

# 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト 計算機支援次世代ナノ構造設計基盤技術 — 計算・AI基盤技術 —

産業技術総合研究所  
機能材料コンピューショナルデザイン研究センター  
浅井美博

2022年1月18日（火）

# 主な研究開発成果とプロジェクト内連携

## 主な開発成果

- 計算シミュレータ群を開発
- データプラットフォーム群を構築
- AI 活用法を開発
- 秘匿共用技術を開発



## プロジェクト内連携

- モデル素材開発に必要な技術課題の設定
- モデル素材テーマへの応用と材料開発高速化
- 計算・計測・プロセスの三位一体連携

本報告では基盤技術部分での連携を紹介。各素材テーマでの連携はADMAT各社から報告。

## 特徴

- 逆問題解決型 AI 活用材料設計
- AI 活用による順方向計算シミュレーションの加速

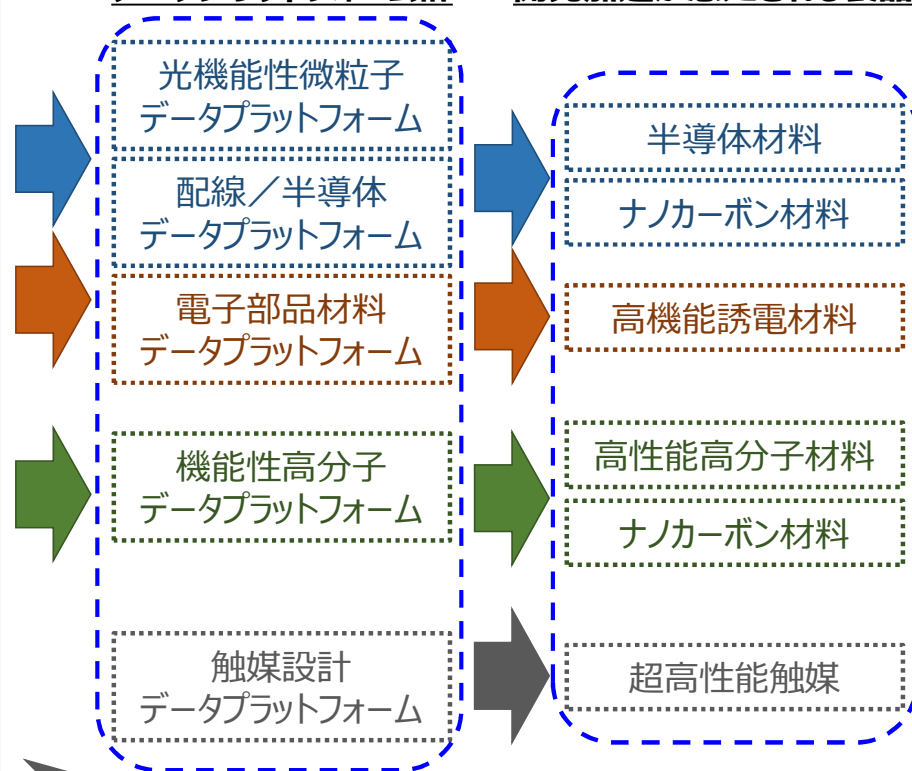
# 計算シミュレータ群の開発

## 計算シミュレータ群

- ・電気、光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・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
- ・拡張OCTA
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ
- ・ファイ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
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

