

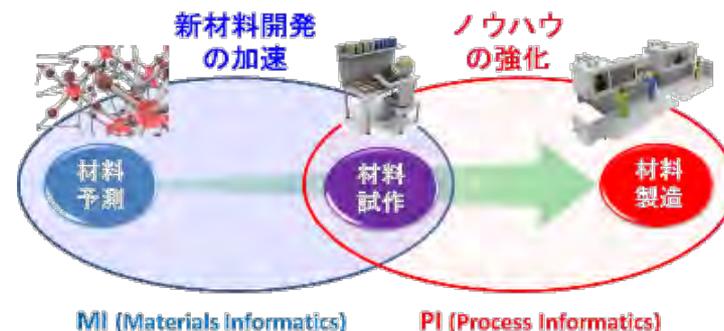
製造プロセス技術と データ科学の融合

国立研究開発法人 産業技術総合研究所

副理事長 村山 宣光

データ駆動型材料開発の取り組み

- データ駆動型材料開発をより加速するためには、材料予測から試作をおこなうマテリアルズ・インフォマティクス（MI）だけでなく、材料試作から製造をカバーするプロセス・インフォマティクス（PI）の技術開発が必要であり、MIとPIの両輪によってマテリアルイノベーションは実現される



【産総研におけるデータ駆動型材料開発の取り組み】

MI基盤技術、シミュレータの開発

- **NEDO超超PJ** (2016~2021)
MIとシミュレーション融合させ、革新的な機能性材料の創成・開発の加速化を目指す
- **データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム** (2022~)
NEDO超超PJにより培われたデータ、シミュレータ等の活用を推進

PI技術の開発のための基盤整備

- ① **マテリアル・プロセスイノベーション（MPI）プラットフォーム** (2022~)
製造装置群や分析・評価装置群を産総研地域センターに導入し、データ駆動型の研究開発が出来るプラットフォームを整備する
- ② **先端計算科学等を活用した新規機能性材料合成・製造プロセス開発事業** (2022~)
機能性化学品やファインセラミックスについて、データ科学を用いたPI技術を確立し、合成・製造プロセス開発を推進

人材育成・連携構築等

- 材料研究者へのデジタル教育の推進
- 領域間融合によるデータ利用基盤技術の開発
- シミュレーション、機械学習でのABCIの活用

① MPIプラットフォーム概要

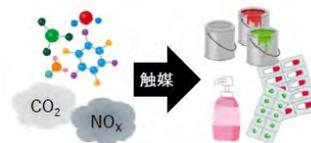
- 中小、ベンチャーも活用できるデータ駆動型製造プロセス開発のプラットフォームを整備（R2年度補正予算）。
- 機能性化学品、創薬、セラミックス・合金、有機・バイオ素材等の重点領域について、原料から部素材に至るまでのプロセス全体を一気通貫で開発、分析・評価設備と連動したプロセスデータの収集が可能。
- 企業等が抱える製造プロセスの課題解決、専門人材の育成を実施。

1. 中小・ベンチャー企業等支援



先進触媒拠点（つくば）

触媒調整や触媒性能評価のハイスループット化、インフォマティクス活用による合成技術等。例、機能性化学品、創薬開発等。



セラミックス・合金拠点（中部）

自動車や航空宇宙機器等のモビリティ材料等に用いられるセラミックスや合金等について、原料となる粉体合成から部素材に至るまでのプロセス開発やインフォマティクスの活用。

