

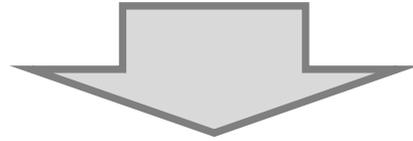
2022年1月18日

MDPF・コンソーシアム 概要

産総研 材料・化学領域長、
コンソーシアム会長
濱川聡

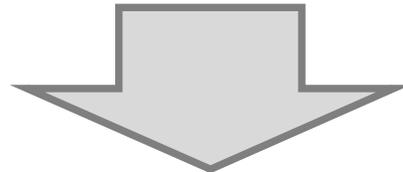
従来の材料開発

- 蓄積してきた多くの材料の実験・評価データから「経験と勘」に基づく仮説を立て、その実験検証を通して材料を開発



超超PJの目指す材料開発

- 高度な計算科学、高速試作・プロセス技術、先端ナノ計測評価技術を駆使した材料開発の飛躍的なスピードアップ
- 「経験と勘」に依存した材料開発からデータに基づく材料開発への変革



PJの成果を広く活用していただくために
コンソーシアムを設立

超超PJにおける材料開発高速化に向けた技術開発

PJ前期

マルチスケール計算
シミュレータ技術

計算機支援
ナノ構造設計
基盤技術

機能性材料開発

高速・革新
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

先端
ナノ計測評価
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

三位一体の材料開発

PJ後期

人工知能(AI)
を活用した
材料開発支援

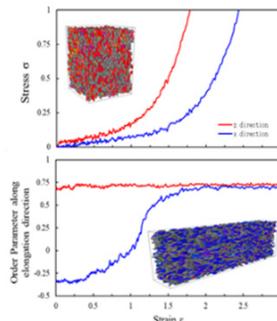
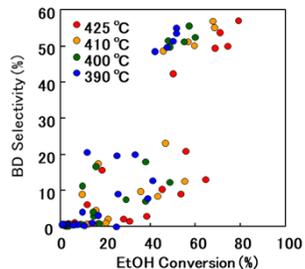
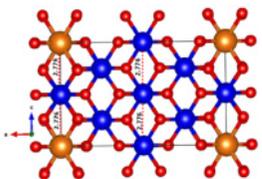
計算/AI・プロセス・計測
の連携による
研究開発促進

材料設計プラットフォーム(MDPF)構想

プロジェクトにおける 実施内容



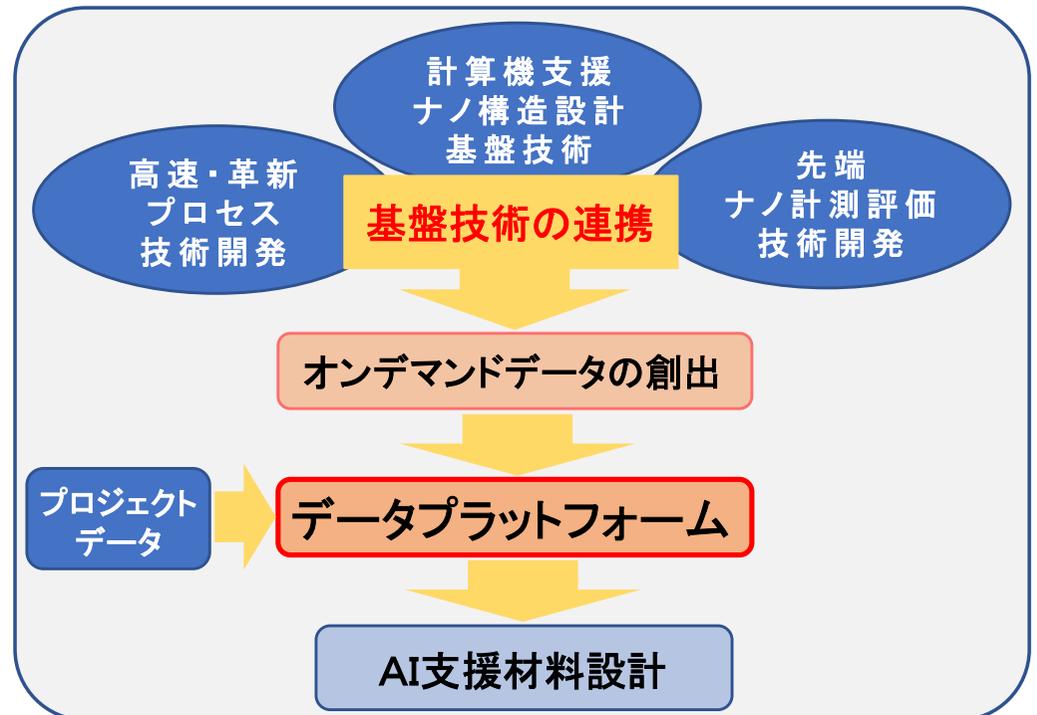
個別課題(モデル素材)への
適用



プロジェクト
終了

- ・技術
- ・設備
- ・知財
- ・データの集約

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

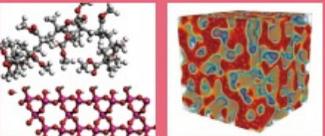
材料設計プラットフォーム(MDPF)の構造

材料設計プラットフォーム(MDPF)

計算シミュレータ

- ミクロ～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

P11 ▶



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



AIST Materials Gate データプラットフォーム (DPF)

- ◆ DPFを利用し易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)

目的別のDPFセクション

- 光機性能微粒子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
- 機性能高分子DPF**
ゴム材料、放熱/蓄熱材料、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

ユーザー

解析ツール群

データリポジトリ

データ管理基盤

MDPF機器群

NEEDS

SOLUTION

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

P13 ▶



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

P11 ▶



データプラットフォーム(DPF)の例 (電子部品材料DPF)

材料： 高分子機能材料、無機誘電材料
データ： 複素誘電率、導電率、伝送損失

電子部品材料DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

誘電特性 (GHz-PHz領域を含む) と組成・構造との相関データ

- ✓ 組成： 有機材料、無機材料
- ✓ 物性： 複素誘電関数、バンドギャップ、電子状態密度

【計測データ】

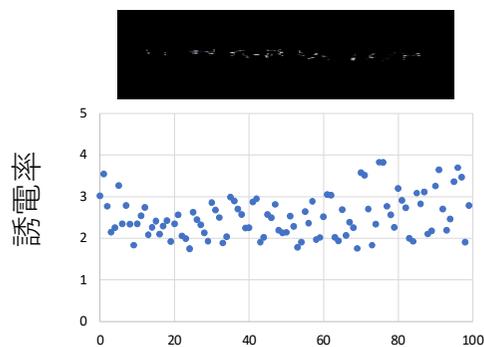
計算シミュレーションの検証データ

- ✓ 複素誘電率、伝送損失など

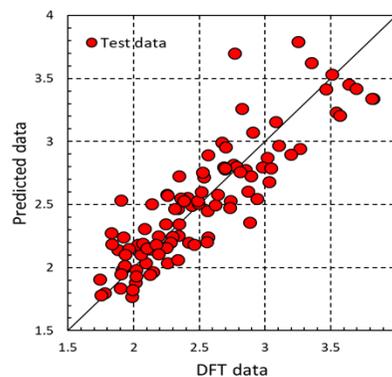
電子部品材料の用途例

- ✓ フレキシブル回路基板材料
- ✓ 機能樹脂材料
- ✓ キャパシター
- ✓ 高周波対応通信機器

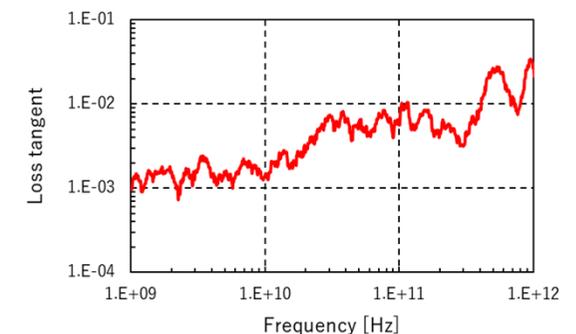
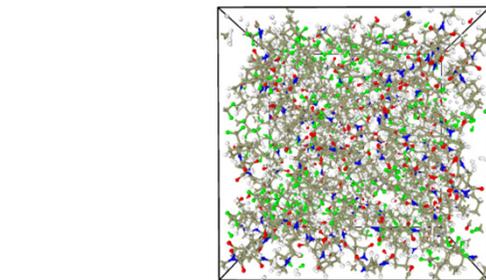
電子部品材料DPF上の解析ツール