## データプラットフォーム群

## 開発加速が想定される製品群



超高性能触媒

機能性化成品

# 電気、光等のキャリア輸送シミュレータ／ モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ

光機能性微粒子DPF、配線／半導体DPFにデータレポジトリを収納

## ① 大規模第一原理電気伝導計算シミュレータ

- ✓ 大規模第一原理電子状態計算プログラムCONQUESTに電気伝導計算機能を追加。従来数十Å規模が適用限界であった対象系のサイズを数百nm～μm規模に拡大。

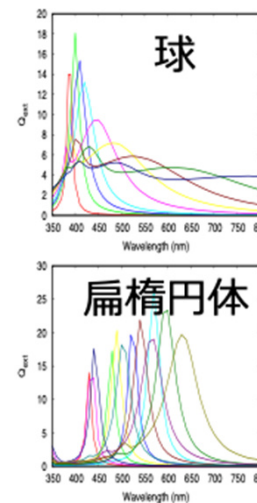
## ② 抵抗回路モジュール

- ✓ ①の結果に対する機械学習をベースにカーボンナノチューブのバンドル、フィブリルの電気伝導度を計算する補助プログラム。

## ③ DDA光学応答シミュレータ

- ✓ 古典電磁気学に基づきナノ粒子やそのフィルム分散材料の光応答係数や色味を計算するシミュレータ。誘電関数の入力によりこれらを計算する。

### ADMAT (コニカミノルタ)による③の利用例



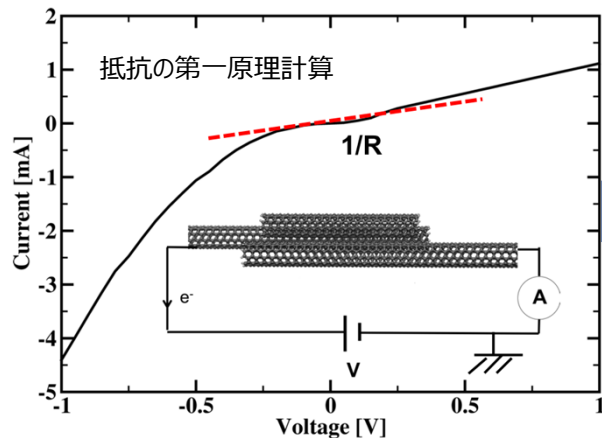
消光係数の形状・サイズ依存性に関するシミュレータレポジトリ

実験スペクトル／合成条件との相関解析

- 試料中のナノ粒子形状、サイズ分布解析
- 特定形状、サイズを持つナノ粒子の合成条件の逆予測

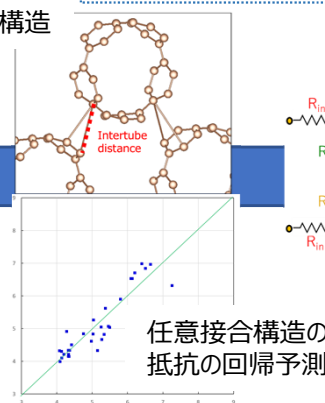
### ADMAT (古河電工)による①の利用例

➢ カーボンナノチューブの電流-電圧特性

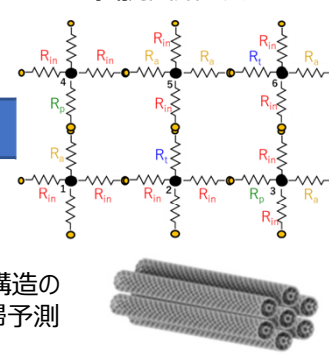


チューブ間接触抵抗データの機械学習によるバンドル抵抗予測

接合構造

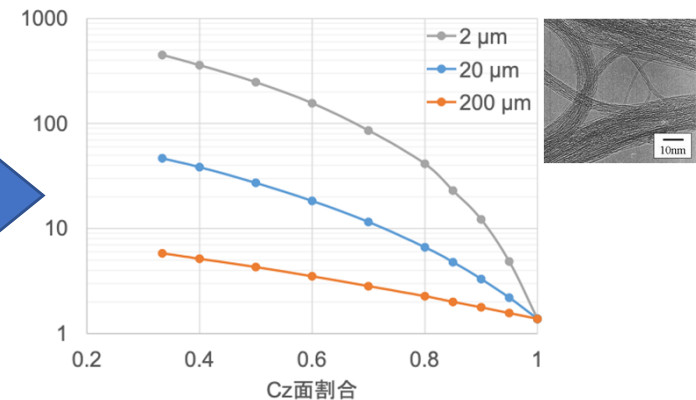


抵抗回路モデル



### ADMAT (古河電工)による②の利用例

➢ 線材抵抗率の原因解析：配向度・バンドル長依存性



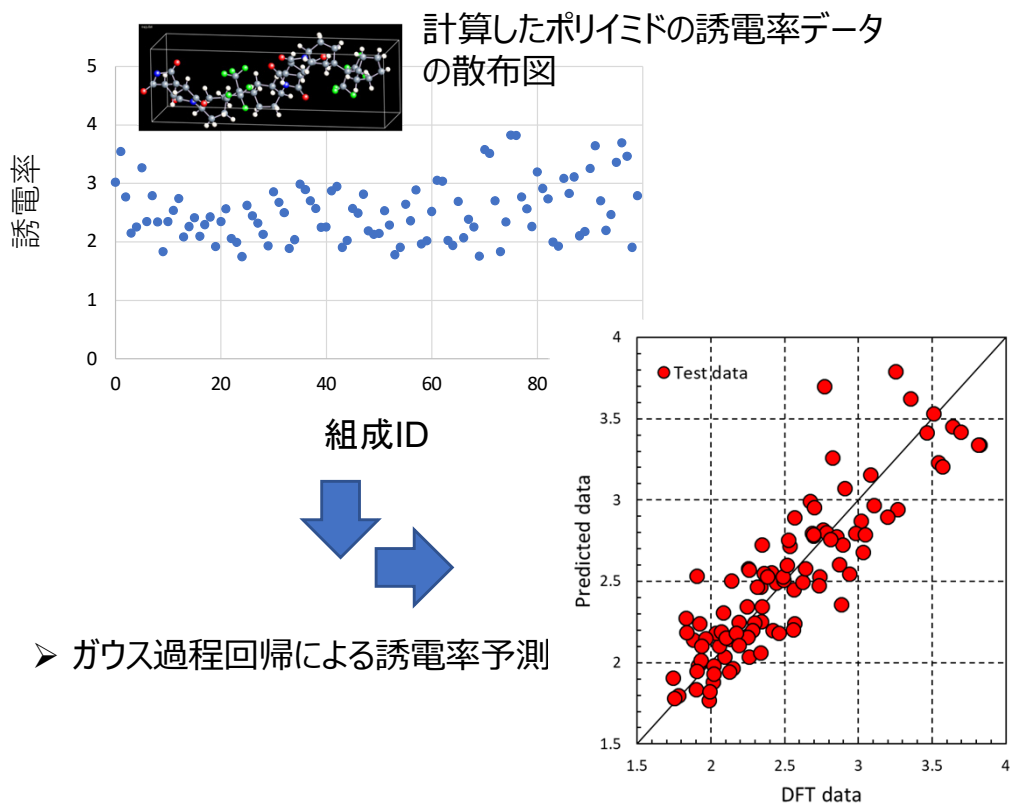
# 誘電率等の外場応答物性シミュレータ

電子部品材料DPFにデータレポジトリを収納

## ① 第一原理誘電関数・光学伝導率シミュレータ

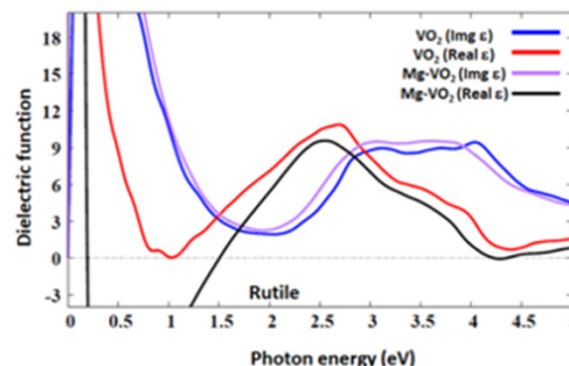
- ✓ 第一原理電子状態計算プログラムOpenMXに複素誘電関数と光学伝導率計算機能を追加。同等の計算機能を持つ他のプログラムと比較して計算時間を1/20に短縮。

### ADMAT(日鉄ケミカル&マテリアル)による③の利用例



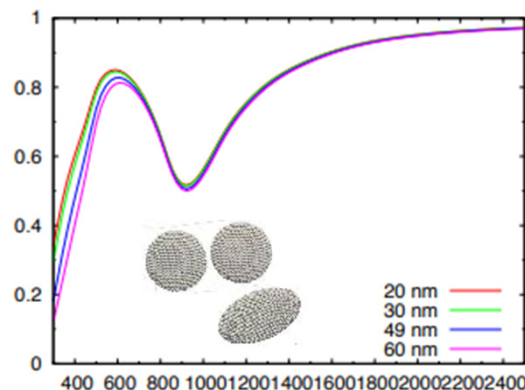
### ADMAT(コニカミノルタ)による③の利用例

バナジウム酸化物の誘電関数



DDA光学応答シミュレータ

- バナジウム酸化物ナノ粒子分散フィルムの拡散透過スペクトル



# 拡張OCTA／電圧印加粗視化分子動力学／ファイラー充填系コンポジット／ナノカーボンコンポジット用 各シミュレータ

機能性高分子DPFにデータレポジトリを収納

## ① 拡張OCTA（汎用インターフェース）

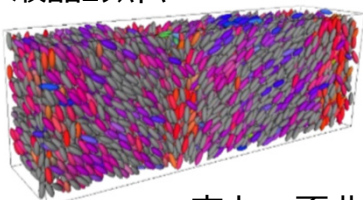
- ✓ OCTAに画像イメージローダとAIツールなどを加え、グラフィカル・インターフェースを拡張。実験画像と計算シミュレーションの連携やそれらデータのAI解析が可能となった。

## ② 電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ

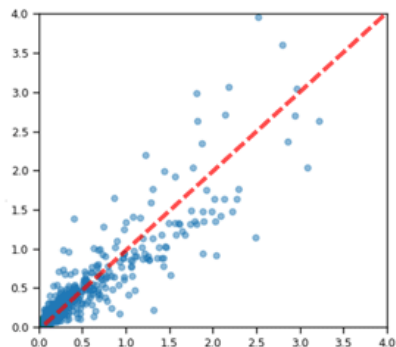
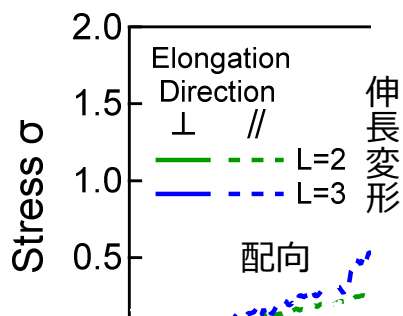
- ✓ 粗視化分子動力学シミュレーションプログラムに電圧印加の機能を追加した。液晶エラストマーの電歪特性や荷電ポリマーの電場配向などをシミュレートできるようになった。

ADMAT(パナソニック)による②の利用例

液晶エラストマー

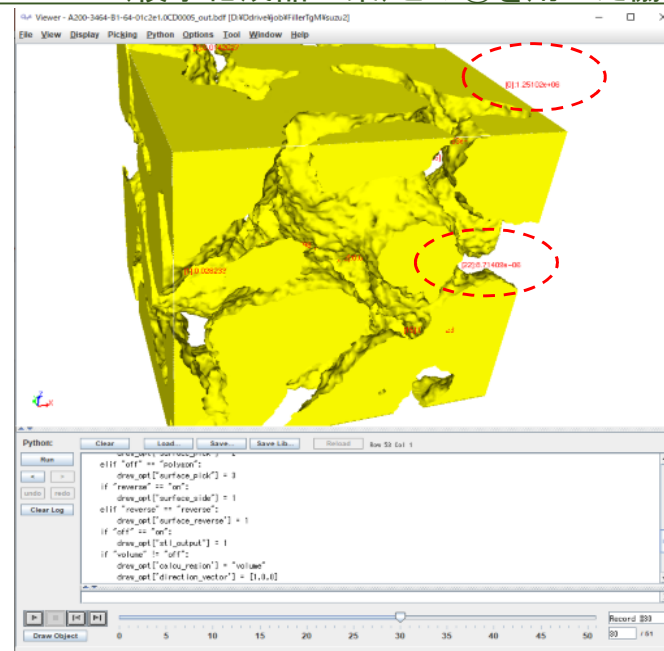


応力－歪曲線



- 液晶エラストマーの機械特性を表す回帰モデルを計算シミュレーションデータに対する機械学習により構築。

ADMAT(積水化成工業)との①を用いた協力



- 核剤とポリマーとの親和性の違いにより異なる発泡構造が形成する“アンチ核剤効果”を発見。界面原子ダイナミクス・反応シミュレータを活用する更なる研究により核剤の選択・設計による発泡サイズのコントロール法を発見。

# 反応性流体シミュレータ 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ

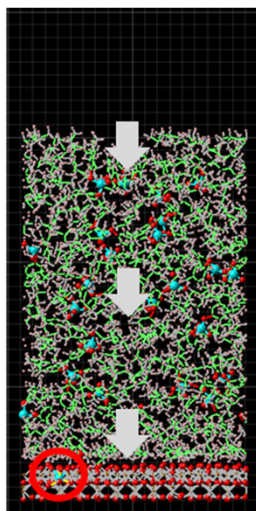
## ① 反応性流体シミュレータ

- ✓ 流体シミュレーションと量子化学計算等のマルチスケール連携よりマイクロリアクタ内での反応と流動の連成シミュレーションを実現。担持体の触媒微粒子の充填率、分布や反応を反映する熱流体シミュレーションが可能。

## ② 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ

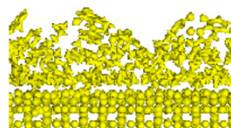
- ✓ 摩擦界面上の被覆分子の化学反応シミュレータ。ハイブリッド量子古典シミュレーションに界面に対してマクロなシアーストレスや機械ストレスを印加する機能を追加。

ADMAT (出光興産) による③の利用



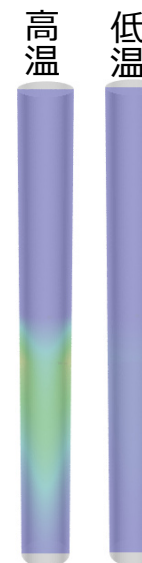
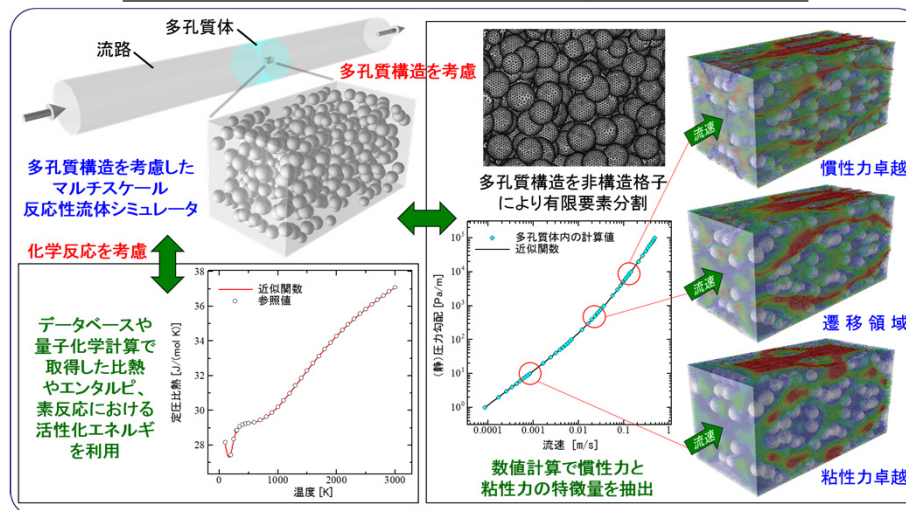
圧縮やせん断を  
シミュレータ上で  
再現