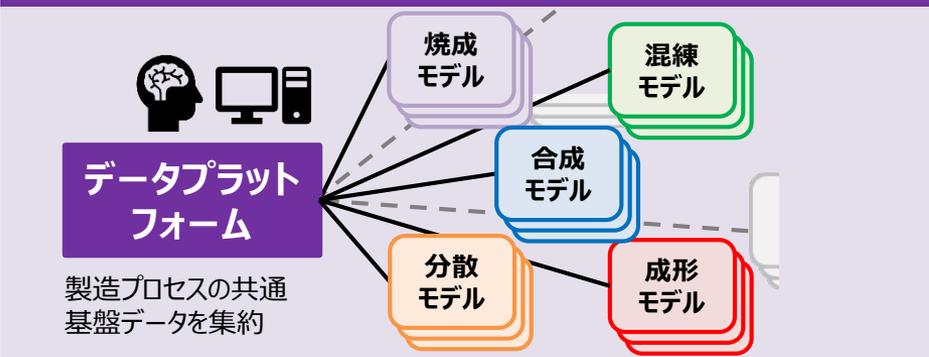


有機・バイオ材料拠点（中国）

環境低負荷な有機・バイオ材料の各種原料の調整から成形加工までの一気通貫プロセス開発。



2. データ駆動型研究開発

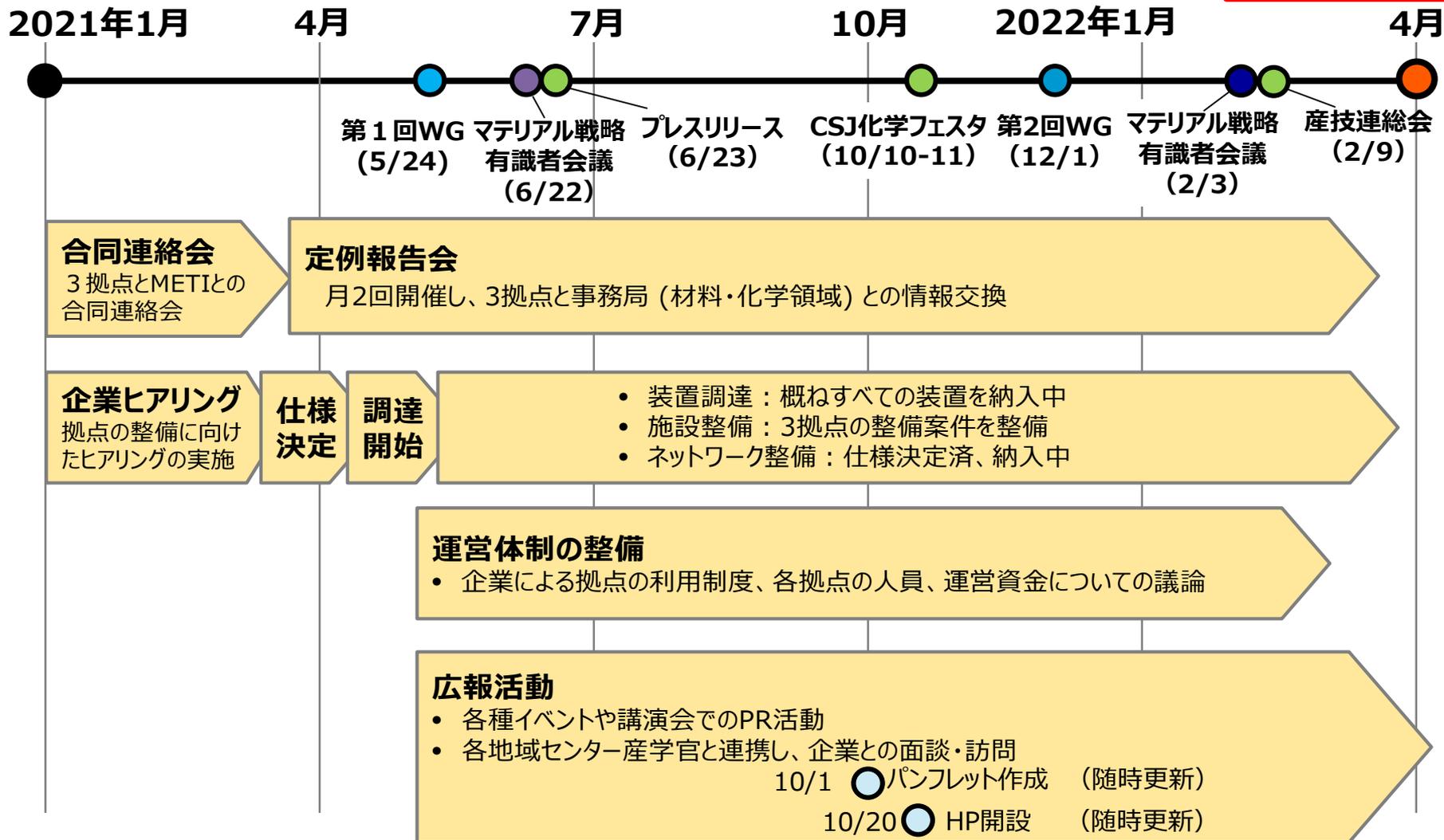


➡ **マテリアル関連企業の競争力強化、地域産業の活性化**

① 進捗状況と運用開始までのスケジュール

- 2022年4月の運用開始に向け、以下の計画で整備が進行中

拠点運用開始
(4月～)