① 第一原理計算データの散布図
(機械学習モデル構築用のデータ)



② ガウス過程回帰による誘電率予測
(高分子材料探索の高速化)



③ シミュレーションによる誘電特性予測
(DPFデータと分子動力学法を組み合わせた誘電正接の評価分析)

材料設計プラットフォーム (MDPF)

オンデマンドデータ生成

- ・計算シミュレータ
- ・プロセス計測

AI解析

データリポジトリ



データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

- ・データ駆動材料開発に関する最新情報の提供
- ・材料設計プラットフォーム利用の橋渡し



最新情報

ニーズ

企業

ソリューション

連携

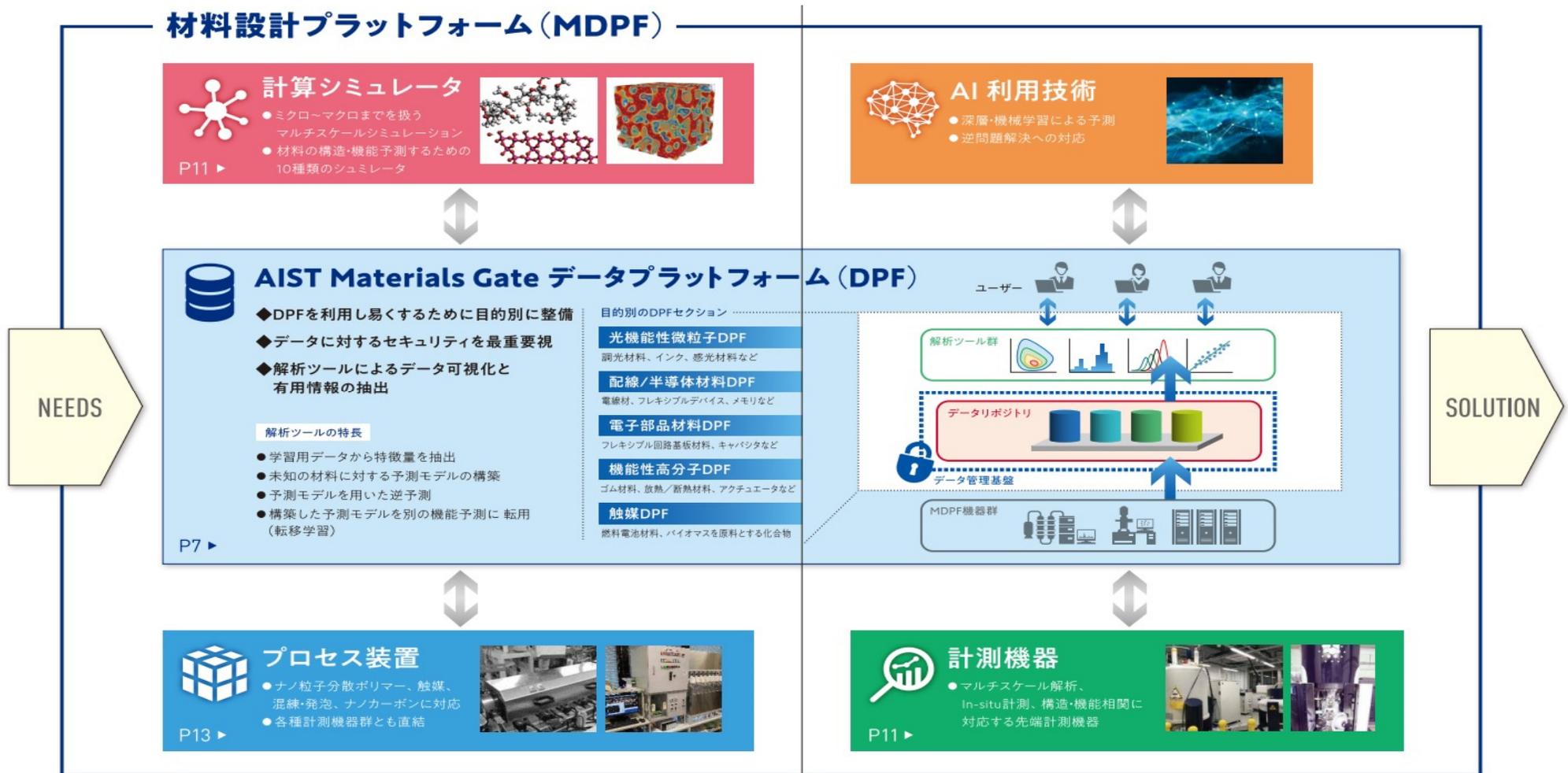
大学・省庁
公的機関等

2022年1月18日

MDPF・コンソーシアム 詳細

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、
コンソーシアム事務局長
時崎高志

1. 材料設計プラットフォーム(MDPF)の詳細
2. データプラットフォーム(DPF)の詳細
3. データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム
(略称 データ駆動コンソーシアム) 紹介



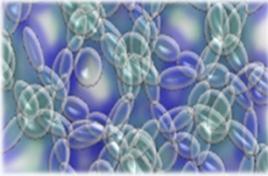
広範な時空間スケール、多様な材料・機能に対応したシミュレータ群

開発したシミュレータ

- ・電気・光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ
- ・モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ・誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ
- ・汎用インターフェイス (拡張OCTA)
- ・フィラー充填系コンポジットシミュレータ
- ・ナノカーボンコンポジット用シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

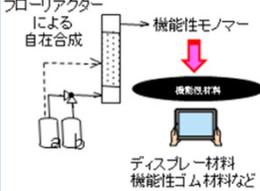
高機能誘電材料

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



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



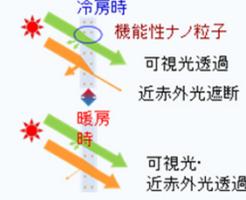
ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

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

半導体材料

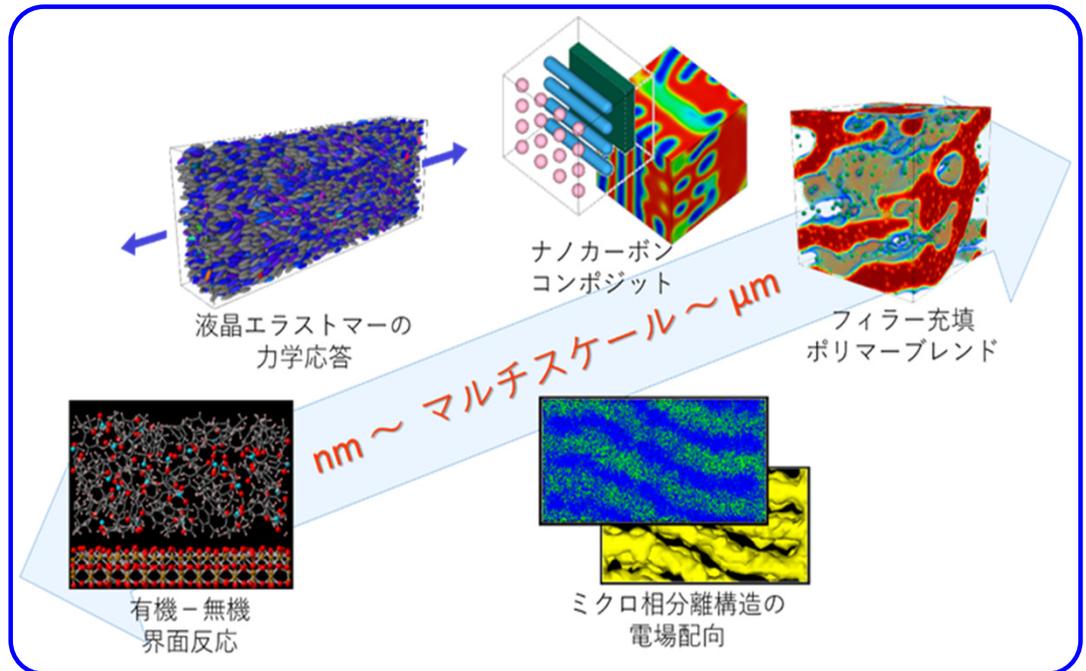
高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