QM領域(原子数1,374)  
の電荷密度



➤ 複合系の反応設計 (添加剤設計) に活用。

ハイスループット合成実験との①を用いた連携



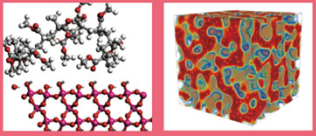
➤ シミュレータの概要 (左図)。流路内の反応生成種の空間分布。触媒担持体は流路中央に位置。反応障壁より高温の場合に生成種が発生。

# データプラットフォーム（DPF）群の構築

## 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



**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**

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

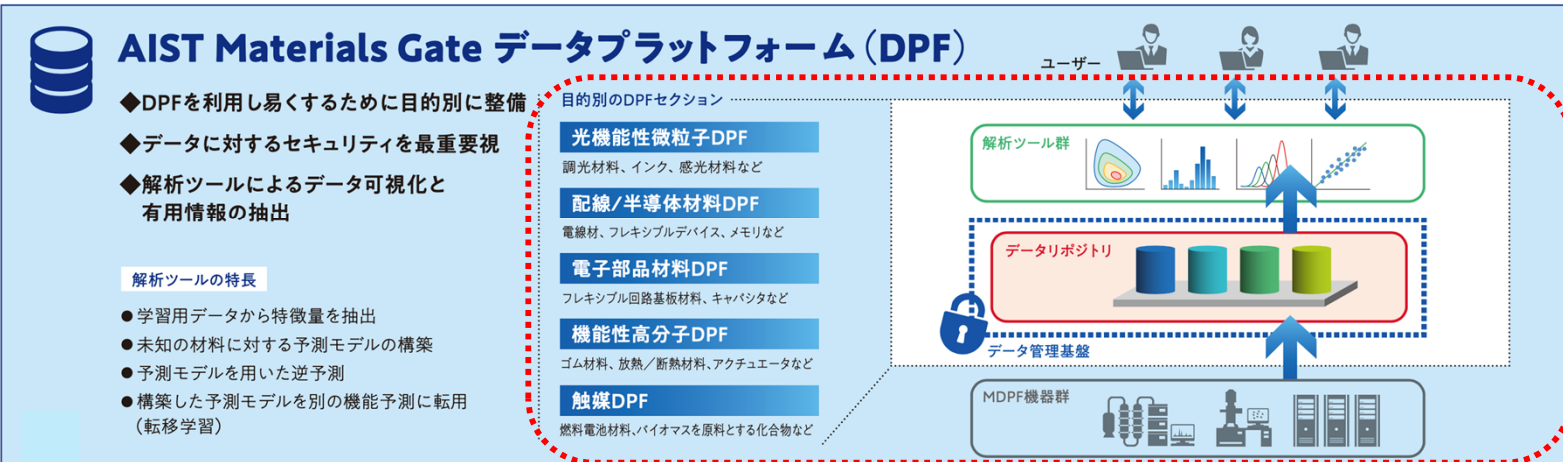
解析ツール群

データリポジトリ

データ管理基盤

MDPF機器群

ユーザー



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



**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



Cf) 「データ駆動型材料設計技術利用促進コンソーシアム」パンフレット



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】

- 可視から赤外領域での光機能（消光、散乱、吸収率）と組成・粒径・形状等との相関データ（2.5万件）：
  - ✓ 組成： 遷移金属を中心に主な単元素材料を網羅。チタン酸化物等の化合物材料も含む。
  - ✓ 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）

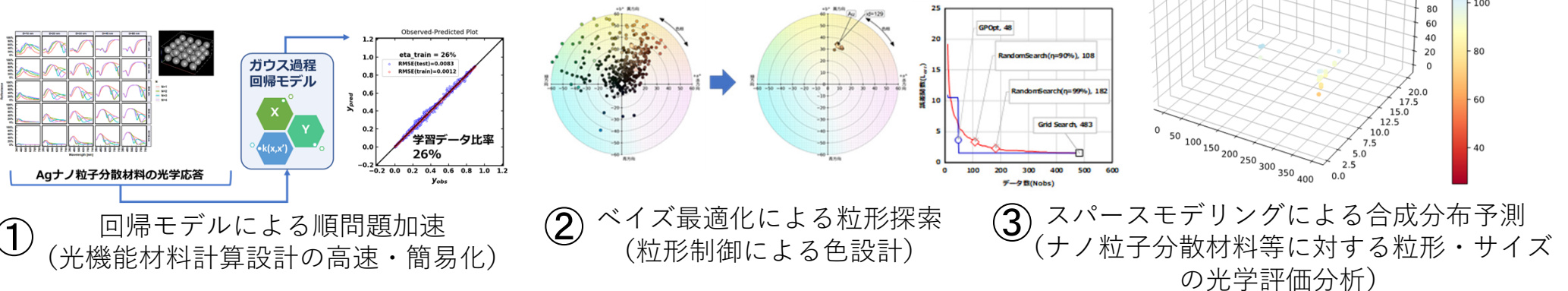
### 【計測およびプロセスデータ】

- 分光計測データ（35件）
  - ✓ 単一微粒子の光散乱スペクトル
    - 精密顕微分光装置（4件）
  - ✓ 微粒子の合成条件と形状、粒径分布
    - ナノプローブ（31件）

### 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

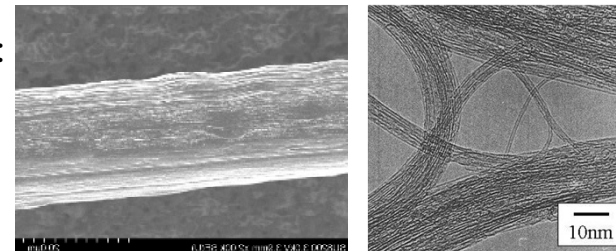


材料：カーボン材料、有機半導体・EL材料等の配線/半導体材料  
 データ：電気伝導度、有機半導体の分子・結晶構造と有効質量

## 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（160件）：
  - ✓ 組成：単体CNTのカイラリティ
  - ✓ モルフォロジー構造：CNT間、バンドル間の距離、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（50件）



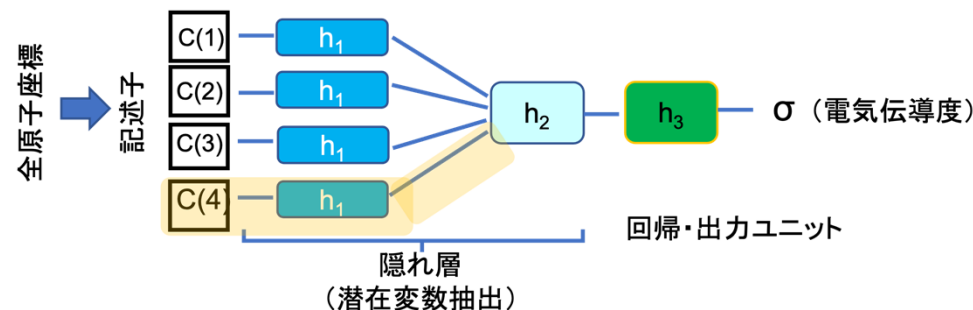
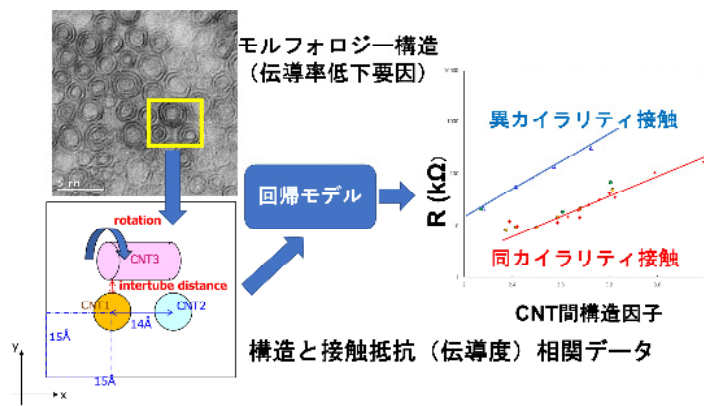
### 【計測データ】

- 材料評価データ（~10000件）
  - ✓ CNT線材の伝導度、有効長、配向度、空隙率、TEM・SEM画像
    - TEM・SEM画像 8000
    - 電気伝導特性データ 2000
    - 放射光、X線データ、FIR、ラマンスペクトル 600