① 第2回ワーキンググループの活動

- プラットフォーム(PF)整備事業の推進のため、産学官の外部有識者を含めたワーキンググループ(WG)を立ち上げ、拠点の在り方や利用制度等について議論を実施。

【WG委員】(五十音順)

青木 睦郎 (株式会社バルカー 取締役)
浦田 興優 (日本材料技研株式会社 代表取締役社長)
齊藤 隆夫 (株式会社高砂ケミカル 会長)
関根 圭人 (美濃窯業株式会社 技術研究所マネージャー)
知京 豊裕 (物質材料研究機構 特命研究員)
船津 公人 (奈良先端科学技術大学院大学 特任教授)

【第2回WG】

日付：12/1 (水)
場所：ウェブ会議
参加者：WG委員、産総研関係者、
経産省関係者



【第2回WGでの委員コメント】

- 企業がより広く利用できるようにするには、取得データにより、どのような形でプロセスの最適化、および、スケールアップにつながるのか、具体的な事例を企業に説明することが重要。
- 産学利用の出口として、短期的な装置利用だけではなく、長期的な観点での、人材育成を目標として見据えてほしい。
- 分析設計と同様に、プロセスにおいても、運転の基本設計が非常に重要である。スケールに応じた運転基本設計により、スケール間のギャップを埋めることが重要となる。



【今後の対応】

委員のコメントを受けて今後の拠点運営を図るとともに、より事業を知らせるためにパンフレットの充実を行う。

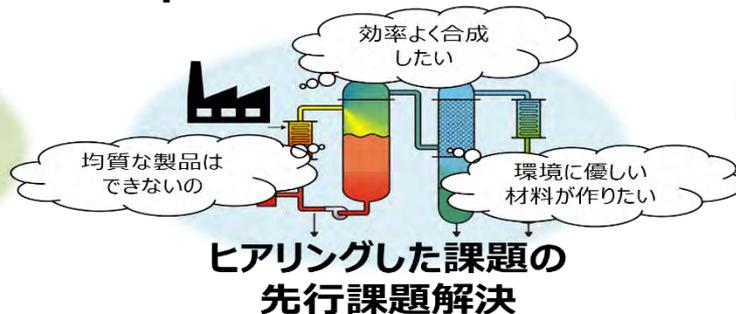
① MPIプラットフォーム積極活用に向けた取組

- ユーザー企業の開拓のため、地域センター周辺の材料・素材企業だけでなく、全国のものづくり企業をターゲットとしたPR活動を実施。
- 中小・ベンチャーも含む企業へのプロセスインフォマティクス普及のため、各拠点の最先端装置群を活用したPI関連の先行事例の創出と人材育成を実施。

Step1 知ってもらう



Step2 試してもらう



Step3 深めてもらう



Step4 使ってもらう



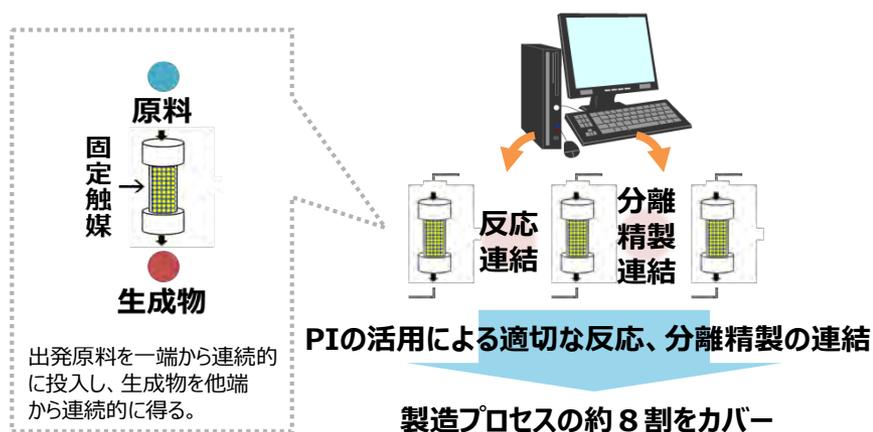
② 先端計算科学等を活用した新規機能性材料 合成・製造プロセス開発事業【R4年度開始予定 国プロ】

- 電子材料等の機能性化学品やファインセラミックスは我が国が強み
- 一方、国際的な競争が激化する中で、引き続きの競争力維持が重要
- データ科学を用いた「プロセスインフォマティクス」による革新的製造技術を確立

