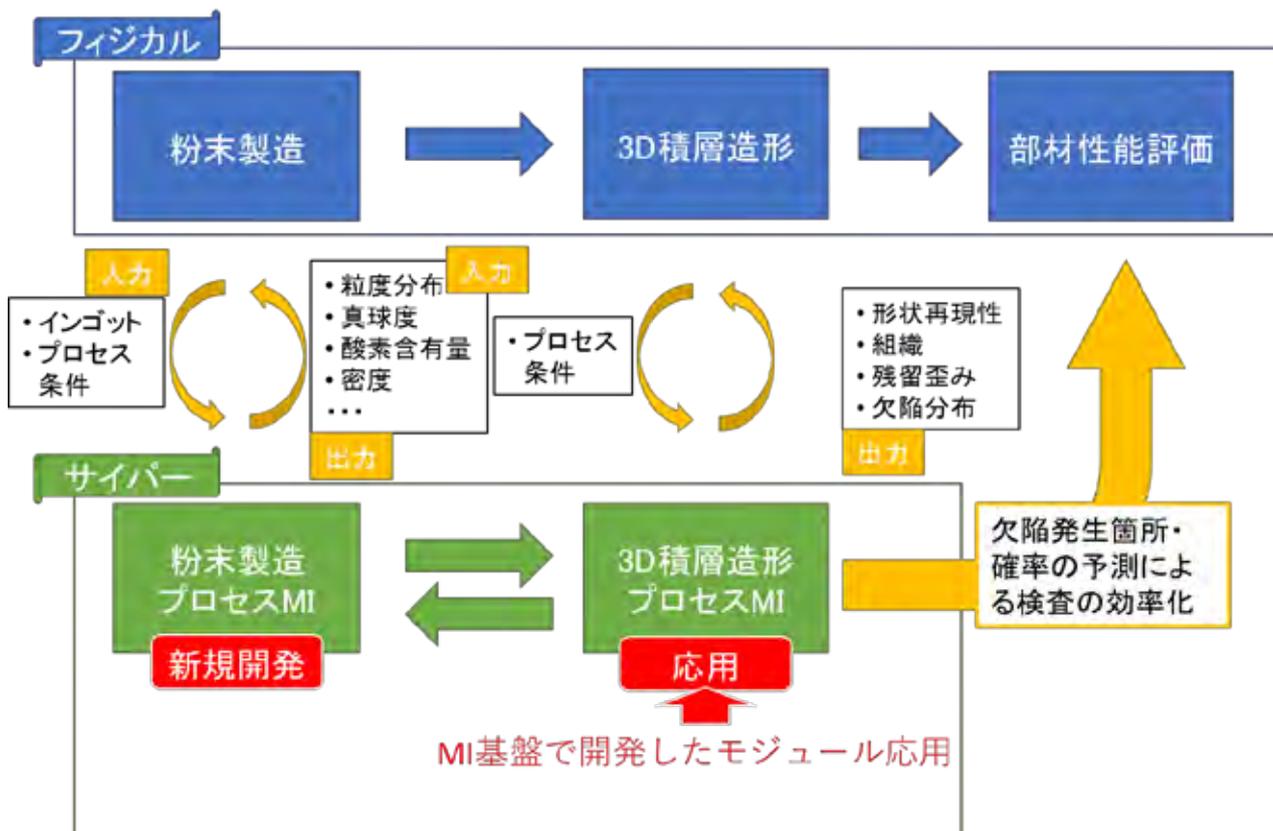


図 B-3 チタン粉末3D 積層プロセス技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

**中間目標(2020 年度末時点の達成目標)**

- ・新規 Ti 粉末製造プロセスの概念構築
- ・粉末リサイクルによる造形影響の把握
- ・積層造形品の特性簡易評価
- ・積層造形材の組織の定量評価

**最終目標(2022 年度末時点)**

- ・新規 Ti 粉末製造プロセスの実証
- ・新規 Ti 粉末を用いた積層造形プロセス実証
- ・新規 Ti 粉末積層造形品の性能評価
- ・積層造形材の組織コントロール指針の構築

## (B - 4) MIを活用した高強度・耐熱合金の造形プロセス開発 < ニッケル粉末3D 積層造形 >

### 概要

3D積層プロセス技術は、従来製法では製造できなかった三次元・複雑・精緻に設計された部品の製造を可能にする先端プロセスの一つである。3D積層プロセスがもたらすのは設計の革新だけでなく、材料物性についても3D積層プロセス特有の物性を示すことが知られており、その有効活用が期待されている。しかしながら、3D積層プロセス向けの材料探求、プロセス探求について、明確な手段は確立されていない。

また、Society 5.0 実現のため、温室効果ガス排出削減への要求が高まっており、発電用プラント、特に発電用のガスタービンにおいては、用いる燃料の多様化が検討されている。例えば、水素ガスを燃料として用いる場合には、Ni基耐熱合金からなる燃焼バーナーが、水素ガス特有の燃焼速度の速さ、燃焼温度の高さに対応する必要があるため、設計の複雑化、材料の高耐久化が今後益々求められる。

これらの要求に応える技術として、Ni粉末を用いた3D積層プロセスは最適な技術であり、材料探求、プロセス探求の指針となるMI技術を確立することは、我が国の競争力の源泉になるものと考えられる。

これらの状況に鑑み、MI基盤にて共通技術として開発する一貫予測技術を当該開発に活用し、3D積層プロセスにて造形されたNi基耐熱合金の材料物性に関する予測技術の確立を目指す。これら予測技術を基に、MI基盤で開発する逆問題解析技術等を活用することで、必要とする部品の性能から、これに適合する合金やプロセス条件を設計できる技術の確立を目指す。