### 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)

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

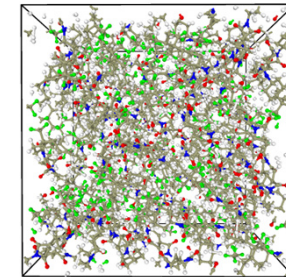
## 電子部品材料DPFの収納データ

### 【計算シミュレーションデータ】

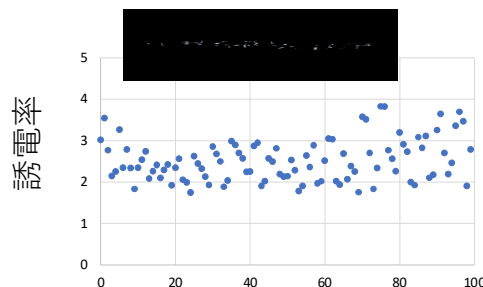
- 誘電特性（GHz-PHz領域を含む）と組成・構造との相関データ（440件）
  - ✓ 組成： 有機材料350件（ポリイミド100件、Khazana DBに掲載の高分子物質250件）、無機材料90件（27種類のドーパントを含むバナジウム酸化物、ペロブスカイト型酸化物60件など）
  - ✓ 物性： 複素誘電関数、光学伝導度、バンドギャップ、電子状態密度

### 【計測データ】

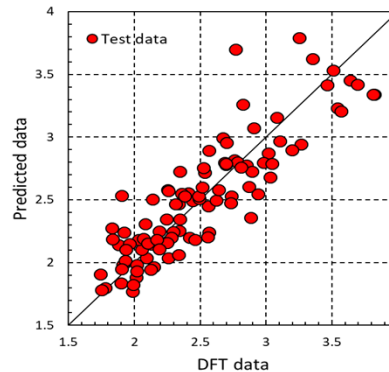
- 誘電物性実験データ
  - ✓ 複素誘電率
    - 共振器法、伝送法、走査型マイクロ波顕微鏡
  - ✓ 誘電体損失を含む伝送損失
    - 平面回路計測



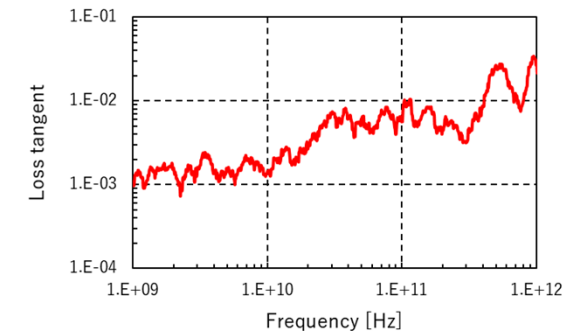
## 電子部品材料DPF上の解析ツール



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：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

- 高分子-無機フィラー間相互作用（15件）
  - ✓ 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
- フィラー分散構造（140件）
  - ✓ フィラーとマトリックスポリマー間の相互作用を変えた際のフィラー分散構造
- ポリマーブレンド相分離構造（1万件）
  - ✓ 分子鎖長・ブレンド比・相互作用を変えた際の相分離構造
- 発泡構造（125件）
  - ✓ 核剤数・発泡倍率・核剤-ポリマー間相互作用を変えた際の発泡構造

### ○高次構造と物性との相関データ

- 熱拡散係数（フィラー分散系：2000件、ポリマーブレンド系：270件）
  - ✓ 各種フィラー分散、ポリマーブレンド構造に対して行った熱拡散計算の結果
- 線形弾性率（合成ゴム系：770件、ポリマーブレンド系：270件）
  - ✓ 各種フィラー充填ポリマーブレンド系、ポリマーブレンド構造に対して行った線形弾性変形計算の結果
- 応力-ひずみ挙動（1300件）
  - ✓ 液晶に関わるパラメータを変えた際の応力-歪曲線の結果

【計測データ、プロセスデータ】

### ○計測・プロセスデータ

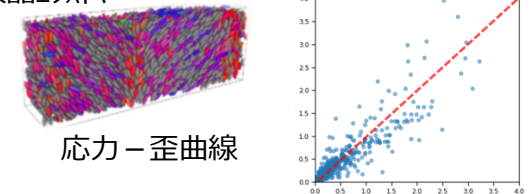
- 組成・混練条件と分散構造の相関（発泡10件、混練10件）
  - ✓ 連続押し出しのプロセスデータ
- CNT分散フィルム構造（200万件）
  - ✓ 各種CNTを分散させたCNT膜のSEM画像、及びGANによるFake画像

### 機能性高分子材料設計の用途例

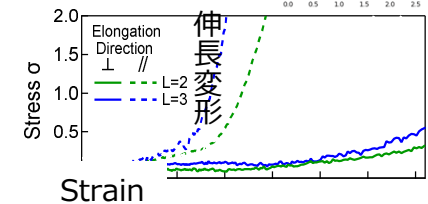
- ✓ ゴム材料（フィラー分散、粘弾性挙動）
- ✓ 放熱/断熱材料（熱伝導）
- ✓ アクチュエーター（弾性挙動）
- ✓ 微多孔膜（相分離構造、物質拡散）

## 機能性高分子DPF上の解析ツール

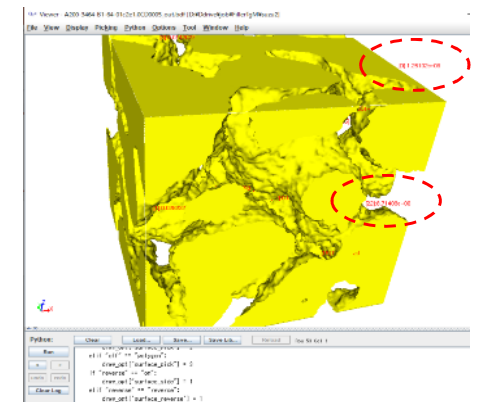
液晶エラストマー



応力-歪曲線



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）

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】

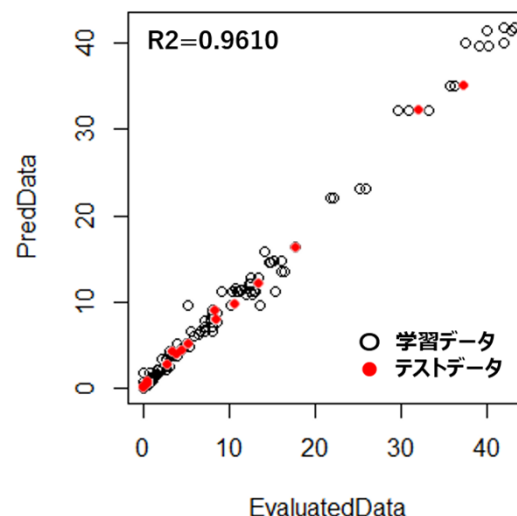
- 触媒候補物質（固定化触媒、金属・金属酸化物材料）の物性及び化学データ
- 金属酸化物触媒（典型元素：14種類、遷移金属：15種類、ランタノイド：11種類-計40件）
- コアシェル触媒（コアになる遷移金属：12種類-計12件）
  - ✓ 金属酸化物：金属と酸素で構成される触媒の表面構造データ
  - ✓ コアシェル触媒：白金（表面）、他金属（コア）からなるコアシェル触媒の構造データ
  - ✓ 各触媒候補材料の物性値：軌道エネルギー、バンドギャップ、表面電荷、表面の酸・塩基性指標

### 【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
- 計測と計算シミュレーションによる解析
  - ✓ 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

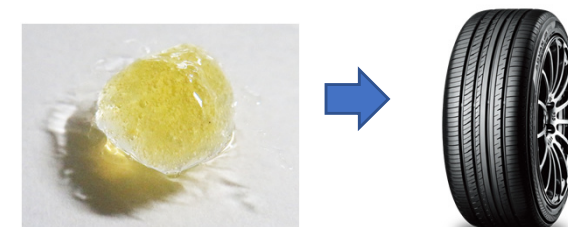
## 触媒DPF上の解析ツール等

- 回帰モデルによる触媒活性の予測（合成ゴム原料用触媒の活性予測、触媒活性に影響を及ぼす物理・化学的因子の特定）



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



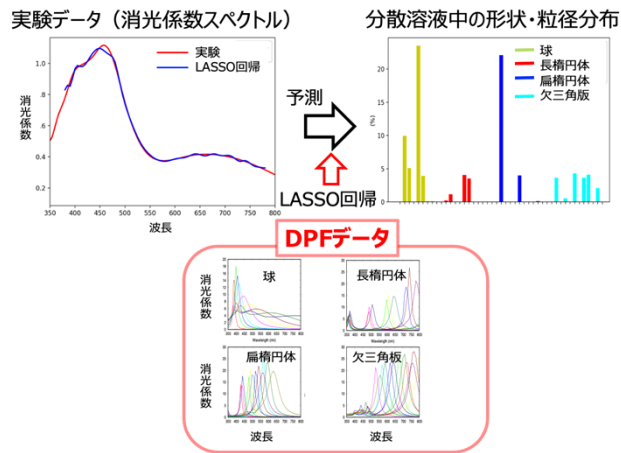
合成ゴム（ポリブタジエン）

# データプラットフォームの活用例

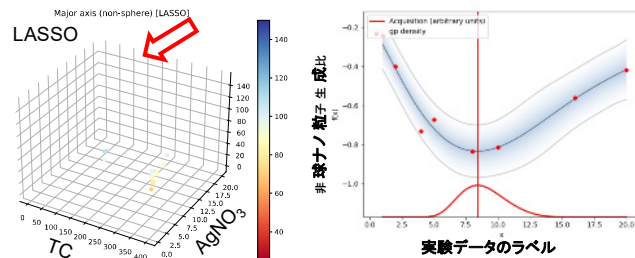
## 計算データと実験データ

### 光機能性微粒子DPF

DPF上の消光係数の計算データと実験データの回帰解析から試料中の粒径、粒形分布を予測



粒径と合成条件の相関データから合成条件設計

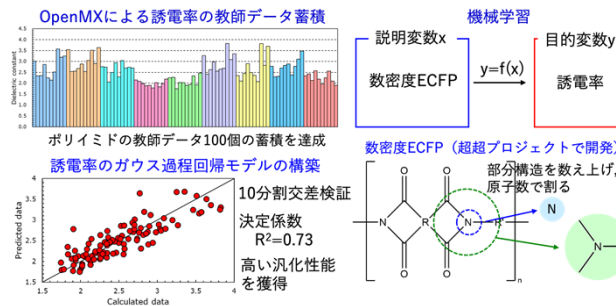


ADMAT (コニカミノルタ)