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

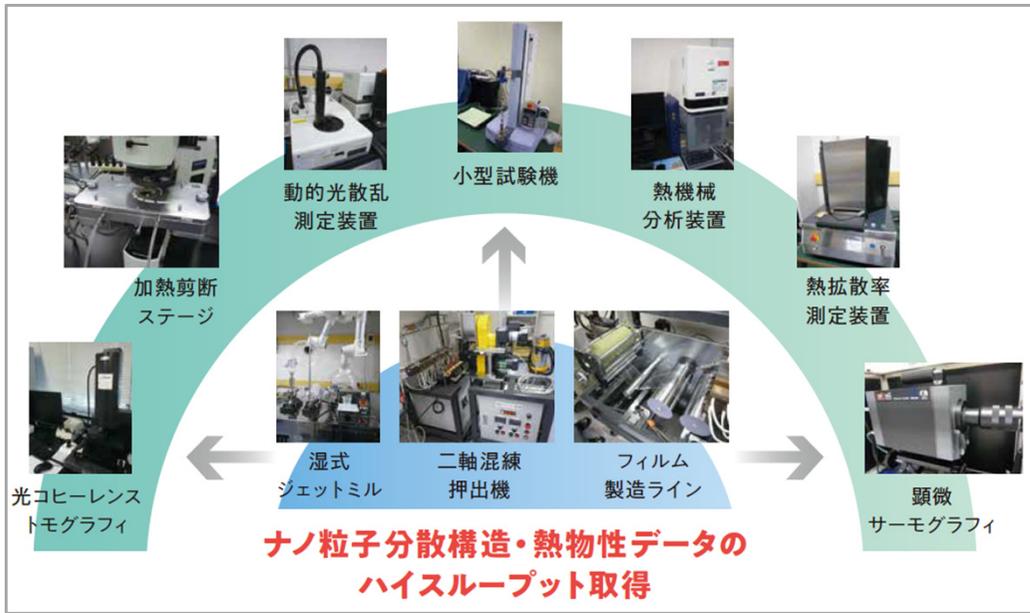
自動車系部品など

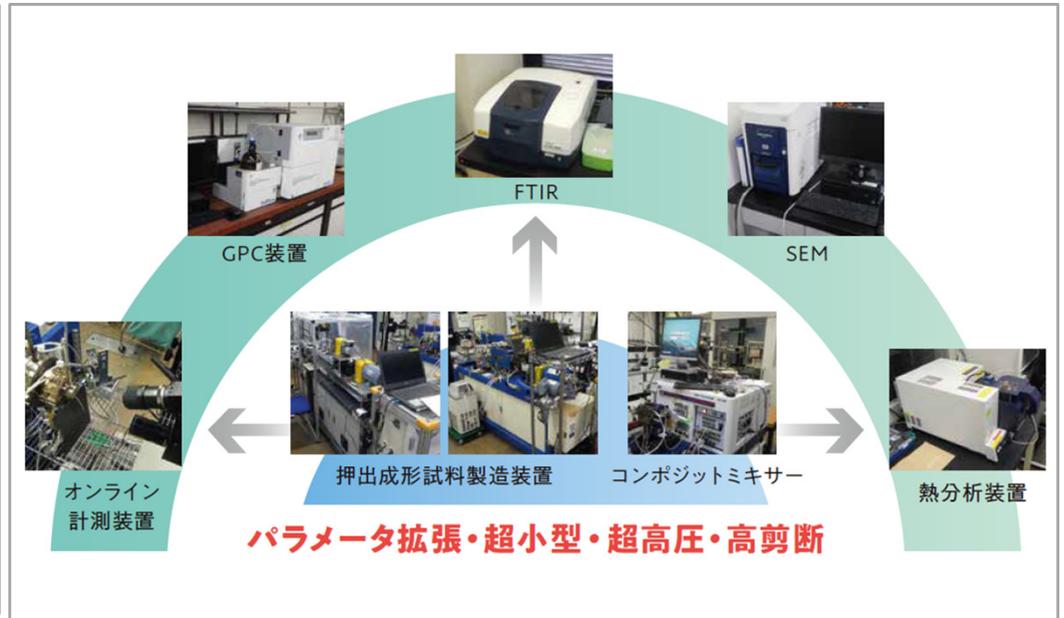
オープン戦略により成果の普及を図る

MDPF詳細 (プロセス装置(汎用計測機器を含むシステム))

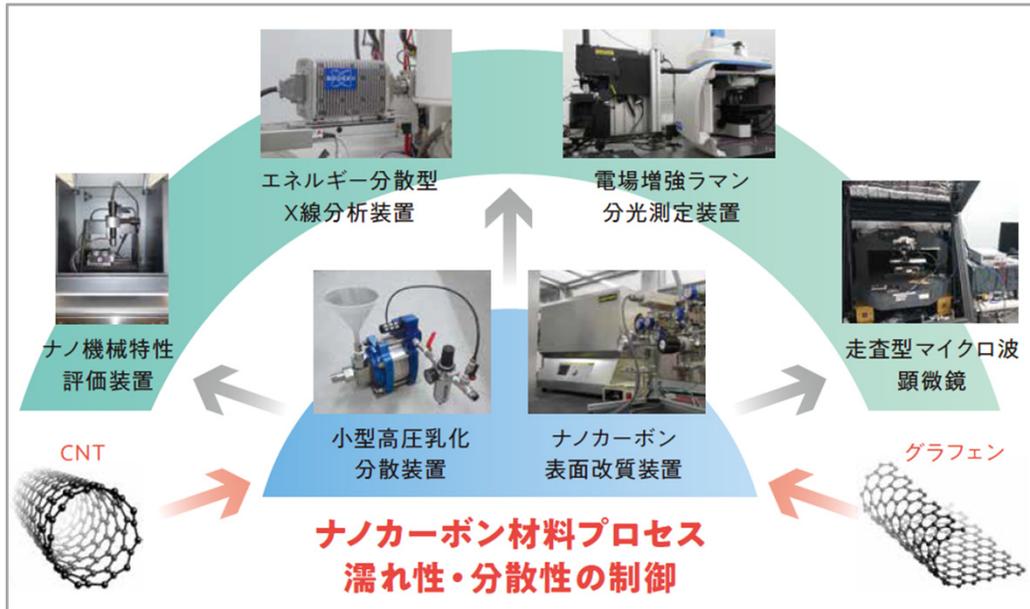
ナノ粒子分散ポリマー



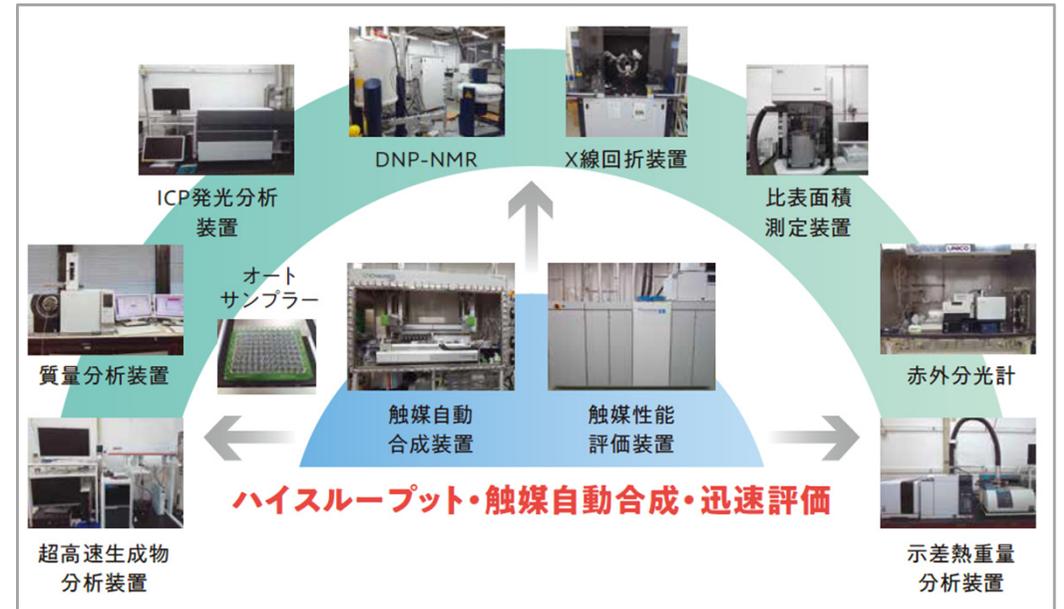
混練・発泡



ナノカーボン材料

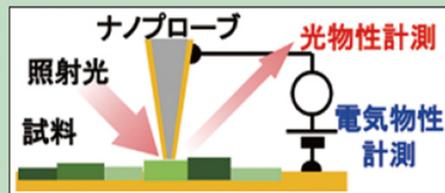


触媒



MDPF詳細 (先端ナノ計測機器)