さらに、我が国が有するNi基耐熱合金に関するバックグラウンドを活用しつつ、3D積層プロセスにおける急冷凝固に対応した非平衡状態図予測技術を新規に開発することで、3D積層プロセス特有の非平衡合金設計MI技術を確立する。非平衡合金設計MI技術を当該開発における合金提案・プロセス決定に活用するとともに、SIP終了後は当該分野における我が国の差別化技術とする。

これらのサイバー空間におけるMI予測技術は、フィジカル空間での材料選定、製造プロセス開発へと応用される。大学等がサイバー/フィジカルのつなぎの役目を担い、企業における部品製造へと橋渡しする。参画企業には3D積層プロセス装置等を設置し、燃焼バーナー部品の要求特性にマッチした材料選定を行うとともに、部品としての製造プロセス、部材評価技術の確立に注力する。そして、当該開発の最終目標として、燃焼バーナーの高性能化を実証する。

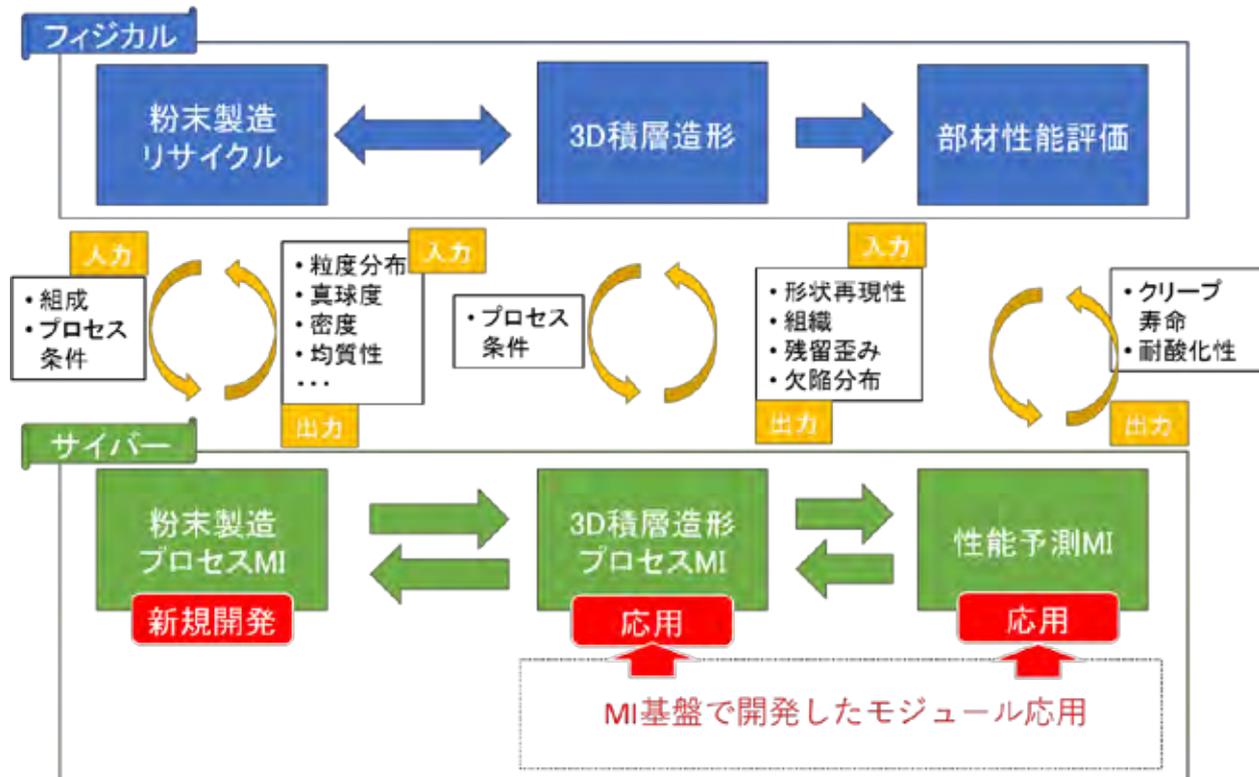


図 B-4 ニッケル粉末3D 積層プロセス技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

#### 中間目標(2020 年度末時点の達成目標)

- ・3D積層プロセス用非平衡合金設計に関するMI技術の確立
- ・3D積層プロセスにより製造された部品を用いた燃焼試験の実施

#### 最終目標(2022 年度末時点)

- ・MI技術の成果を用いた新規Ni基耐熱合金の製造実証
- ・燃焼バーナー高性能化の実証

## (B - 5) MIを活用した高強度・耐熱合金の造形プロセス開発 < ニッケル粉末鍛造 >

### 概要

民間用航空機エンジンのディスク材には、高温強度と製造性および信頼性に優れた IN718 や Waspaloy などの高強度 Ni 基鍛造材が用いられてきたが、燃焼温度の向上に対応するため特に使用環境が厳しい高圧タービンのディスク材には粉末を原料とした Ni 基ディスク材(以下 PM ディスク材と称す)が適用されており、今後も適用拡大が進むと予想される。PM ディスク材は、高真空中および不活性ガス中で製造される高品質な粉末を圧力下での焼結や高温での超塑性加工によってディスク形状に加工するものであり、Ni 粉末を用いた焼結部材がその他の部品や金型にも使われている。また、近年は、高温強度に優れた PM ディスク材は高性能な航空機エンジンでは不可欠なものとなりつつあるが、特殊かつ高度な技術を必要とするため、コストが高く欧米の限られたメーカー以外での製造は困難である。本研究では、国内に潜在する粉末製造技術と高強度 Ni 基合金の鍛造技術を融合し高度化することで欧米プロセスを凌駕する低コストな純国産プロセスを開発し実機適用を目指す。