(1) 機能性化学品の連続精密生産プロセスPJ

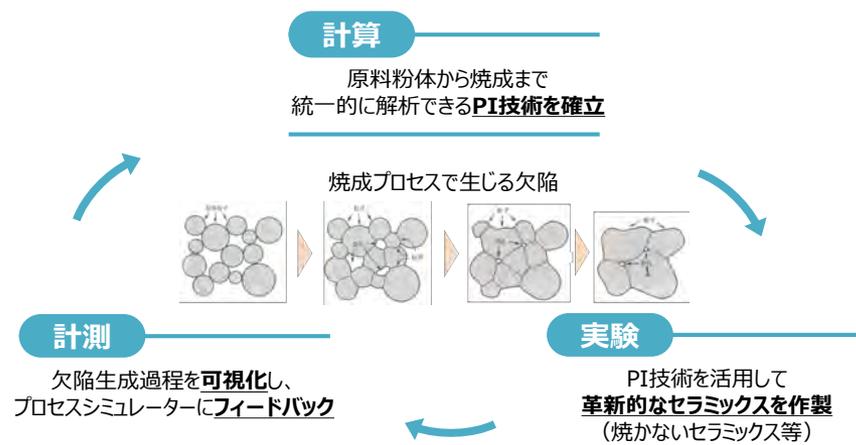
- 従来のバッチ式と比較して多品種少量生産でも高効率で合成可能なフロー式連続精密生産プロセスと、この開発を加速させるデジタル駆動による合成経路探索等のPI技術を確立する。
- 機能性化学品の**合成経路は無数に存在**するため、最適な経路を最短で探索することが極めて困難。
- **最適解を導き出す計算科学によるPIとの融合**により、**開発期間の大幅短縮、生産工程の低コスト化を実現**する。