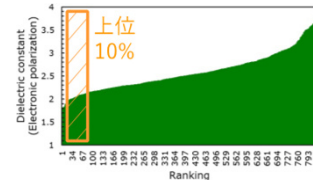
## 計算データ (と実験検証)

### 電子部品材料DPF

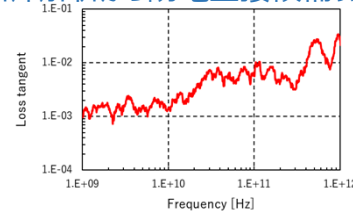
DPF上の誘電率（電子寄与部）の計算データの回帰解析から候補リストを作成



候補リストから上位10%を選択



絞り込んだ候補に対してMD計算データを作成その回帰解析から誘電正接候補リストを作成



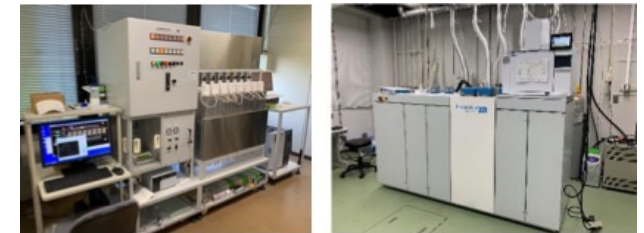
ADMAT (日鉄ケミカル & マテリアル)

## 計算データと実験データ

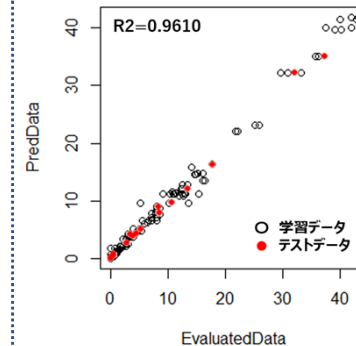
### 触媒DPF

DPF上の金属酸化物のバンドギャップ、表面電荷、表面の酸・塩基性指標等の計算データとハイスループット実験から得られる収率、触媒活性などの実験データを回帰解析

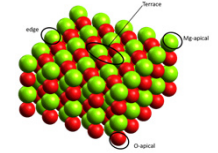
ハイスループットフローリアクタによる触媒活性評価



収率の回帰モデル精度



ルイス酸性・塩基性が良い説明変数となっている



ADMAT (横浜ゴム)

# A I 活用法の開発

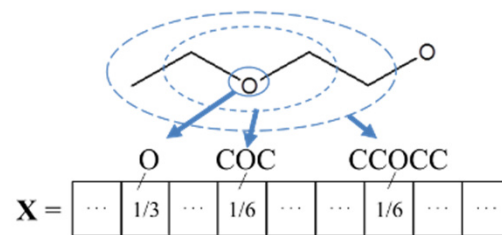
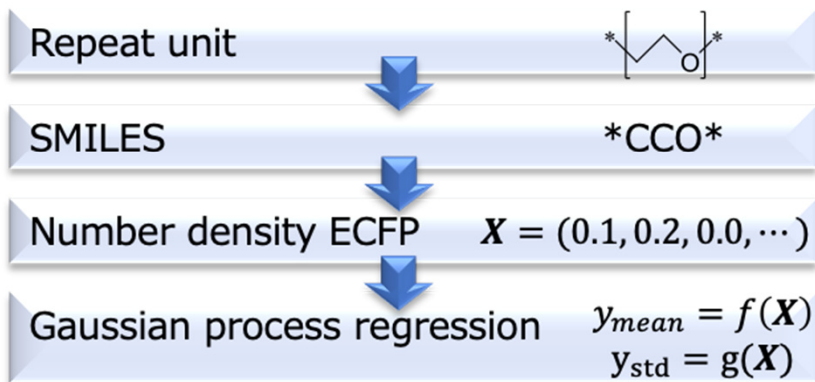
- 構造記述子の開発
  - ✓ 数密度Extended Circular FingerPrints (ECFP)
  - ✓ Machine Learning-aided Local Structure Analyzer (ML-LSA)
- 深層学習による材料設計手法の開発
  - ✓ 敵対的生成ネットワーク (GAN) 生成画像データに対する深層学習
  - ✓ シミュレーションデータに対する深層学習
- 大量実験スペクトルの解析手法の開発
  - ✓ Expectation-Maximization (EM) アルゴリズム
- 欠損データの解析手法の開発
  - ✓ 混合ガウス回帰モデル (GMRM)

# 構造記述子の開発（1）

## 数密度Extended Circular FingerPrints (ECFP)

ポリマーの繰り返しの構造特徴を数値化：数密度ECFP = 通常ECFP / 構成原子数

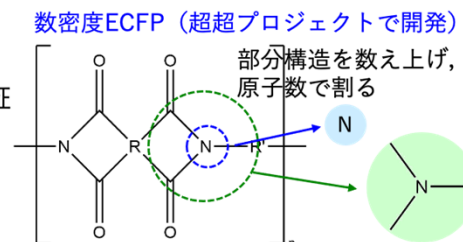
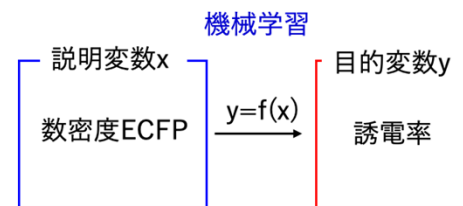
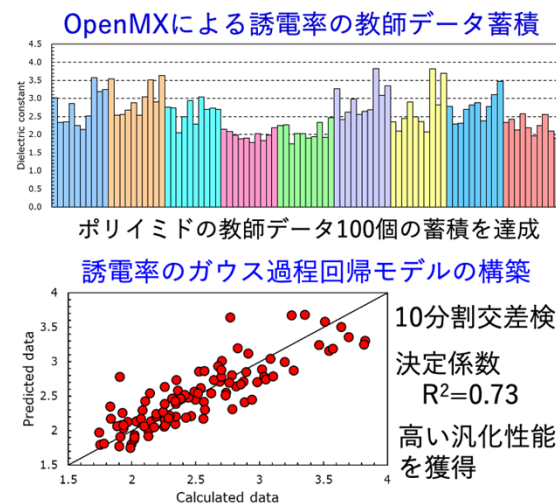
### 【数密度ECFP】技術の確立



- ある原子を中心に円を描く
- 円の中の部分構造の種類と割合を特定
- 1024次元のベクトルを構築

特許出願(特許第06633820号,特開2020-71827)  
T. Minami et al., MRS Advances (2018).  
産総研プレスリリース、2018年11月27日