本研究では、PM ディスク材の主要プロセスである粉末製造、ブレッティングおよびニアネット鍛造プロセスについて、国内の既存設備を用いた低コストプロセスを MI を活用して開発する。プロセスの低コスト化に加えて粉末製造プロセスでの複製粉末を金型、航空機エンジンや産業用ガスタービンの静止部材等に適用することによる低コスト化も検討する。これにより、製造コストを 2/3 以下としながら、従来プロセス材と同等以上の性能を確保することを目標とする。

前期3年間(2018～2020)は以下の ～ を実施することで模擬部材による技術の確立と実証を完了させる。対象材料は、最新の中型民間エンジンに適用されている材料および国産材料とする。その他、比較材として必要に応じて軍用エンジン用 PM ディスク材や PM ディスク材と同等レベルの溶解鍛造材の試作評価も実施する。後期の2年間で下記の ～ を実施し実機形状部品の製造および評価を進め、実用化を目指す。

### 【実施項目の例】

粉末製造・分級技術確立      キャニング&HIP技術確立      ブレット鍛造技術の確立  
ニアネット鍛造成形技術の確立      評価手法の調査・検討      金型材の開発・補修技術確立  
実機模擬材試作・評価      中小型民間機高圧ディスク等試作      認証取得データ採取開始、MI 高度化  
小型機高圧ディスク等試作      認証取得データ採取開始、MI 高度化      次世代民間機等適用検討

本研究では、当該プロセスの基礎技術を有する民間企業がフィジカル面を、MI 技術の研究で実績のある大学あるいは国研がサイバー面を取り纏める。フィジカル面に複数の航空機エンジンメーカーが参画し、開発目標の設定および開発技術の評価を行う。

多岐にわたる製造工程を対象としているが、粉末プロセスの重要課題である旧粒子界面組織の効率的な除去のための MI 技術を新規開発の対象とする。ここでは、ブレッティングにおける高温変形中の組織変化の予測技術が鍵となり、初期は、従来同様、実験をベースにしたブレッティング条件の探索を行いつつ、ここで得られるデータを基に、MI 技術を確立していく。後半では、確立した MI 技術を活用し、MI 基盤で開発した逆問題解析技術を導入することで、ブレッティング条件のさらなる最適化を行い、逆問題に対応したビ

レッティングプロセス MI 技術を確立し、SIP 後の開発に活用できるようにする。加えて、他の工程についても、MI 基盤で開発される共通的な MI 技術の適用を積極的に行い、効率的な開発プロセスの確立を目指す。具体的には、粉末焼結プロセス、ニアネット鍛造において、MI 基盤の開発成果を活用し、複数の開発工程をつなげるためのワークフロー技術を開発する。その上で、MI を活用した開発時間の効率化を検討する。

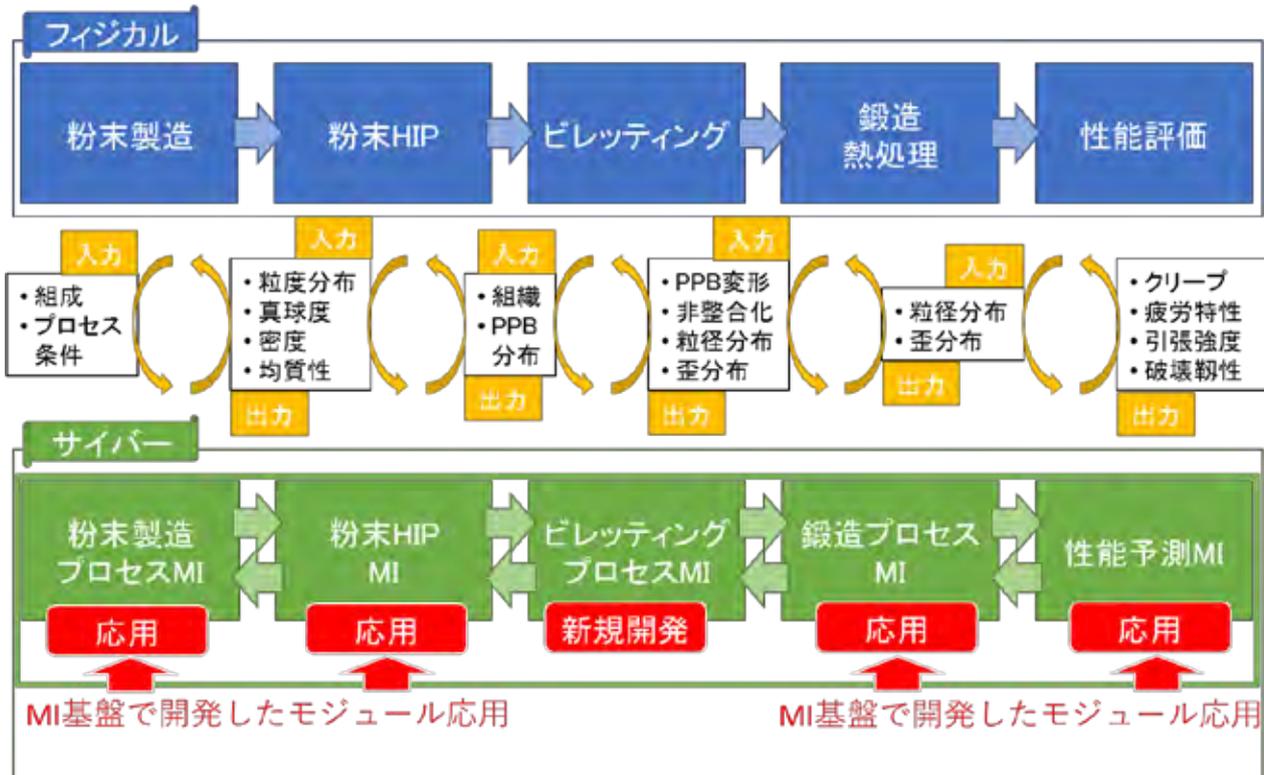


図 B-5 ニッケル粉末鍛造技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

【中間目標(2020 年度末時点の達成目標)】

- ・海外 PM ディスク材および国産 PM ディスク材について中型民間機エンジン模擬部品の試作完了
- ・上記模擬部品の破壊調査において航空機エンジンメーカーが決定する力学特性目標以上の特性を獲得