▶ フロー合成（連続精密生産）



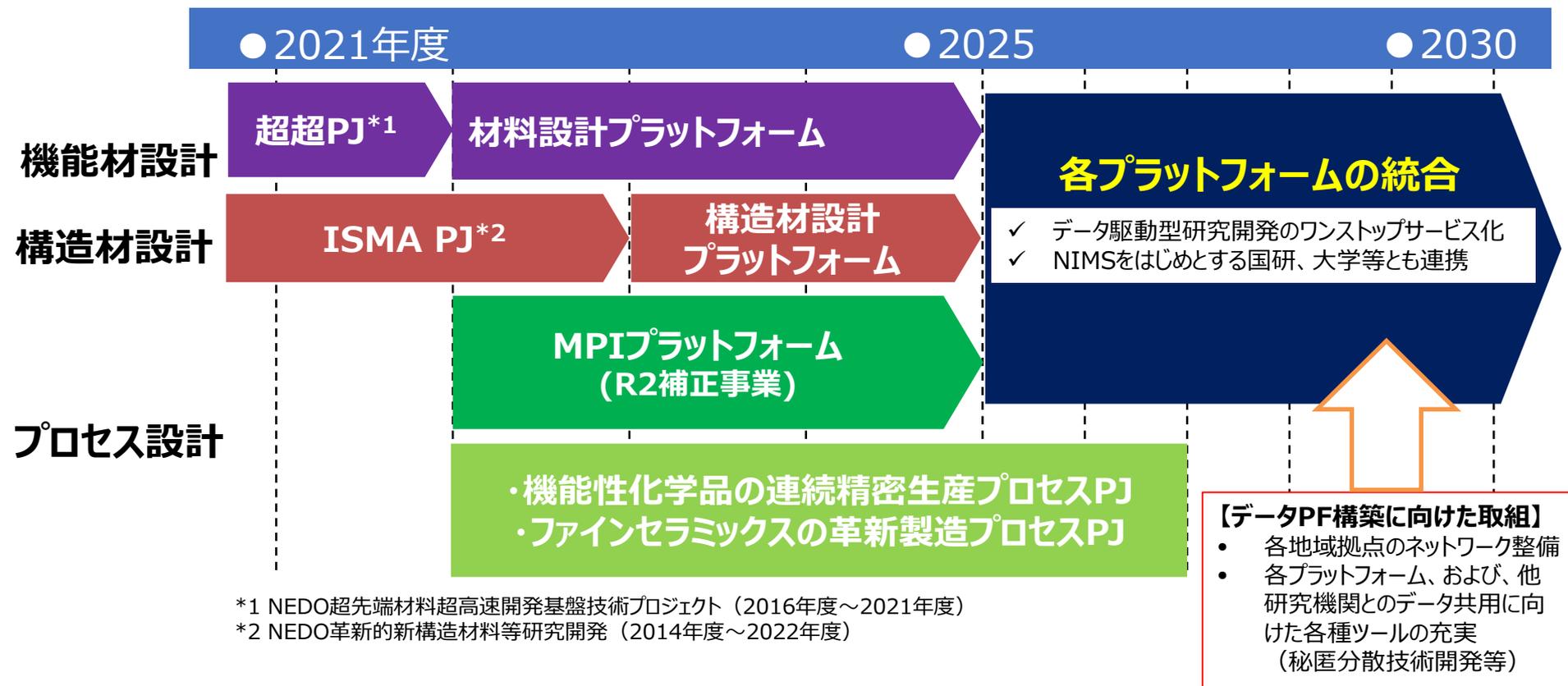
(2) ファインセラミックスの革新製造プロセスPJ

- 焼結現象の可視化等の先端計測技術とセラミックス製造工程を統一的に解析できるPI技術を開発し、超小型化・高信頼化が求められる6G用電子デバイス等を実現を目指す。
- 特に欠陥による**製品のばらつきは電子部品として致命的**であり、**微細な欠陥構造の制御が不可欠**。
- **「経験とノウハウ」に頼っていた製造プロセスを、計算科学等を活用したインフォマティクスによって高度化を図る。**



プラットフォーム統合による民間活用の加速

- 経済産業省では、機能材料、構造材料分野における材料開発プロジェクトを実施しており、その成果をユーザー企業に活用してもらうためのプラットフォームを産総研に構築中。
- MPIプラットフォームでは、最先端の計測技術等によるプロセスデータの収集、解析技術の開発と利用、市場ニーズに応じた多様なプロセスを実現するための基盤技術構築とその社会実装を推進。
- NIMSや他研究機関・大学等のマテリアルデータの相互利用に向けた連携を検討。
- 2022年度開始予定の国プロの中で機能性材料の開発を加速するためのPI技術を確立。



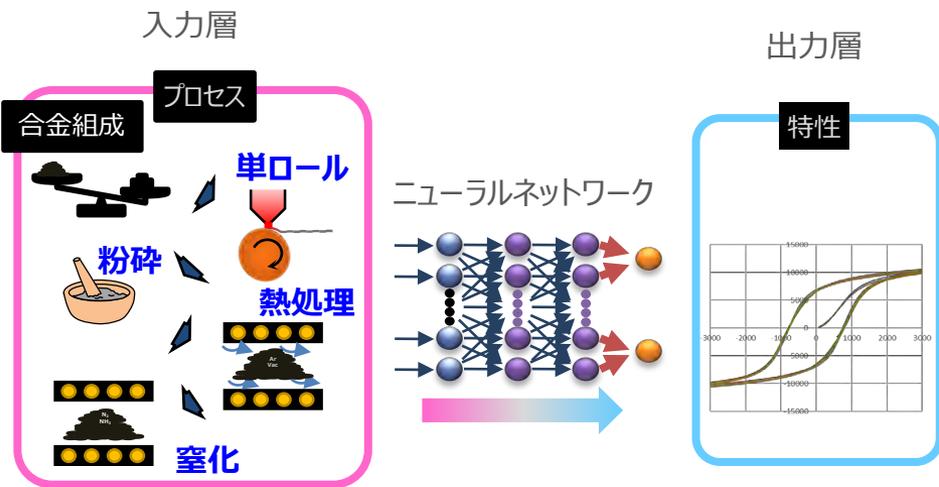
(参考) MPIプラットフォームの先行研究事例①

- サマリウム-鉄-窒素系の磁性材料について、高い磁気特性が得られるプロセス条件を予測するモデルを構築。
- 高温域で従来材よりも良好な残留磁化と保磁力を達成するためのプロセス設計の迅速化に貢献。