ADMAT（昭和電工）が開発。  
ADMAT他社組合員企業においても多く利用。  
ADMAT（日鉄ケミカル&マテリアル）での利用例：



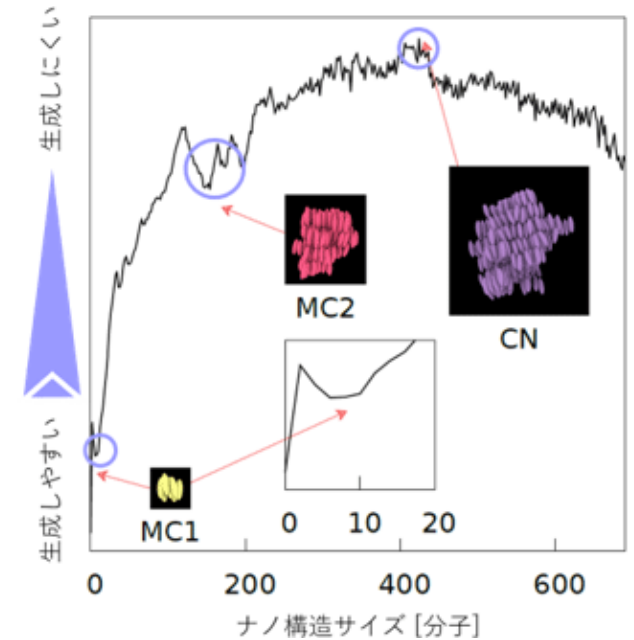
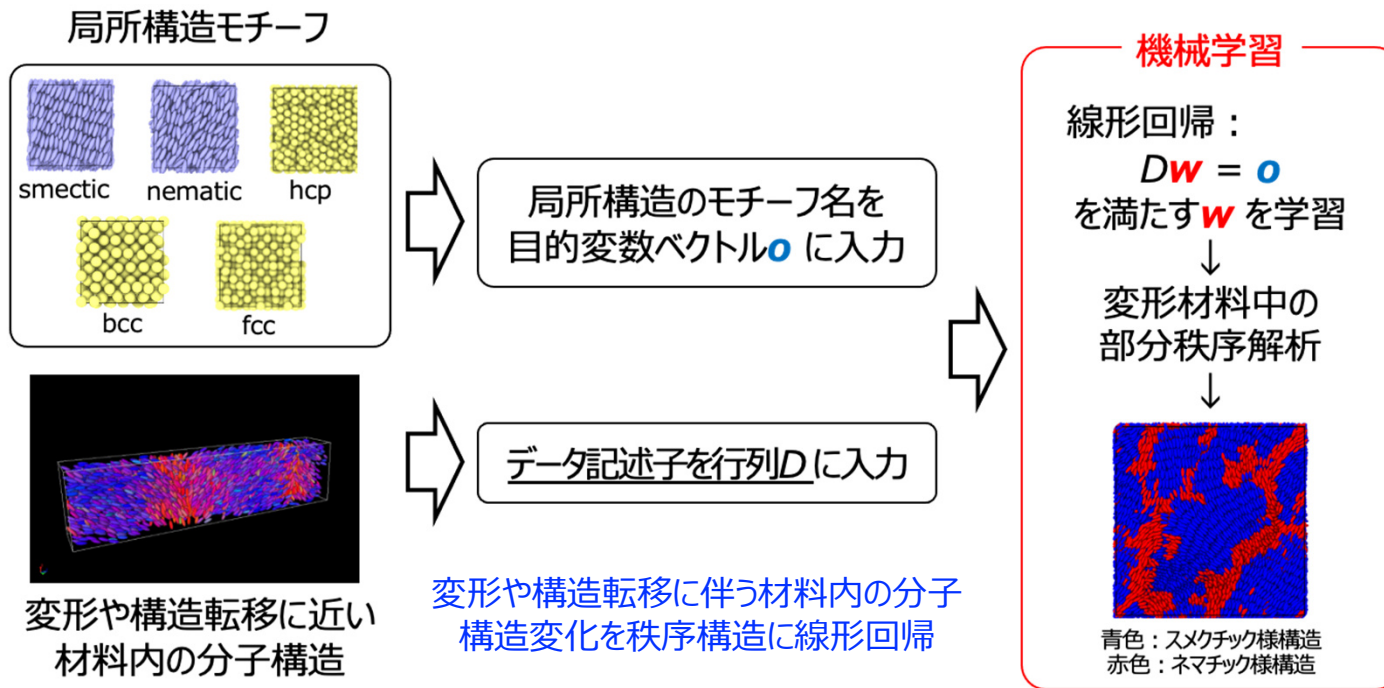


# 構造記述子の開発（2）

## Machine Learning-aided Local Structure Analyzer（ML-LSA）

変形材料に対する大域構造記述子の生成手法を開発

臨界現象解析で有効性を検証

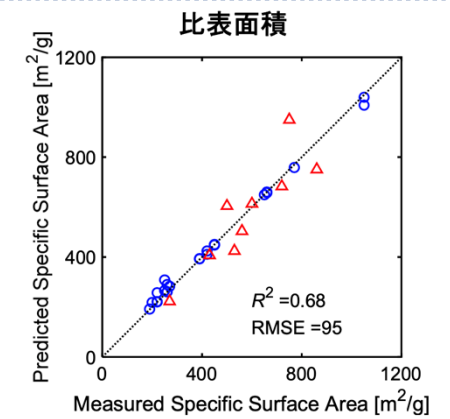
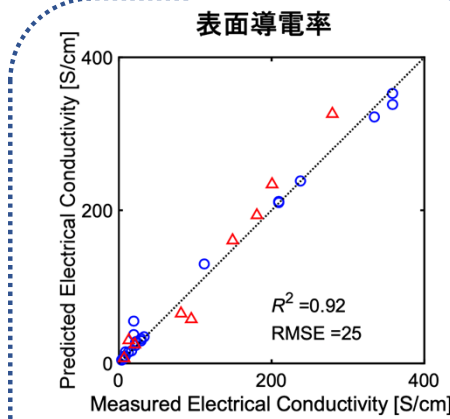
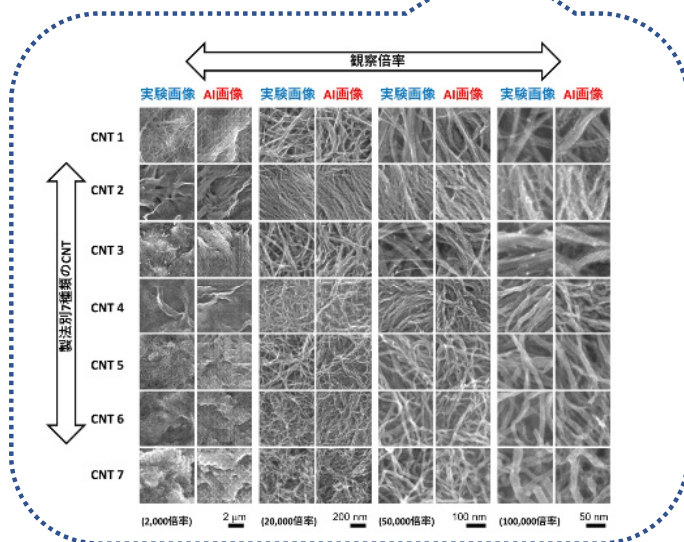
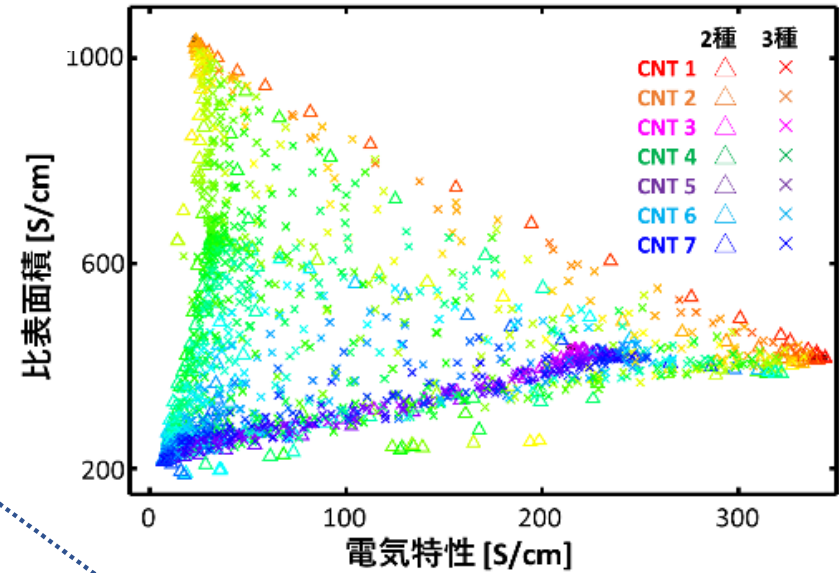
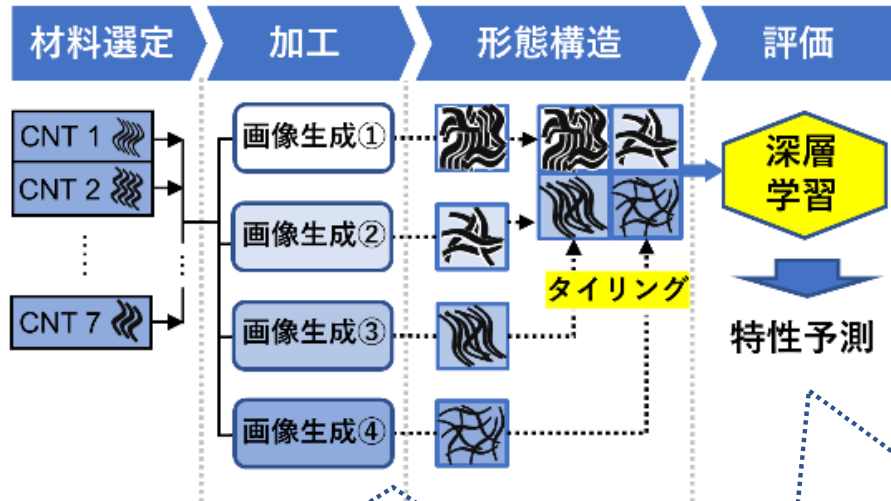


核生成が3段階で進む事を説明

九州大学との共同研究  
Nature Communication (2021)  
NEDOプレスリリース：2021年9月10日  
産総研プレスリリース：2021年9月10日