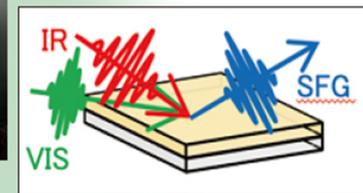
ナノプローブ分光



走査型マイクロ波顕微鏡



和周波分光



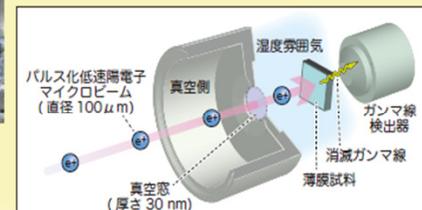
構造・機能相関計測

化学反応 In-situ計測

DNP-NMR

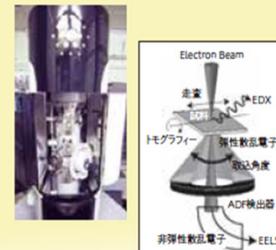


陽電子消滅法

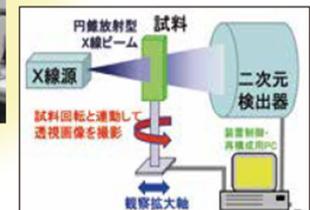


マルチスケール構造・組成解析

電子分光型電子顕微鏡



X線CT



原子・分子

10⁻⁹メートル (=1nm)

ナノ構造・ナノ粒子・ナノカーボン

コンポジット

10⁻⁶メートル (=1μm) サイズ

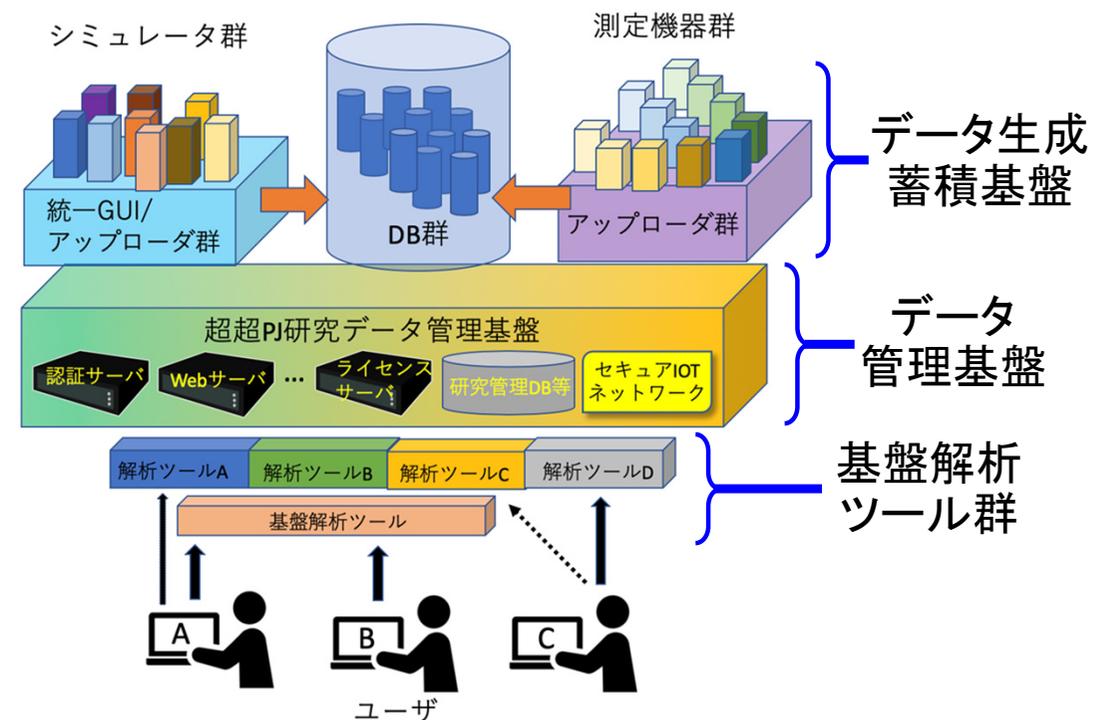
DPFの特徴

- ◆ DPFを利用し易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

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、屈折率制御フィラー、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

DPFの階層構成



(1) 光機能性微粒子DPF

材料： 分散ホスト中の微粒子材料、ナノ粒子材料

データ： 光機能と粒子の形状・サイズ・構造・組成の相関データ

光機能性微粒子DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

可視～赤外域での光機能（吸収率など）と組成・粒径・形状等との相関データ

- ✓ 組成： 遷移金属を中心に主な単元素材料を網羅
- ✓ 粒径： 双極子～多重双極子プラズモン生成の粒子サイズ
- ✓ 形状： アスペクト比、入射光との配向角度
- ✓ 媒質： 屈折率（透明媒質）

【計測およびプロセスデータ】

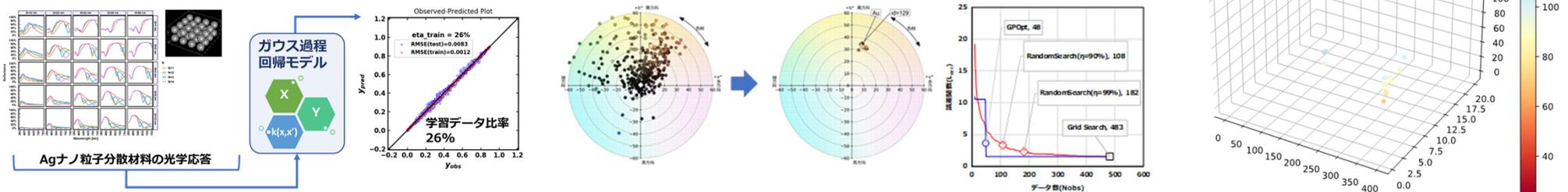
計算シミュレーションの検証データ

- ✓ 単一微粒子の光散乱スペクトル
- ✓ 微粒子の合成条件と形状、粒径分布

光機能性微粒子の用途例

- ✓ 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

光機能性微粒子DPF上の解析ツール



① 回帰モデルによる順問題加速
(光機能材料計算設計の
高速・簡易化)

② ベイズ最適化による粒形探索
(粒形制御による色設計)

③ スパースモデリングによる
合成分布予測

(ナノ粒子分散材料等に対する粒形・サイズの光学評価分析)

(2) 電子部品材料DPF

材料： 高分子機能材料、無機誘電材料
データ： 複素誘電率、導電率、伝送損失

電子部品材料DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

誘電特性（GHz-PHz領域を含む）と組成・構造との相関データ

- ✓ 組成： 有機材料（ポリイミドなど）、無機材料（ドーパントを含むバナジウム酸化物など）
- ✓ 物性： 複素誘電関数、光学伝導度、バンドギャップ、電子状態密度

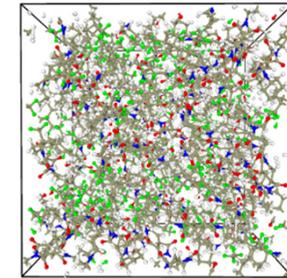
【計測データ】

計算シミュレーションの検証データ

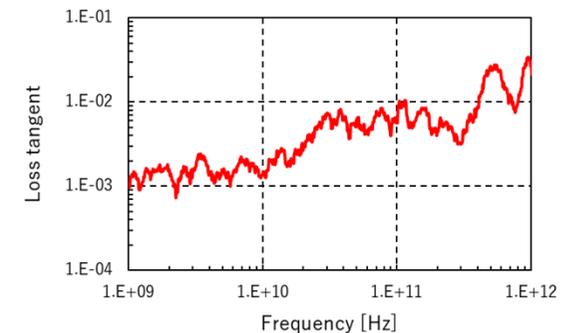
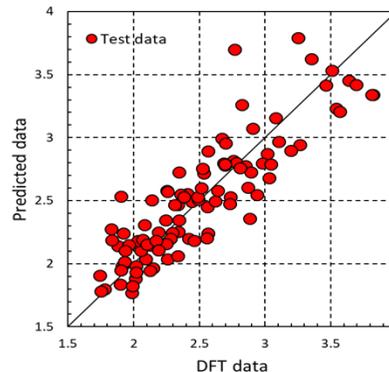
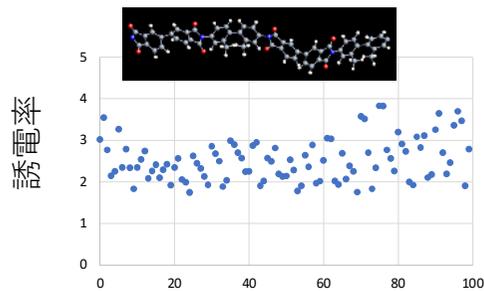
- ✓ 複素誘電率
- ✓ 誘電体損失を含む伝送損失