【最終目標(2022 年度末時点)】

- ・国産開発プロセスにより海外中型民間機高圧タービンディスクの試作を完
- ・上記試作ディスクの破壊調査において力学特性目標およびコスト目標を達成し、航空機エンジンメーカーに実用化に向けた検討を開始
- ・小型機エンジン部品について国産 PM ディスク材を用いた試作を完了
- ・上記試作材の破壊調査において小型機エンジンメーカーが設定する力学特性目標およびコスト目標を達成し、国産プロセスによる国産材の次世代航空機エンジンへの適用検討を開始

## (B - 6) MIを活用した高強度・耐熱合金の造形プロセス開発 <チタンアルミ粉末射出成形>

### 概要

比強度と耐熱性に優れた金属間化合物 TiAl は航空エンジンの低圧タービンブレード材料として期待されており、B787 用エンジンの GEnx、A320neo 用エンジン PW1100G で実用化段階にある。それらの製造は、鋳造材もしくは鍛造材の削り出しであり、歩留まりの低さと削り出し工程の存在がブレード部品高コストの要因の一つと言われ、問題視されている。

一方、金属射出成形(MIM: Metal Injection Molding)は小型金属部品の量産において、低コスト製造方法として注目を集めている。MIM の特徴は、ネットシェイプによる部品製造であり、これをブレード部品の製造に応用すれば翼面削り出し工程を省いた低コスト製造の可能性がある。

そこで、MIM 技術を活用しての低コスト TiAl ブレード製造が考えられた。しかしながら、TiAl は本質的に脆性材料であり、低い破壊靱性値の克服が課題の一つである。さらに、MIM プロセスを経ることにより、材料中の酸素等成分の増加により、さらに破壊靱性値が低下することが危惧される。これらの課題・危惧に対して、酸素等の成分が存在しても破壊靱性値を高く保つことが出来る材料組成・相構成、組織形態の決定、高品位/低コストの MIM 用 TiAl 鋳塊製造、MIM プロセス中の酸素等混入を低減する製造パラメータの設定が必要となる。

本研究開発は、これらの課題解決のために、従来の実験手法中心の材料開発とは異なり、MI 技術を活用して、合金設計・性能予測シミュレーション、プロセスパラメータの最適化を目指すものである。

実際の低圧タービンブレードは、長手方向に 200mm 以上あり、従来 MIM 技術では製造が困難とされている大型部材である。ここで課題となるのは、MIM 大型構造物の変形制御である、この課題解決のために、MI 技術を活用した射出・焼結のシミュレーション技術を活用したプロセスの設定を行う。

TiAl の材料開発としては、エンジンの性能向上/耐熱性向上に応じた、より耐熱性に優れた材料組成の探求が志向されている。粉末由来の MIM では鍛造・鋳造と比べ組成制約が無く、自由な組成設計が可能である。その利点を生かし、MI 技術を活用して高温特性の優れた MIM 用 TiAl 合金の設計を行う。

### 【MI 技術の活用】

本研究開発の課題は以下の4点である。これらの解決に MI を活用する。

靱性向上のための MIM 用材料組成・相構成・組織形態の決定

高品位/低コストの MIM 用 TiAl 鋳塊製造技術の開発

靱性向上のための MIM プロセス最適化

MIM 大型構造物の変形制御

高温特性向上のための MIM 用材料組成・相構成・組織形態の決定

、 の課題解決には、合金設計及び性能予測技術を活用、 のプロセス最適化には AI 等を活用したデータ科学の活用、 の変形制御には各種シミュレーション技術を活用する。このうち、TiAl 固有の技術として、合金設計・性能予測について、当該分野において世界的な強みを有する大学のノウハウをさらに高度化し、これを活用することで開発を加速する。

加えて、MIM プロセスについて、MI 基盤で共通技術として開発されるデータ科学に基づく逆問題解析技

術を活用して、プロセス最適化を試みるとともに、当該技術を MIM メーカー自身が使いこなすことができるように技術移転を進める。さらに、MIM 変形制御については、MI 基盤で開発する粉末焼結プロセス MI 技術を活用して、変形制御のための焼結プロセス最適化技術を確立し、実部材開発に応用する。