# 深層学習による材料設計手法の開発（1）

敵対的生成ネットワーク（GAN）生成画像データに対する深層学習

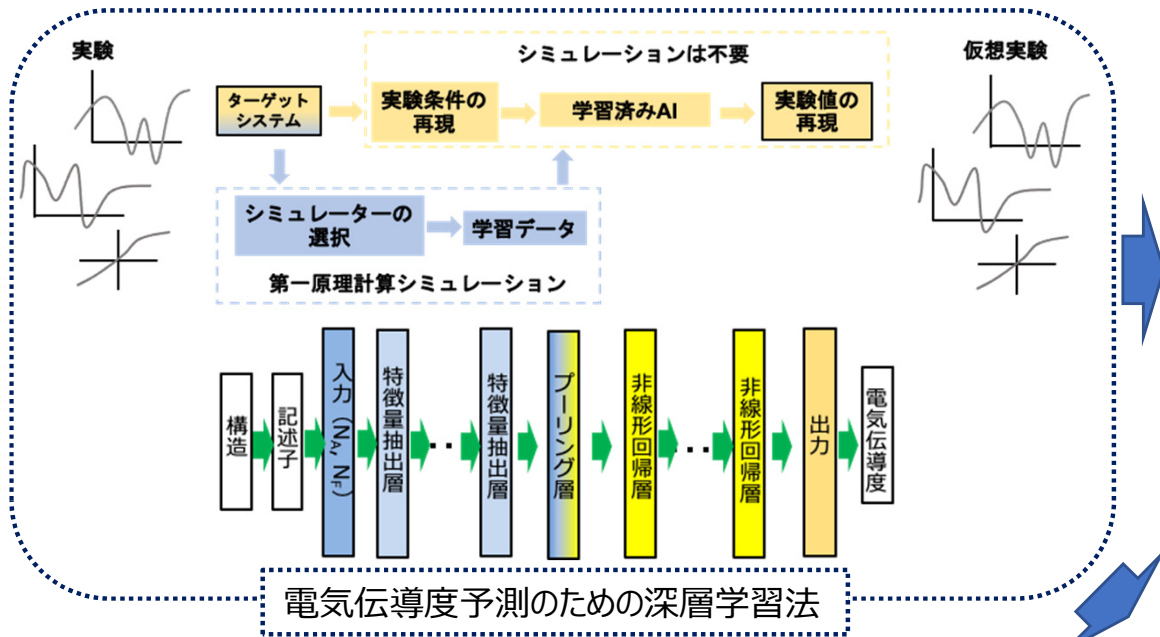


青色：教育に用いたCNT膜の教育に用いなかった画像  
赤色：教育に用いていないCNT膜の画像

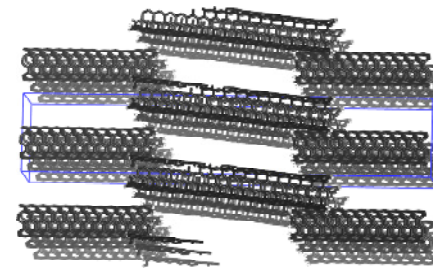
Commun. Mater.(2021)、NEDOプレスリリース：2021年8月30日、産総研プレスリリース：2021年10月19日

# 深層学習による材料設計手法の開発（2）

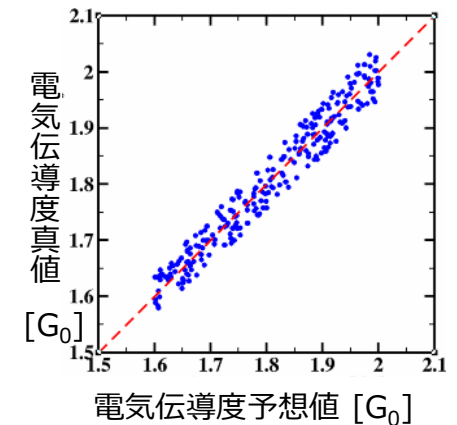
## 計算シミュレーションデータに対する深層学習



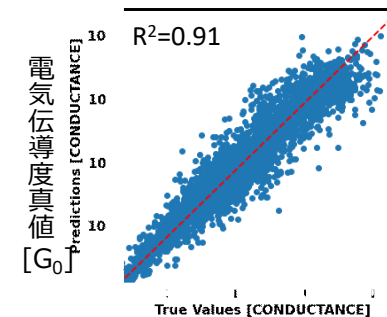
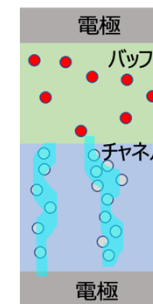
### CNT配線材料への応用



CNTバンドルの電気伝導度とバンドル間接触抵抗の予測

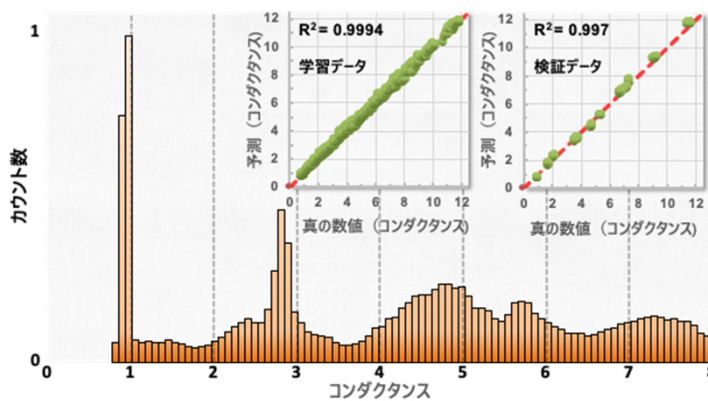


### 逆問題への応用テスト



電気伝導度予測値 [G<sub>0</sub>]

不揮発性メモリ材料の抵抗設計：  
回帰モデルの構築



STM計測実験との比較検証

Phys. Rev. Lett. (2021)

NEDOプレスリリース：2021年4月27日

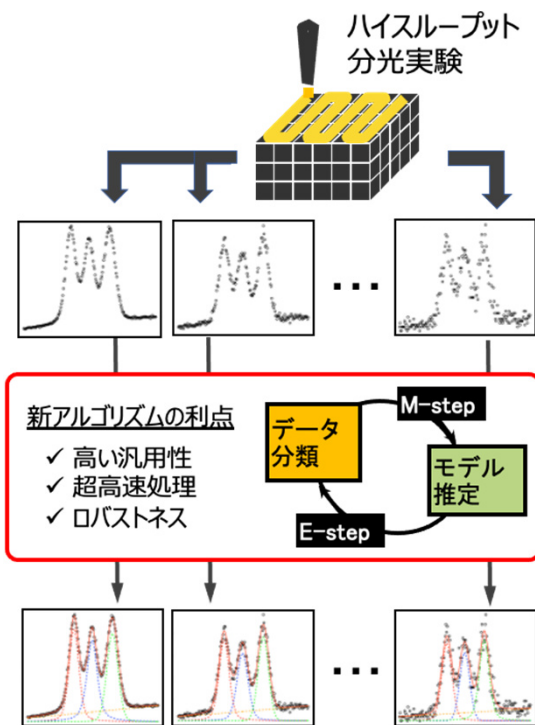
産総研プレスリリース：2021年4月27日

日本経済新聞、日刊産業新聞、日刊工業新聞

# 大量実験スペクトルの解析手法の開発

## 欠損データの解析手法の開発

### 大量実験スペクトルの解析手法の開発



分光実験は大量のスペクトル情報をうみだすが、人的解析ではそれを有効利用できていない。AI技術のひとつのEMアルゴリズムに基づきながら、汎用性、高速処理、安定性を実現するための拡張を施したECMアルゴリズムを開発した。X線光電子スペクトルデータに適用して有効性を示した。