電子部品材料の用途例

- ✓ フレキシブル回路基板材料
- ✓ 機能樹脂材料
- ✓ キャパシター
- ✓ 高周波対応通信機器



電子部品材料DPF上の解析ツール



① 第一原理計算データの散布図
(機械学習モデル構築用のデータ)

② ガウス過程回帰による誘電率予測
(高分子材料探索の高速化)

③ シミュレーションによる
誘電特性予測
(DPFデータと分子動力学法を組み合わせた誘電正接の評価分析)

(3) 配線/半導体DPF

材料： カーボン材料、有機半導体・EL材料等の配線/半導体材料
データ： 電気伝導度、有機半導体の分子・結晶構造と有効質量

配線/半導体DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

CNT配線材料中のCNT構造、モルフォロジー構造と電気伝導の相関データ

- ✓ 組成：単体CNTのカイラリティ
- ✓ モルフォロジー構造：CNT間、バンドル間距離、接触面積、交差角
- ✓ 変形：CNTのアスペクト比

有機半導体分子の分子、結晶構造とキャリア有効質量の相関データ

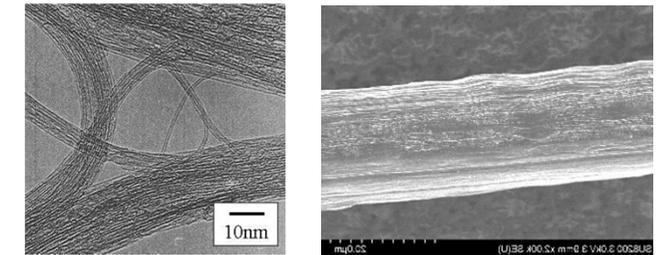
【計測データ】

計算シミュレーションの入力、検証データ

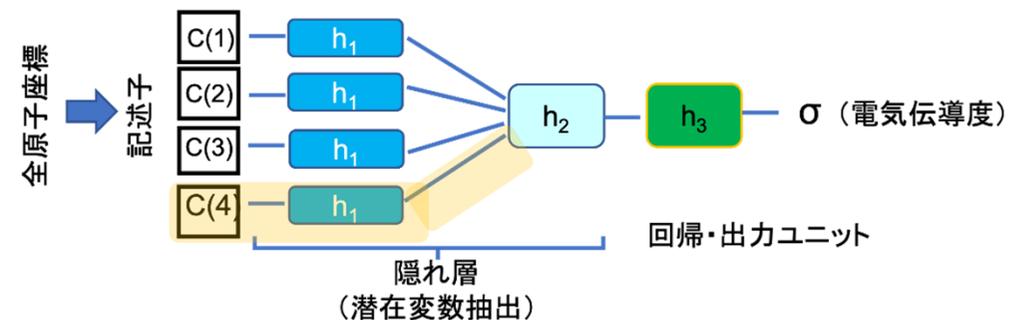
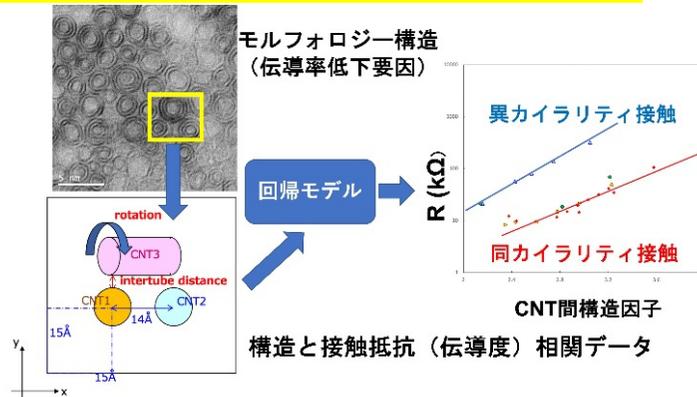
- ✓ CNT線材の伝導度、有効長、配向度、空隙率、TEM・SEM像
- ✓ 放射光、X線データ、FIR、ラマンスペクトル

配線/半導体材料の用途例

- ✓ 電線材
- ✓ フレキシブルデバイス
- ✓ メモリ



配線/半導体DPF上の解析ツール



① 回帰モデルによる順問題加速
(CNT配線の電気抵抗を下位階層の高精度データを用いて高速予測)

② 第一原理電気伝導計算と深層学習を連携させた順問題加速
(CNTバンドルの電気抵抗を高精度高速予測)

(4) 機能性高分子DPF

材料：相分離、フィラー充填、発泡等による高次構造を持つ樹脂・エラストマー材料
データ：相溶性、高分子-無機界面相互作用、高次構造、熱拡散、弾性挙動

機能性高分子DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

- 相溶性、界面相互作用と高次構造との相関データ
 - ✓ 各種無機物に接触したPMMAオリゴマーの引き離しエネルギー
 - ✓ フィラーとマトリックスポリマー間の相互作用とフィラー分散構造
 - ✓ 分子鎖長・ブレンド比・相互作用と相分離構造
 - ✓ 核剤数・発泡倍率・核剤-ポリマー間相互作用と発泡構造
- 高次構造と物性との相関データ
 - ✓ 各種フィラー分散、ポリマーブレンド構造の熱拡散
 - ✓ 各種フィラー充填ポリマーブレンド系などの線形弾性変形
 - ✓ 液晶に関わるパラメータと応力-歪曲線

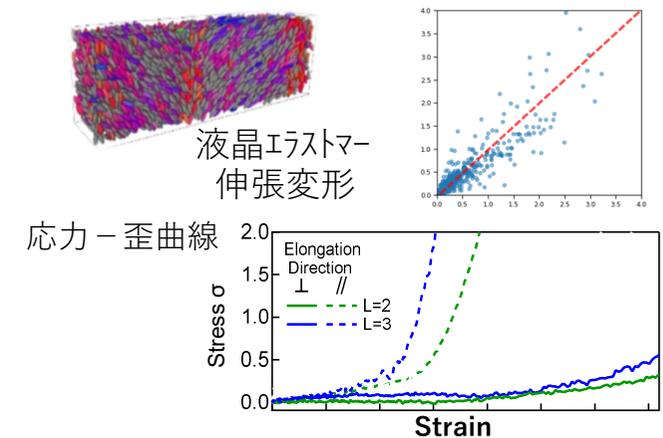
【計測データ、プロセスデータ】

- 組成・混練条件と分散構造の相関
 - ✓ 連続押し出しのプロセスデータ
- CNT分散フィルム構造
 - ✓ 各種CNTを分散させたCNT膜のSEM画像、及びGAN生成画像

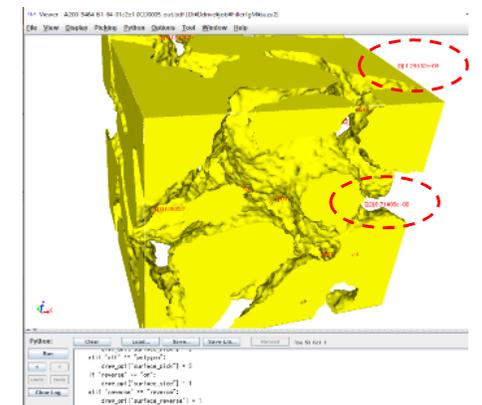
機能性高分子材料設計の用途例

- ✓ ゴム材料（フィラー分散、粘弾性挙動）
- ✓ 放熱/断熱材料（熱伝導）
- ✓ アクチュエーター（弾性挙動）
- ✓ 微多孔膜（相分離構造、物質拡散）

機能性高分子DPF上の解析ツール



① 回帰モデルによる順問題加速 (高分子材料設計の高速化)



② 拡張OCTAによる高次構造のデータ化 (発泡材料中の気泡の構造解析)

(5) 触媒DPF

材料： 不均一触媒、電池材料

データ： 触媒の電子状態、構造、形状と触媒活性の相関データ

触媒DPFの収納データ

【計算シミュレーションデータ】

触媒候補物質（固定化触媒、金属・金属酸化物材料）の物性、化学データ

コアシェル触媒

- ✓ 金属酸化物：金属と酸素で構成される触媒の表面構造データ
- ✓ コアシェル触媒：白金（表面）、他金属（コア）の構造データ
- ✓ 触媒候補材料の物性：軌道エネルギー、バンドギャップ、表面電荷、表面の酸・塩基性指標