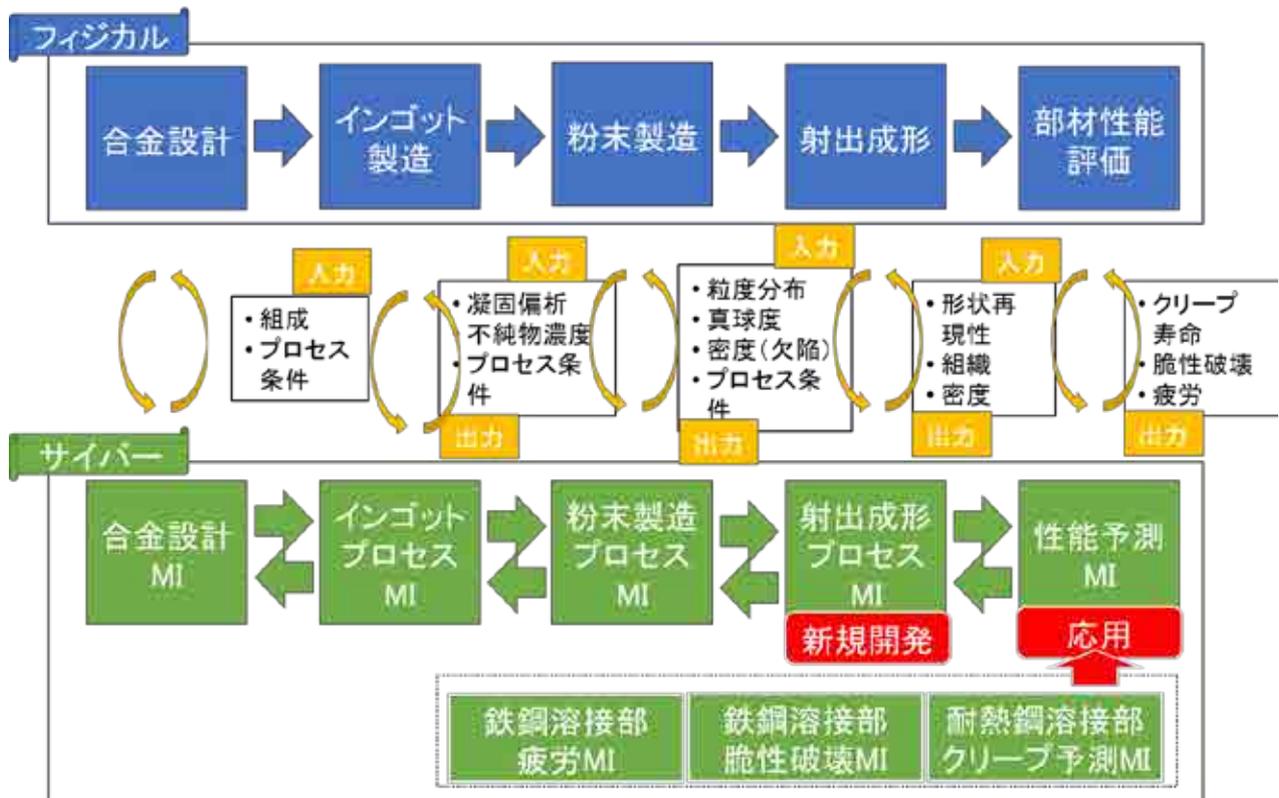


図 B-6 チタンアルミ粉末射出成形技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

**中間目標(2020 年度末時点の達成目標)**

- ・低圧タービンプレード用 TiAl 素材特性として要求される従来よりも高い破壊靱性を持つ MIM 材料組成の決定と組織制御に必要な熱処理プロセスの設定
- ・従来よりも高い破壊靱性を持つ TiAl の鋳塊製造・MIM 製造プロセスを MI を活用して最適化
- ・低圧タービンプレードに必要となる従来よりも良い形状精度を持つ TiAl ブレード形状保持プロセスの設定

**最終目標(2022 年度末時点)**

- ・低圧タービンプレード用 TiAl 試作翼を用いた実証試験による実翼強度成立性確認

## (B-7) MIを活用したセラミック基複合材料の信頼性評価技術の開発

### 概要

#### 概要

高温下での長期使用に耐える新素材として、SiC繊維強化SiCマトリックス複合材料(セラミック基複合材料:CMC)の開発が行われてきた。CMCの実用化は急速に進展しており、発電用ガスタービン用材料や原子力用材料としても応用が期待されている。航空機分野ではジェットエンジンの高温用計量部材として、実用化が進められている。だが、部材の信頼性確保は大きな問題として残されており、その確立は国際的優位性確保に欠かせない。

CMCの信頼性には製造時と使用時の特性が影響する。まず、素材を二次加工して部材を製造する金属材料とは大きく異なり、部材中の構造(形状のみならず繊維の体積率や分布)が、素材製造時に固定されるが、製造時点での微妙な構造の差が性能に大きく影響することが知られている。そのため、製造プロセスをその過程での繊維特性変化や、欠陥発生(ポア、クラック)を考慮した上で、より精密に決定する必要がある。また、損傷許容性と呼ばれる特徴があり、損傷(クラック等)を材料中に蓄積しながら利用される。この振舞いもクラックが破断に直結する金属材料とは大きく異なることから、これまでと質的に異なる検査基準が必要となる。

上述の特性に起因する困難性の解決に向け、本研究ではCMCの振舞いを計算機上で高精度にシミュレートする環境を実現する。この環境をバーチャルテストと呼び、その活用で部材設計における材料探索のターンアラウンドタイムの大幅な改善、損傷許容性を考慮したCMC部材の評価手法を実現する。

この取り組みは、MIのコンセプトをCMC部材に対して実装・具現化することに相当し、関連産業の国際競争力の大幅な向上が期待される。

MIをCMCの研究開発に利用するための基礎・基盤となるモジュールを開発し、その組み合わせによってバーチャルテストシステムの構築を行い、最終的にはバーチャルテストの最適部材設計への適用、CMCの検査手法の開発を目指す。

開発するモジュールは次の4種を検討する。

#### 複合化組織・深層学習モジュール

試験後の組織画像(マイクロ～マクロのCMC組織やCMCのCT像)を入力とし、深層学習によって損傷の分布や構造を把握する。また材料試験結果とシミュレーションの結果を照合し、より材料試験結果に近いシミュレーションを実現できるように、シミュレーターで用いるパラメーターの自動調整を行う。

#### 力学特性予測モジュール

CMCを長時間応力環境に置いた場合の劣化や損傷を求めるシミュレーターを開発する。劣化や損傷を予測することで、CMC材料の品質評価や信頼性確保に利用する技術に関する検討を行う。