### 欠損データの解析手法の開発

#### ○共有データの問題

各人興味ที่異なりデータが穴あき

index	X1	X2	Sim1	Sim2	Exp
1	1	NA	4	5	5
2	1	2	NA	1	2
3	2	3	NA	NA	NA
4	1	2	NA	1	1

① 欠損パターンごとに尤度計算し、②同時分布 $p(X,Y)$ をGMMで学習した後、③条件付分布 $p(Y|X)$ を予測 = GMR。

#### ○提案手法 GMRM

Gaussian Mixture Regression for Missing data

index	X1	Sim1	Sim2	Exp
1	1	4	5	5

index	X1	X2	Sim2	Exp
2	1	2	1	2
4	1	2	1	1

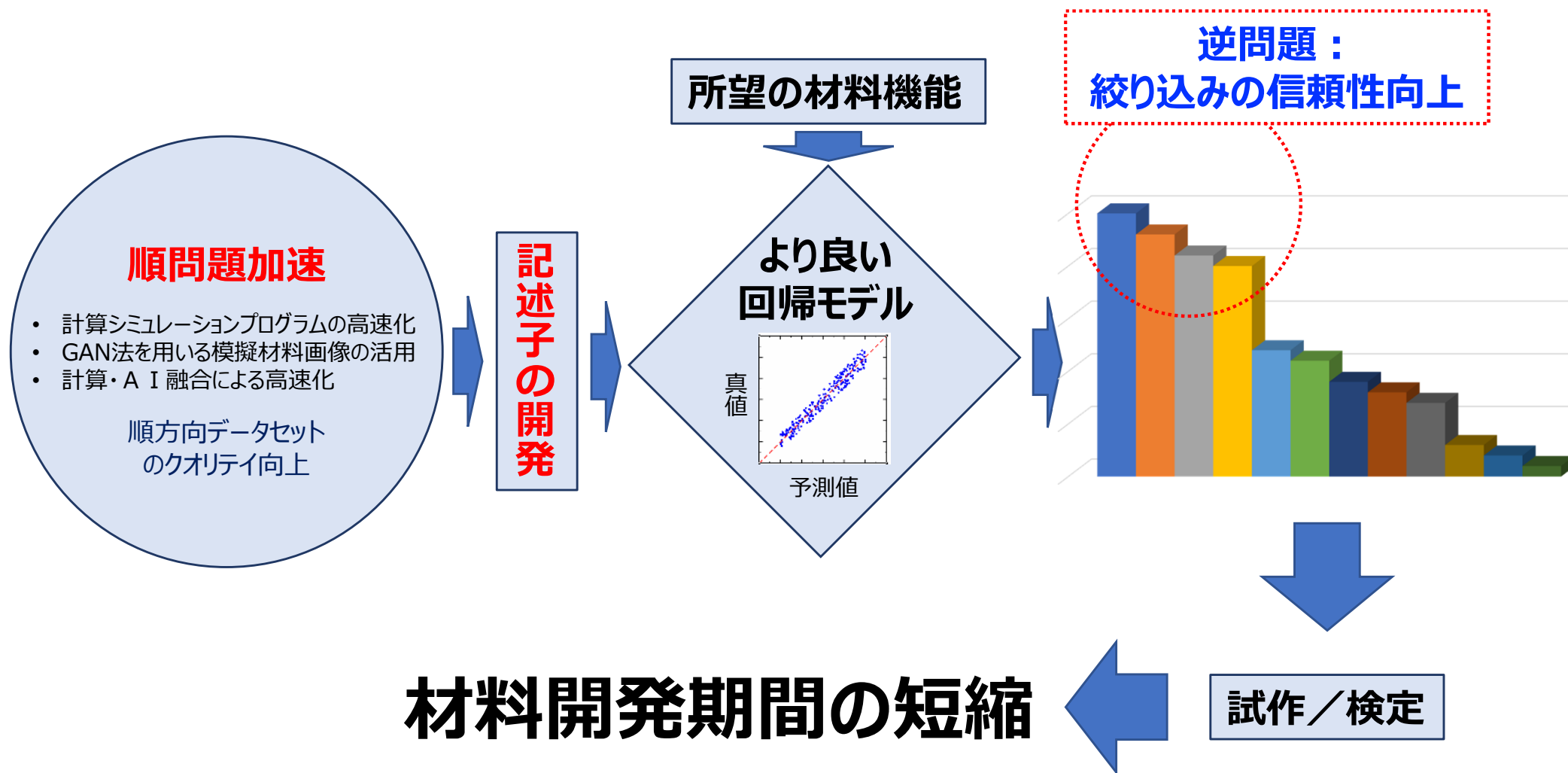
index	X1	X2
3	2	3

① 欠損値の取扱いに試行錯誤不要②直接逆解析が可能 (GMRの特徴:  $p(X,Y)$ から $p(X|Y)$ を求める)

という特徴をもつ。

ADMAT (昭和電工マテリアルズ) 特許出願中

# 開発したAI活用法の特徴：順問題加速と逆問題



# 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

Aのデータ		Bのデータ		Cのデータ	
x	y	x	y	x	y
0.8	0.6	2.1	2.5	4.9	4.6
2.8	3.1	4.1	3.5	8.3	7.9
3.2	2.9	7.1	7.3	9.6	9.2

データを共有しない

データを無意味情報として共有する

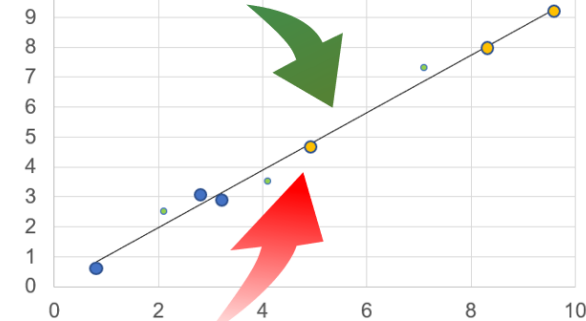
Aから見る全データ Bから見る全データ Cから見る全データ

x	y	x	y	x	y
0.8	0.6	&fv	z!g	&fv	z!g
&t%	3\$!	2.1	2.5	&t%	3\$!
2.8	3.1	0#s	>o4	0#s	>o4
3.2	2.9	}ed	c/w	}ed	c/w
df\$	Qe@	4.1	3.5	df\$	Qe@
#ws	9rx	#ws	9rx	4.9	4.6
\$%#	{[5	7.1	7.3	\$%#	{[5
5&&	~3!	5&&	~3!	8.3	7.9
ui*	}0+	ui*	}0+	9.6	9.2

9個中、自己所有の3つの値のみ知っていて、  
その他は無意味情報のまま共有

## 回帰計算の例

全開示データによる回帰計算との比較



3つとも一致

(A,B,Cそれぞれ)  
9個の共有データを用いた  
回帰計算

共有しないが共用する

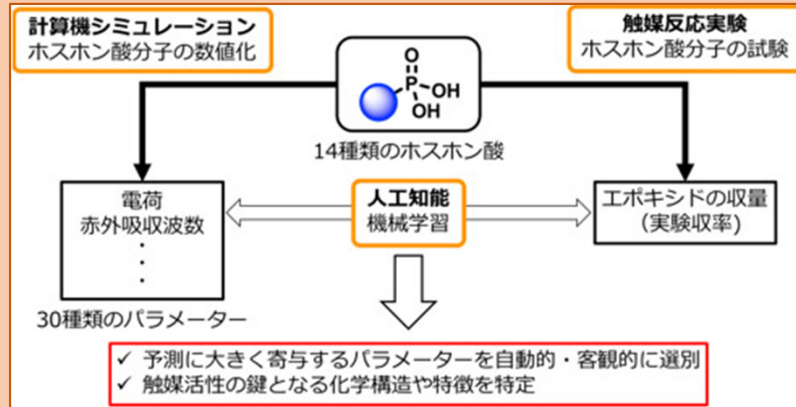
管理者から  
見る全データ

x	y
&fv	z!g
&t%	3\$!
0#s	>o4
}ed	c/w
df\$	Qe@
#ws	9rx
\$%#	{[5
5&&	~3!
ui*	}0+

- ✓ 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

# その他のプロジェクト内連携例

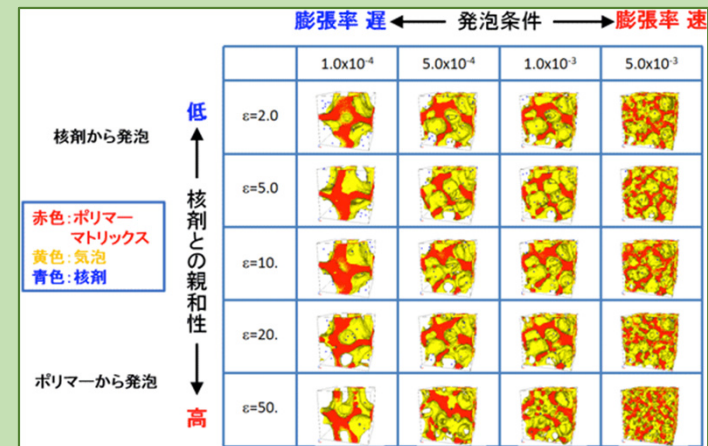
## 計算シミュレーション と実験のデータ連携



人工知能 (AI) で触媒反応  
の収率を予測

合成：触媒設計  
産総研プレスリリース：2018年1月31日

## 計算シミュレーションに よる原因／機構解明



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

材料プロセス：高分子発泡  
産総研プレスリリース：2018年11月26日

# まとめ

開発成果：計算シミュレータ群、データプラットフォーム群、A I 活用法、秘匿共用技術

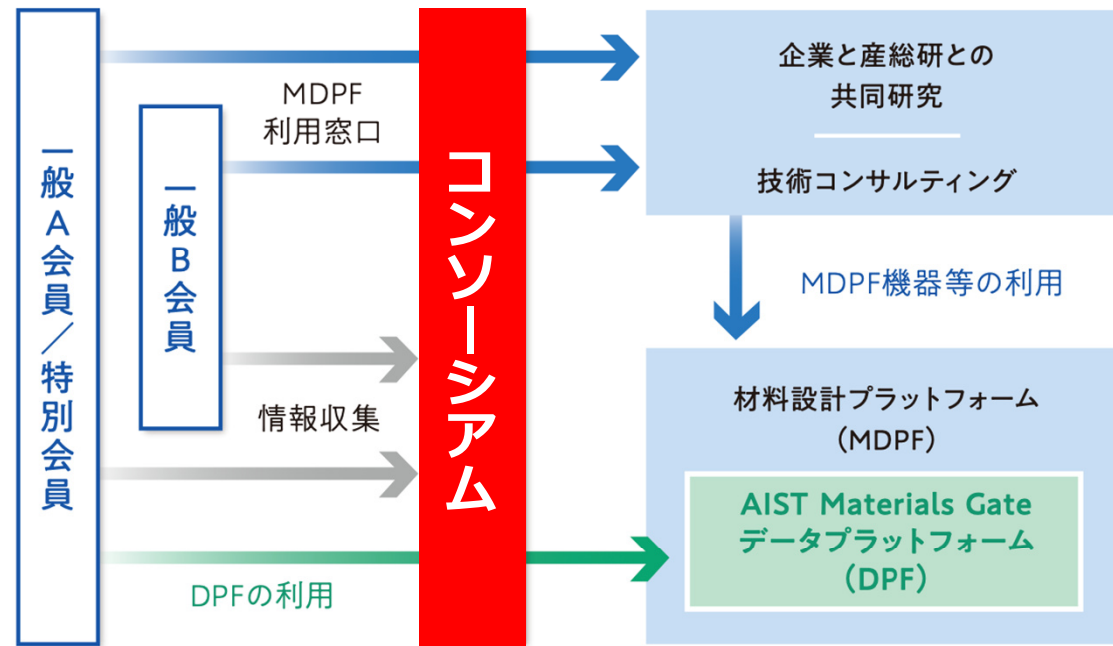
開発成果の普及

幅広い企業の参加を募る

## データ駆動材料設計技術 利用推進コンソーシアム



 産総研 国立研究開発法人  
産業技術総合研究所



Cf) 「データ駆動型材料設計技術利用促進コンソーシアム」パンフレット