【計測・プロセスデータ】

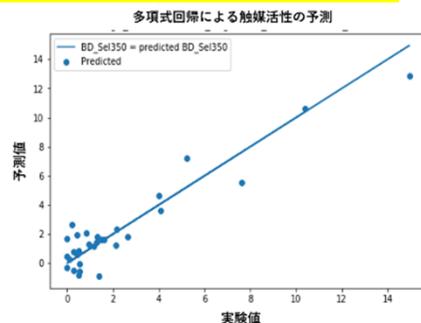
材料、プロセス条件と触媒活性の相関データ

- ✓ ハイスループットによるプロセス条件と触媒性能の相関
- 触媒表面の構造、吸着分子振動及び触媒活性との相関
- ✓ 触媒素過程のキャラクタリゼーション
- 物性データ
- ✓ 触媒活性を予測する回帰モデルの説明変数

不均一/均一触媒の用途例

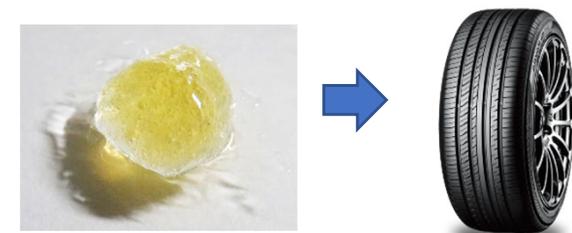
- ✓ 固体高分子形燃料電池用触媒
- ✓ バイオマスを原料とする機能性化合物
- ✓ 二酸化炭素の化学原料化

触媒DPF上の解析ツール等



・ 回帰モデルによる触媒活性の予測

（合成ゴム用触媒の活性予測、触媒活性に影響を及ぼす物理・化学的因子の特定）



合成ゴム(イソプロピレン)