#### 耐久性・寿命予測モジュール

高温応力下での材料試験結果を室温応力下での材料試験結果と比較し、高温応力環境におけるCMC材料の劣化や損傷を予測するシミュレーターを実現する。

#### 最適構造設計モジュール

材料に要求される特性を起点として逆問題を解き、最適な複合化構造を得るためのモジュールを開発

する。特に、使用時の損傷や劣化を考慮し、製造条件最適化の検討をすることを可能とする。

また、以上のモジュールを実現するために、いくつかの異なる CMC を調達し、それらに対して材料試験を行うことでシミュレーターで利用されるパラメーター抽出を行う。

高温熱サイクル下での劣化現象については、これらの試験は従来手法では多くの時間と手間が必要であるため、加速試験可能な評価装置を新規に導入することで、長時間使用環境に置かれた場合の損傷や劣化の推定を短時間で取得できる環境を用意する。国際的にも欧米(特に米国)では同様の加速試験が進められているが、国際的にも最新の装置を導入し、多くの事例に対して、より現実に即したシミュレーションを実現する。

モジュールの統合によって実現されるバーチャルテストは、部材設計システムと連携して用いられる。また、バーチャルテストと材料試験を併用した、非破壊検査手法の開発が行われる。

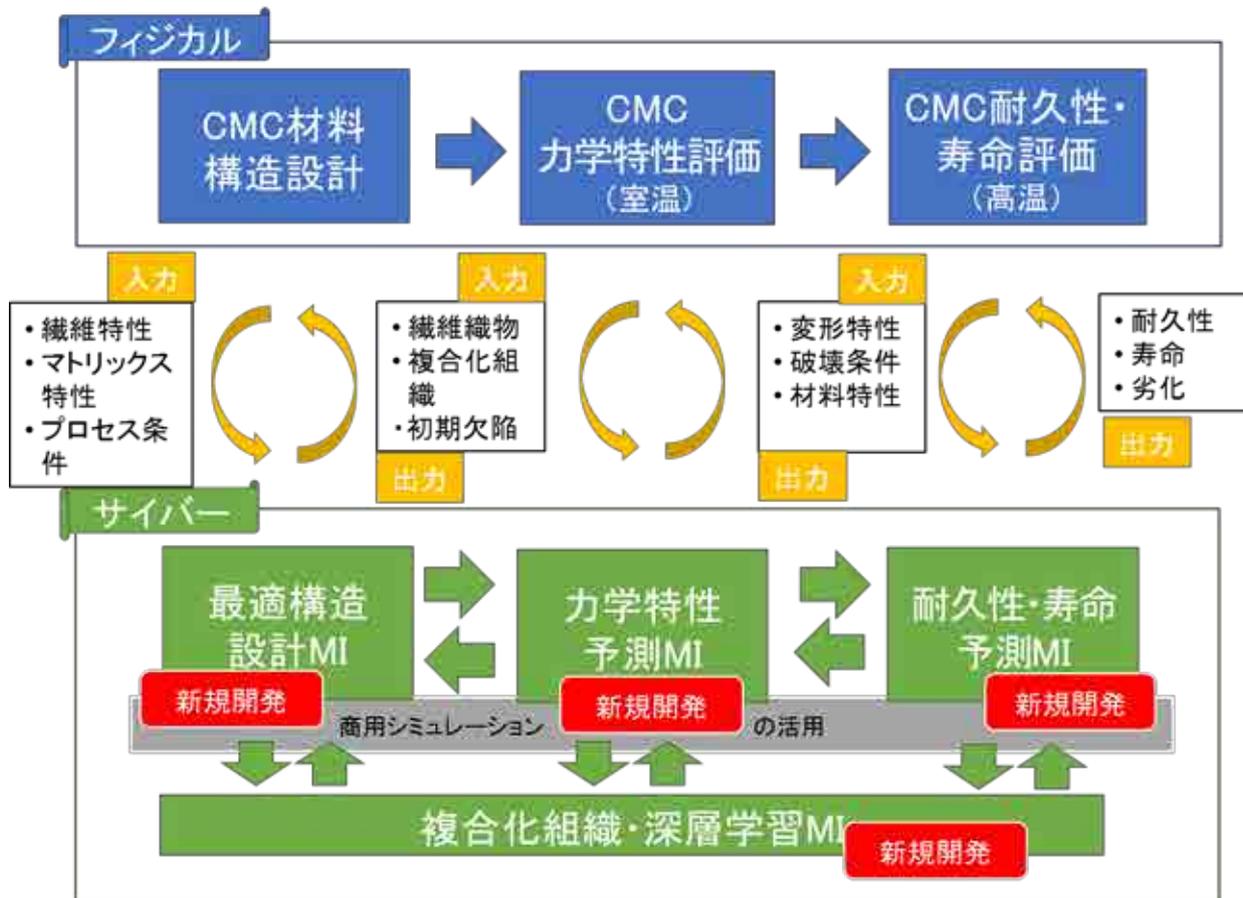


図 B-7 セラミック基複合材料の部材性能評価技術の開発におけるフィジカルとサイバーの融合

中間目標(2020年度末時点の達成目標)

- ・CMCに必要な性能に応じた材料最適設計及び材料性能のバーチャルテストを行うための 複合化組織・深層学習モジュール、力学特性予測モジュール、の基本構成が完成していること
- ・各モジュールの入力データやモジュールの妥当性を検証することが可能な CMC に関する最小限のデータ取得方法が整備されていること。

#### **最終目標(2022年度末時点)**

- ・耐久性・寿命予測モジュールが完成し、高温環境におけるバーチャルテストを実現
- ・バーチャルテストを逆問題に使用する 最適構造設計化モジュールを実行でき、試験評価の実験に要する時間の短縮や研究開発期間の短縮が可能なレベルに達していること
- ・開発したバーチャルテストシステムが CMC の検査にも利用できることが証明されていること

### 3. 実施体制

#### (1) 科学技術振興機構の活用

本件は、国立研究開発法人科学技術振興機構(以下、「JST」という。)への交付金を活用して実施する。JSTは、PDや推進委員会を補佐し、研究開発の進捗管理、自己点検の事務の支援、評価用資料の作成、関連する調査・分析などを行う。