プロセス-磁気特性予測モデルの構築

Sm-Fe-N系磁石材料を対象として、合金組成、プロセス、および、特性データを取得し、プロセス-磁気特性予測モデルを構築

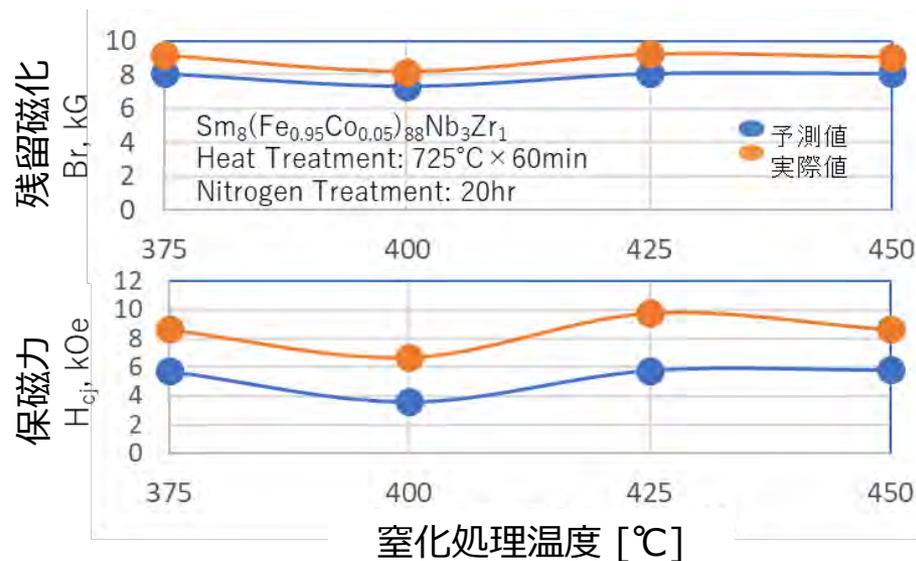
構築した予測モデルにより、予測値を出力し、実測値の相関を評価



プロセス条件のデータ取得

単ロール: ロール回転速度
 粉砕: 粉末サイズ
 熱処理: 温度、時間
 窒化処理: 温度、時間

残留磁化、保磁力測定



H. Hosokawa et al, J. Magn. Magn. Mater., 526(2021) 167831.

プロセス-磁気特性予測モデルの構築に成功
 →予測モデルの活用により、高特性材料開発へのプロセス設計の迅速化が可能

(参考) MPIプラットフォームの先行研究実例②

- 様々な木質材料の迅速評価、および、木材・プラスチック複合材料の強度試験により、データを収集。
- 原料となる木粉の品質から、最終製品の強度を予測する機械学習モデルを構築。
- 強度と成形性を両立した木材・プラスチック複合材料の開発に向けた材料設計手法を実現。

原料木粉の分析による製品強度予測モデルの構築

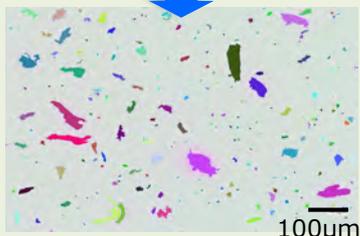
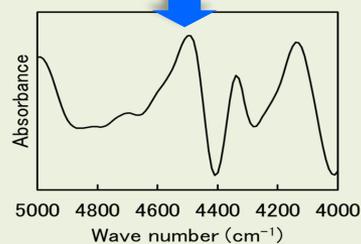


木粉原料の成分・形態に関するデータの取得



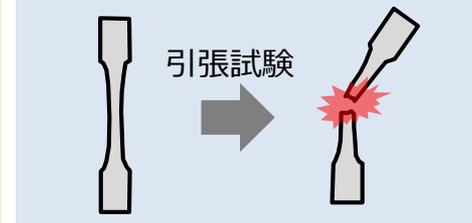
近赤外分光分析
構成成分の定量・定性解析

マイクロ形状画像解析
形状・サイズ分布解析



迅速かつ簡便な評価手法

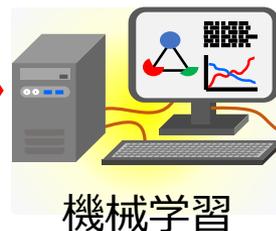
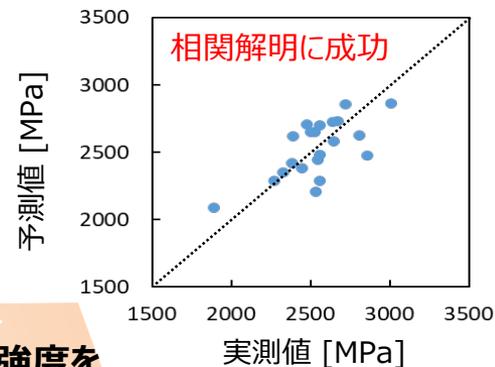
複合材強度データの取得



入力

入力

予測値の妥当性の検証



予測した強度を
出力

原料データから最終製品の強度を予測するモデルを構築

各種木材プラスチック複合材の高強度化に向けた材料設計に活用可能