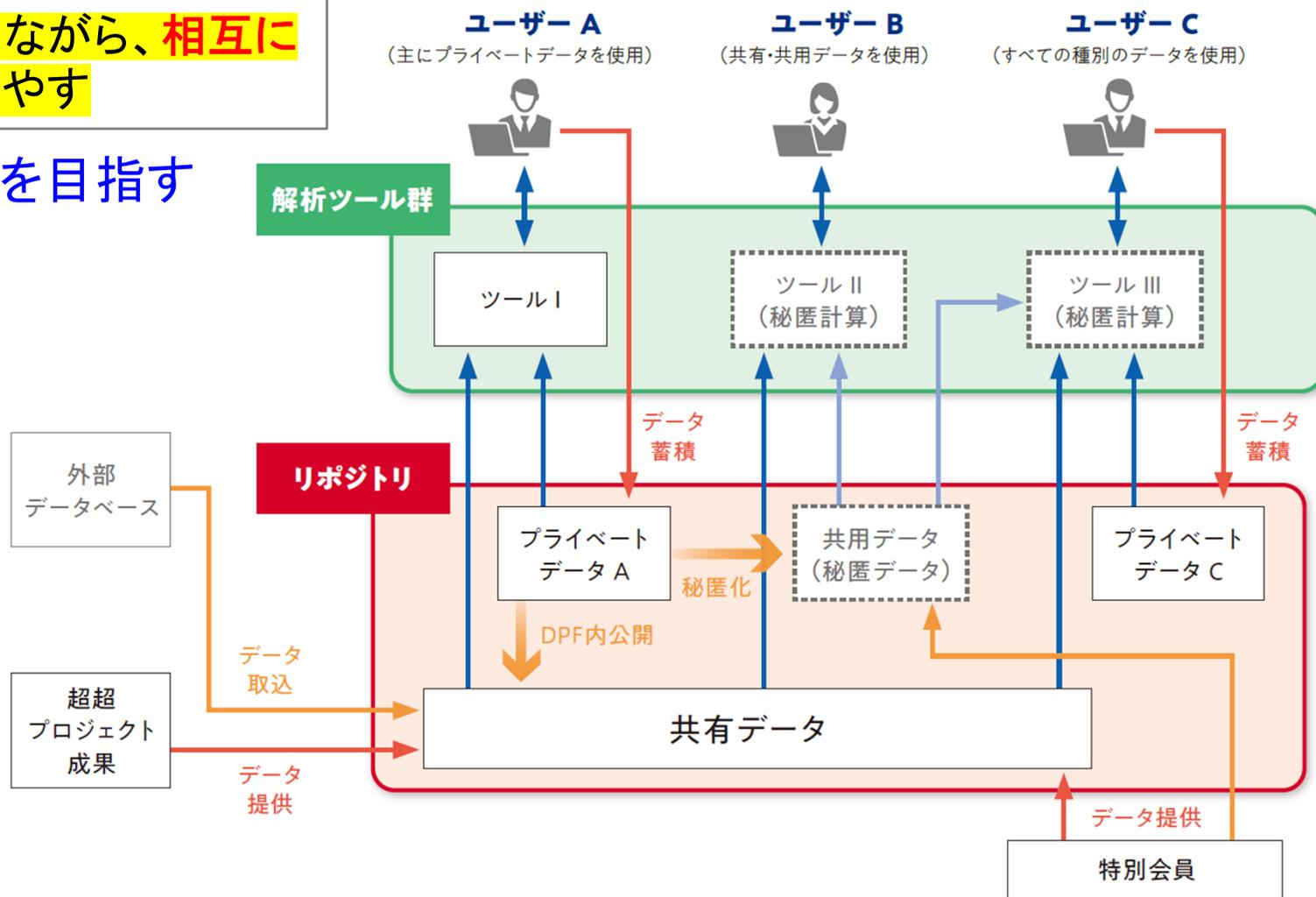
DPFにおけるデータの取扱い

データの秘匿化と秘匿化計算技術により
データ内容を知られることなく他者の AI
学習などに利用できるようにする



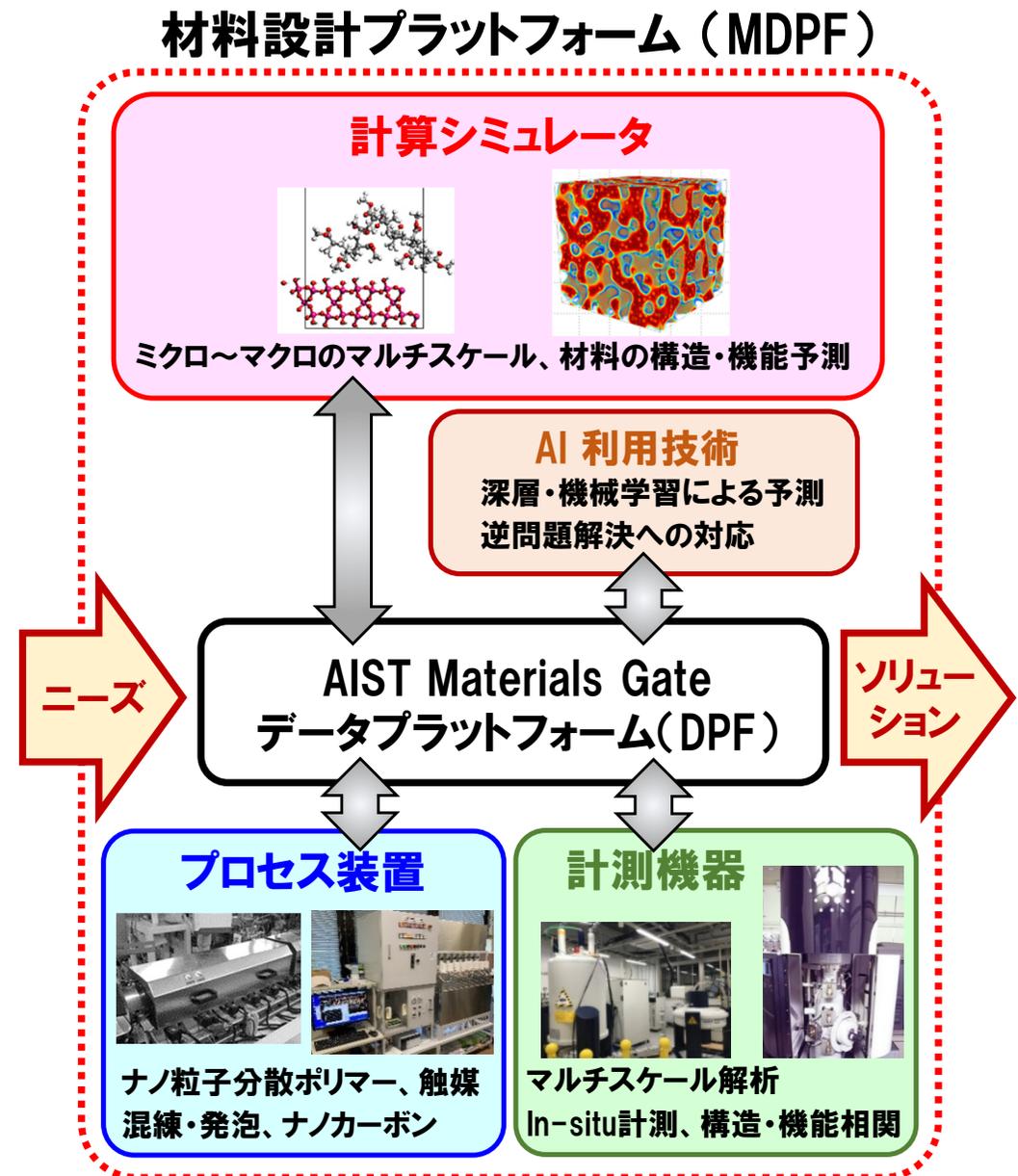
個社の材料の秘密を守りながら、相互に
利用可能なデータ量を増やす

本DPFの中で実証を目指す

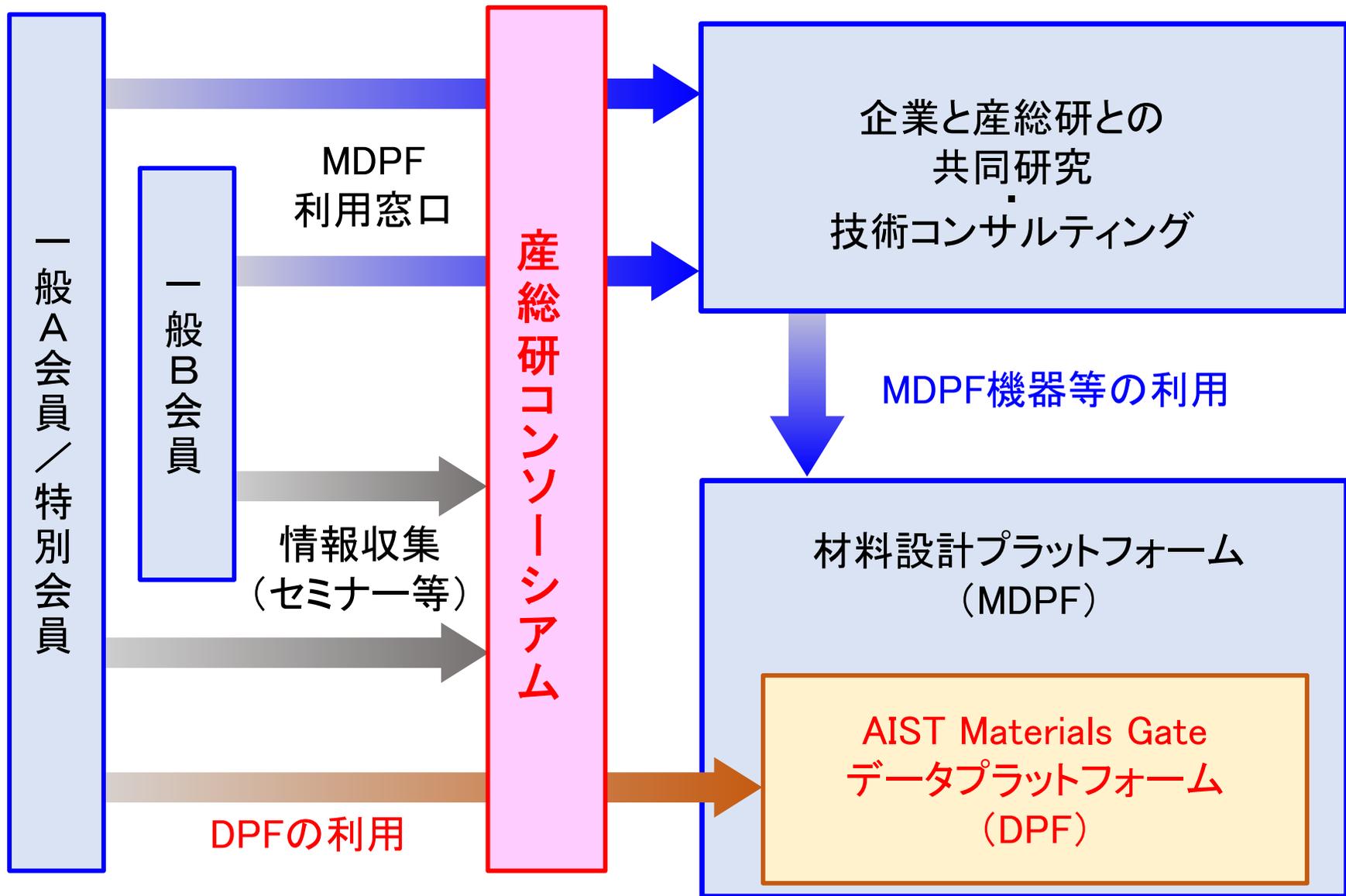


コンソーシアムの 設置目的

超超PJで開発された**材料設計プラットフォーム(MDPF)**に整備された、**データプラットフォーム(DPF)**、**シミュレータ**、**プロセス・計測基盤**を活用し、**産業界のニーズ**に基づいた**確度の高いデータ駆動型材料開発**を加速することにより、我が国の**産業競争力を強化**する。



コンソーシアムの利用スキーム



会員種別と会費

種別	一般A会員	一般B会員	特別会員
サービス内容	<ul style="list-style-type: none"> ● セミナー、技術交流会への参加 ● 個別課題に対応した技術コンサルティング・共同研究の窓口 ● DPF利用 	<ul style="list-style-type: none"> ● セミナー、技術交流会への参加 ● 個別課題に対応した技術コンサルティング・共同研究の窓口 	<ul style="list-style-type: none"> ● セミナー、技術交流会への参加 ● 個別課題に対応した技術コンサルティング・共同研究の窓口 ● DPF利用
参加資格	<ul style="list-style-type: none"> ● 一般企業 ● ADMAT参加企業 	<ul style="list-style-type: none"> ● 一般企業 	<ul style="list-style-type: none"> ● 大学、国研等の法人および個人
年会費	¥1,000,000	¥300,000	¥0

事業概要(コンソーシアム会員へのサービス内容)

- ① データ駆動型材料開発に関するセミナー及び技術交流会による最新情報の提供と会員の交流
- ② データ駆動型材料開発における個別課題に対応した技術コンサルのマッチング
- ③ MDPFに整備されたDPF利用サービスの提供と、チュートリアルによる実習及び人材育成
- ④ 外部データベースのワンストップ利用サービスの提供

① セミナー、技術交流会による最新情報の提供と 会員の交流

データ駆動型材料開発に関する最新の研究成果、研究動向について、産総研研究者や特別会員等を講師として招聘し、セミナーや技術交流会等の方式で情報提供と会員同士の交流を実施。

セミナーの頻度は初年度において6回/年程度とし、2年度目以降は動画配信等を活用し、適宜調整する。

Web配信ツール等を活用し、オンライン、オンデマンドでの情報提供
目的・対象者でレベル分けし、ニーズに応じたセミナー等を主催

- | | |
|------------------|--|
| <p>＜セミナーの例＞</p> | <ul style="list-style-type: none"> ◆ シミュレータの機能および事例の紹介 ◆ プロセス・計測装置群の活用事例の紹介 ◆ DPF利用説明会（ハンズオン含む） ◆ AIST、特別会員などによるMI研究事例紹介 |
| <p>＜技術交流会の例＞</p> | <ul style="list-style-type: none"> ◆ コンソ会員によるDPF利用事例紹介 |