#### (2) 研究責任者の選定

JSTは、本計画に基づき、研究課題、および研究課題を実施する研究責任者を公募により選定する。選考に当たっての審査基準や審査員等の審査の進め方は、JSTがPD及び内閣府及び推進委員会と相談したうえで、決定する。審査には原則としてPD及び内閣府の担当官、外部有識者が参加する。応募課題に参加する研究者の利害関係者は当該課題の審査には参加しない。利害関係者の定義はJSTが定める公募要領に明記するものとする。選考により研究課題が決まった後、本計画に研究課題、および研究主体、研究参加者を記載する。

#### (3) 研究体制を最適化する工夫

内閣府は、研究課題の進捗状況、および関係機関等で実施する技術調査等の調査結果や、社会情勢の変化に応じ、PDの判断で柔軟に研究体制を変化、対応させていく。具体的には、研究課題の変更、追加、研究責任者の入れ替え、追加等を検討していく。人事交流、設備共有の活発化、人材育成、持続的研究の推進を図るために、大学、国立研究開発法人、企業等が連携するための研究開発拠点を構築する。

サブPDは、出口・知財戦略、材料科学、府省・産学官連携についてPDを補佐するとともに、担当研究開発項目領域における研究開発の推進につきPDを補佐する。

各研究開発領域に産学双方からコリーダーを設置し、産学の緊密な協力のもと領域内外の連携を図り、シンポジウム開催等を通じて、領域の活動を発信する。JSTは、拠点形成・ネットワーク事務局を設置して、各領域に連携コーディネータを派遣し、領域長の活動を支援するとともに、参画機関のネットワーク構築を図る。

#### (4) 府省連携

MIを活用し開発した最先端材料を材料メーカー・重工メーカー等に橋渡しを行うに当たり、経済産業省等と緊密に連携するとともに、文部科学省及び経済産業省等の関連する事業等との連携を推進する。

#### (5) 産業界からの貢献

今後の産業界からの貢献については、現在、検討中であり、研究開発計画を策定するまでに記載する予定。

### 4. 知財に関する事項

#### (1) 知財委員会

課題または課題を構成する研究項目ごとに、知財委員会を管理法人等または選定した研究責任者の所属機関(委託先)に置く。

知財委員会は、それを設置した機関が担った研究開発成果に関する論文発表及び特許等(以下「知財権」という。)の出願・維持等の方針決定等のほか、必要に応じ知財権の実施許諾に関する調整等を行う。

知財委員会は、原則として PD または PD の代理人、主要な関係者、専門家等から構成する。知財委員会の詳細な運営方法等は、知財委員会を設置する機関において定める。

## (2) 知財権に関する取り決め

管理法人等は、秘密保持、バックグラウンド知財権(研究責任者やその所属機関等が、プログラム参加前から保有していた知財権及びプログラム参加後に SIP の事業費によらず取得した知財権)、フォアグラウンド知財権(プログラムの中で SIP の事業費により発生した知財権)の扱い等について、予め委託先との契約等により定めておく。

## (3) バックグラウンド知財権の実施許諾

他のプログラム参加者へのバックグラウンド知財権の実施許諾は、知財権者が定める条件に従い(あるいは、「プログラム参加者間の合意に従い」)、知財権者が許諾可能とする。

当該条件などの知財権者の対応が、SIP の推進(研究開発のみならず、成果の実用化・事業化を含む)に支障を及ぼすおそれがある場合、知財委員会において調整し、合理的な解決策を得る。

## (4) フォアグラウンド知財権の取扱い

フォアグラウンド知財権は、原則として産業技術力強化法第 19 条第 1 項を適用し、発明者である研究責任者の所属機関(委託先)に帰属させる。

再委託先等が発明し、再委託先等に知財権を帰属させる時は、知財委員会による承諾を必要とする。その際、知財委員会は条件を付すことができる。

知財権者に事業化の意志が乏しい場合、知財委員会は、積極的に事業化を目指す者による知財権の保有、積極的に事業化を目指す者への実施権の設定を推奨する。

参加期間中に脱退する者に対しては、当該参加期間中に SIP の事業費により得た成果(複数年度参加の場合は、参加当初からの全ての成果)の全部または一部に関して、脱退時に管理法人等が無償譲渡させること及び実施権を設定できることとする。

知財権の出願・維持等にかかる費用は、原則として知財権者による負担とする。共同出願の場合は、持ち分比率、費用負担は、共同出願者による協議によって定める。

## (5) フォアグラウンド知財権の実施許諾

他のプログラム参加者へのフォアグラウンド知財権の実施許諾は、知財権者が定める条件に従い(あるいは、「プログラム参加者間の合意に従い」)、知財権者が許諾可能とする。

第三者へのフォアグラウンド知財権の実施許諾は、プログラム参加者よりも有利な条件にはしない範囲で知財権者が定める条件に従い、知財権者が許諾可能とする。

当該条件などの知財権者の対応が SIP の推進(研究開発のみならず、成果の実用化・事業化を含む)に支障を及ぼすおそれがある場合、知財委員会において調整し、合理的な解決策を得る。

## (6) フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転の承諾について

産業技術力強化法第 19 条第 1 項第 4 号に基づき、フォアグラウンド知財権の移転、専用実施権の設定・移転には、合併・分割による移転の場合や子会社・親会社への知財権の移転、専用実施権の設定・移転の場合等(以下、「合併等に伴う知財権の移転等の場合等」という。)を除き、管理法人等の承認を必要とする。