② 個別課題に対応した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

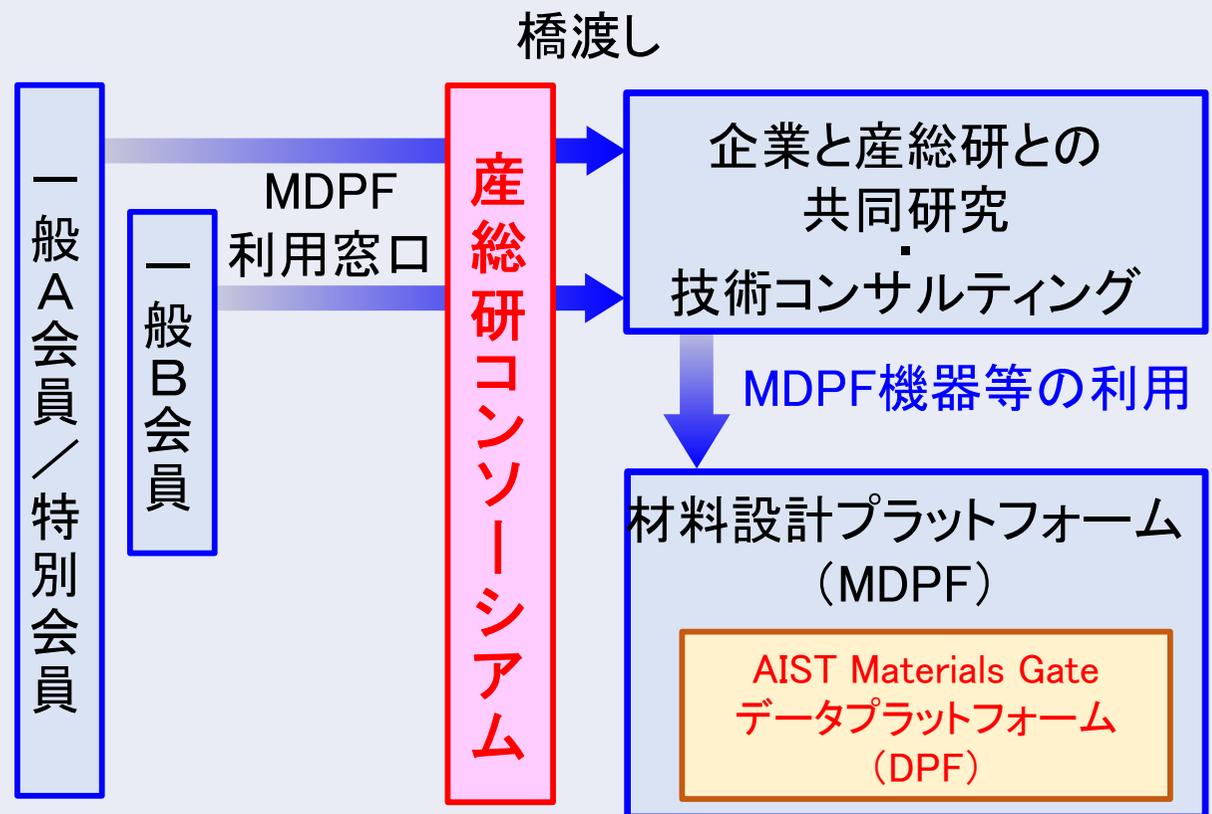
本コンソーシアムはMDPFに関する技術コンサルティング・共同研究の窓口を担う。

◆ 個別課題に対応した技術コンサルティングの窓口を担う。

◆ シミュレータ・プロセス・計測基盤の利用、およびAI利用支援は共同研究契約を前提とする。

一般A会員および特別会員がDPF利用およびオープンなシミュレータ群のみを自社の用意する計算資源で利用する場合は、共同研究等の契約不要

◆ 技術コンサルティング・共同研究は、主として産総研材料・化学領域職員が業務として実施する。

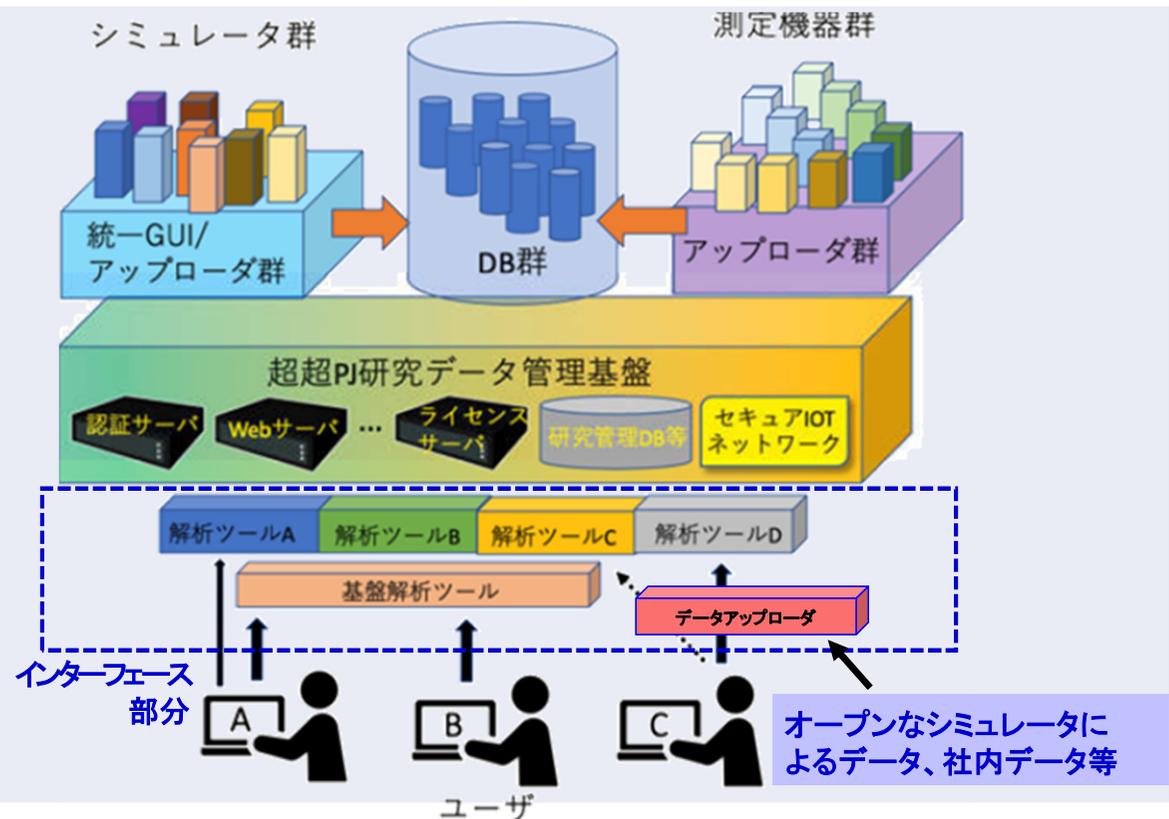


③ データプラットフォーム(DPF)の利用と チュートリアルによる実習・人材育成

超超PJにて開発された5つのDPF(データセット、データベースシステム、
インターフェース(データアップローダ・解析ツール等))が利用できる。

データアップロードから解析までの一連の流れについての解説動画など、
基礎的な利用方法についてのチュートリアルを提供する。

- ◆ **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、
屈折率制御フィラー、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、キャパシター、
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、二酸化炭素の化学原料化 など



④ 外部データベースのワンストップ利用

材料研究にかかわる産総研外のデータベースについて、ワンストップでアクセスできるインターフェースを提供する。

Open Science Framework (OSF) に準拠したDB環境を構築している機関とのオープンデータの相互アクセスに向けて協議を進めています。

(国内例) ◆ GakuNin RDM (国立情報学研究所, NII)

(海外例) ◆ PubChem、AFLOW

コンソーシアムのホームページ

- ホームページ公開 (https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html)
- 入会申し込み開始

unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html

コンソーシアム紹介 | 技術情報 | 入会案内 | 会員様向け情報 | お問い合わせ | アクセス

産総研 材料・化学領域

データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム

(略称: データ駆動コンソーシアム)

ホーム > 産総研について > 材料・化学領域 > データ駆動コンソーシアム

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (産総研) は、NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」2016-2021 年度の成果を活かして、材料開発の飛躍的なスピードアップとともに、「経験と勘」に依存した材料開発からデータに基づく材料開発への変革を目指して、2022年4月1日に「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」(略称: データ駆動コンソーシアム) を設立することとなりました。

「データ駆動型材料設計」では、図のように、材料の高機能化・新規機能生成へのニーズに基づいて、「オンデマンドデータ生成」、「データリポジトリ」、「AI解析」を回すことにより、高速に適切な材料やプロセスレシピが導き出されるシステムとなっています。

右の図をクリックすると材料探索の例が表示されます

適切な材料、プロセスレシピ

データ駆動型材料設計システム

オンデマンドデータ生成
・計算シミュレータ
・プロセス計測

AI解析

データリポジトリ

高機能化、新規機能性へのニーズ

コンソーシアムトップ

コンソーシアム紹介

技術情報

入会案内

会員様向け情報

お問い合わせ

アクセス

CD-FMat
機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

ADMAT
先端素材高速開発技術研究組合

2022年4月1日に産総研コンソーシアムを設置し、データプラットフォームを利用したデータ駆動型材料開発のための環境を提供いたします。

【連絡先】

国立研究開発法人産業技術総合研究所

材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター
データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 事務局

E-mail: M-cdmd-office-ml@aist.go.jp

【コンソーシアムHP】

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