合併等に伴う知財権の移転等の場合等には、知財権者は管理法人等との契約に基づき、管理法人等の承認を必要とする。

合併等に伴う知財権の移転等の後であっても管理法人は当該知財権にかかる再実施権付実施権を保有可能とする。当該条件を受け入れられない場合、移転を認めない。

## (7) 終了時の知財権取扱いについて

研究開発終了時に、保有希望者がいない知財権等については、知財委員会において対応(放棄、あるいは、管理法人等による承継)を協議する。

## (8) 国外機関等(外国籍の企業、大学、研究者等)の参加について

当該国外機関等の参加が課題推進上必要な場合、参加を可能とする。

適切な執行管理の観点から、研究開発の受託等にかかる事務処理が可能な窓口または代理人が国内に存在することを原則とする。

国外機関等については、知財権は管理法人等と国外機関等の共有とする。

## 5. 評価に関する事項

### (1) 評価主体

PD と JST 等が国内外からのピアレビューも踏まえて行う自己点検結果の報告を参考に、ガバニングボードが外部の専門家等を招いて行う。この際、ガバニングボードは分野または課題ごとに開催することもできる。なお、外部からの評価等を受ける際は、情報流出等に細心の注意を払う。

### (2) 実施時期

事前評価、毎年度末の評価、最終評価とする。

終了後、一定の時間(原則として 3 年)が経過した後、必要に応じて追跡評価を行う。

上記のほか、必要に応じて年度途中等に評価を行うことも可能とする。

### (3) 評価項目・評価基準

「国の研究開発評価に関する大綱的指針(平成 28 年 12 月 21 日、内閣総理大臣決定)」を踏まえ、必要性、効率性、有効性等を評価する観点から、評価項目・評価基準は以下のとおりとする。評価は、達成・未達の判定のみに終わらず、その原因・要因等の分析や改善方策の提案等も行う。

意義の重要性、SIP の制度の目的との整合性。

目標(特にアウトカム目標)の妥当性、目標達成に向けた工程表の達成度合い。  
適切なマネジメントがなされているか。特に府省連携の効果がどのように発揮されているか。  
実用化・事業化への戦略性、達成度合い。  
最終評価の際には、見込まれる効果あるいは波及効果。終了後のフォローアップの方法等が適切かつ明確に設定されているか。

#### (4) 評価結果の反映方法

事前評価は、次年度以降の計画に関して行い、次年度以降の計画等に反映させる。  
年度末の評価は、当該年度までの実績と次年度以降の計画等に関して行い、次年度以降の計画等に反映させる。  
最終評価は、最終年度までの実績に関して行い、終了後のフォローアップ等に反映させる。  
追跡評価は、各課題の成果の実用化・事業化の進捗に関して行い、改善方策の提案等を行う。

#### (5) 結果の公開

評価結果は原則として公開する。  
評価を行うガバニングボードは、非公開の研究開発情報等も扱うため、非公開とする。

#### (6) 自己点検

##### 研究責任者による自己点検

PD が自己点検を行う研究責任者を選定する(原則として、各研究項目の主要な研究者・研究機関を選定)。  
選定された研究責任者は、5.(3)の評価項目・評価基準を準用し、前回の評価後の実績及び今後の計画の双方について点検を行い、達成・未達の判定のみならず、その原因・要因等の分析や改善方策等を取りまとめる。

##### PD による自己点検

PD が研究責任者による自己点検の結果を見ながら、かつ、必要に応じて第三者の意見や国内外の専門家によるピアレビュー等を参考にしつつ、5.(3)の評価項目・評価基準を準用し、PD 自身、科学技術振興機構及び各研究責任者の実績及び今後の計画の双方に関して点検を行い、達成・未達の判定のみならず、その原因・要因等の分析や改善方策等を取りまとめる。その結果をもって各研究主体等の研究継続の是非等を決めるとともに、研究責任者等に対して必要な助言を与える。これにより、自律的にも改善可能な体制とする。外部からの評価等を受ける際は、情報流出等に細心の注意を払う。

これらの結果を基に、PD は科学技術振興機構の支援を得て、ガバニングボードに向けた資料を作成する。

##### 管理法人による自己点検

科学技術振興機構による自己点検は、予算執行上の事務手続を適正に実施しているかどうか等について行う。

## 6. 出口戦略

### (1) 出口指向の研究推進

逆問題に対応する次世代 MI システムの実装・産業界による利用。

MI の適用例として産業用発電プラントや航空機機体・エンジン等の最先端材料・プロセスを想定し、材料/重工メーカーと連携して成果を実装。

### (2) 普及のための方策

逆問題に対応した MI システムの利活用のための拠点を構築し、材料メーカーや重工メーカー等の利活用を促進するとともに、事業終了を待たず積極的な普及啓発活動を推進。

産業用ガスタービン等環境・エネルギー分野、航空機分野、生体向け材料等波及が期待される各分野に応じ、標準化・企画化・評価手法やその認定手法の策定、認証取得等を推進。材料メーカー・重工メーカーが成果を設計・製造分担の獲得につなげ、開発素材の利用を促進。

## 7. その他の重要事項

### (1) 根拠法令等

本件は、内閣府設置法(平成 11 年法律第 89 号)第 4 条第 3 項第 7 号の 3、科学技術イノベーション創造推進費に関する基本方針(平成 26 年 5 月 23 日、総合科学技術・イノベーション会議)、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)第 2 期(平成 29 年度補正予算措置分)の実施方針(平成 30 年 3 月 29 日、総合科学技術・イノベーション会議)、戦略的イノベーション創造プログラム運用指針(平成 26 年 5 月 23 日、総合科学技術・イノベーション会議ガバニングボード)に基づき実施する。

### (2) 弾力的な計画変更

本計画は、成果を最速かつ最大化させる観点から、臨機応変に見直すこととする。

### (3) PD 及び担当の履歴

PD



岸 輝雄 (2018 年 4 月 ~)