

材料開発でのプロセスインフォマティクス活用を促進する マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム

棚池 修・安岡 正喜・石原 正統

1. はじめに

日本のマテリアル分野での研究開発は国際的にも長年に亘り高い水準にあり、今後の我が国の経済を支える産業競争力維持の切り札としても期待が寄せられている。一方、高い世界シェアをこれまで獲得していた日本の材料、特に高機能材料に関して新興国の追い上げに直面するケースも多く、更なる研究開発の強化をおこなう必要性がある。また、使用されるデバイス等の製品の高機能化に伴って材料に求められる多様且つ複雑な高い特性のニーズに今後も対応し続けるためにも、官民一体で世界をリードできる新しいマテリアル開発基盤の構築が重要である。内閣府の統合イノベーション戦略推進会議では、2021年4月にマテリアル革新力強化戦略¹⁾が策定され、その中で、国際的競争力の高い材料(触媒、セラミックス、セルロースナノファイバーなど)を重点領域として定め、日本企業の世界最先端のポテンシャルを維持するために革新的製造プロセスの開発と社会実装を目指すとしている。

近年、コンピュータの進歩により、材料開発におけるシミュレーションや情報科学(インフォマティクス)を積極的に

用いるデータ駆動型研究の試みがトレンドとなっており、実験点数の積み重ねのアプローチに依らない、AIを駆使した新しい、且つ、迅速な研究開発の手法として期待されている。(国研)産業技術総合研究所(以下、産総研)では、2020年度補正予算:重点産業技術に係るオープンイノベーション拠点整備事業により、材料試作から製品開発までのプロセスインフォマティクス(PI)に基づいた材料開発を進めるイノベーション拠点として、マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム(MPIプラットフォーム)を所内に整備し、2022年4月より運用を始めたところである²⁾。本稿では、このMPIプラットフォームについて紹介したい。

2. 材料開発におけるプロセスインフォマティクス

革新的な材料を市場に送り出すまでの開発工程では、まず素材の探索に始まり、部材としての試作の後に、スケールアップなどを目的とした合成や加工等の工夫による製造プロセス開発までへと至る過程が一般的である。ラボレベルの基礎研究で新しい素材が見出された後、産業レベルでの実用化に至るまでには、量産化やコスト低減、環境適用性などを解決するための様々なプロセスを検討しなければいけないことは共通の認識であろう。インフォマティクスを活用する材料開発の場合でもこの過程は同様であり、素材から試作段階における材料予測を基本とするマテリアルズインフォマティクス(MI)と、合成や加工、製造までのプロセス条件の予測をおこなうプロセスインフォマティクス(PI)とに分けて適用することが効果的である。図1(上)には、両者の繋がり概念図を示した。どちらも、従来は実験の試行の繰り返しによって得られている最適化をAIが代行することとなり、その結果、開発時間の大幅な短縮を見込むことができる。対象となる素材や製品にマッチしたMIとPIの計算モデルをそれぞれ適切に構築して組み合わせ、両輪として開発に活用することが理想的である。

MIやPIの定義は、メディアや取り扱う技術分野により表現の仕方こそ差があるが、概ね、MIは「何を作れば良い

Materials Innovation Platform for Using Process Informatics in
Development of Materials

Osamu TANAIKE

現在 (国研)産業技術総合研究所 材料・化学領域連携推進室
連携主幹

連絡先: 〒305-8560 茨城県つくば市梅園1-1-1

E-mail o-tanaike@aist.go.jp

Masaki YASUOKA

現在 (国研)産業技術総合研究所 材料・化学領域連携推進室
連携主幹

連絡先: 〒305-8560 茨城県つくば市梅園1-1-1

E-mail yasuoka-m@aist.go.jp

Masatou ISHIHARA

現在 (国研)産業技術総合研究所 材料・化学領域連携推進室
室長

連絡先 〒305-8560 茨城県つくば市梅園1-1-1

E-mail m.ishihara@aist.go.jp

2023年3月31日受理

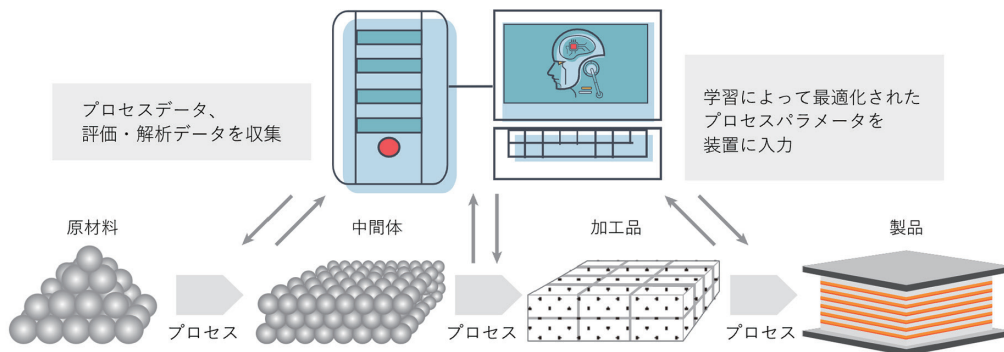
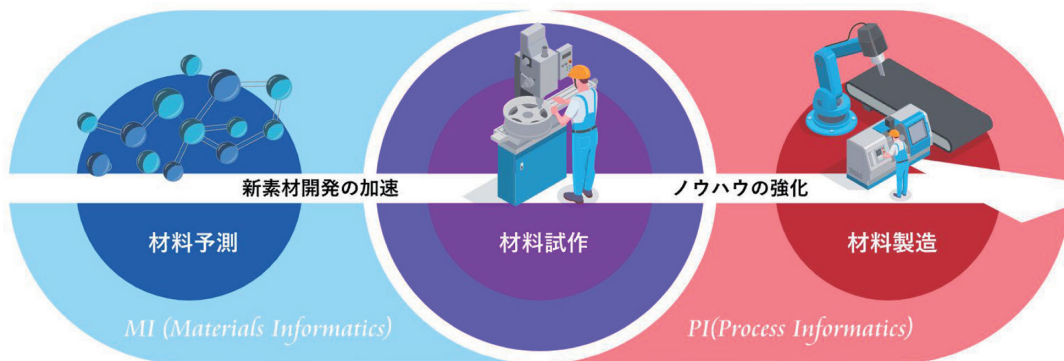


図1 (上)材料開発におけるインフォマティクスの利用概念, および, (下)PIによる材料製造プロセス最適化イメージ (MPIプラットフォーム公式WEBページ²⁾より引用)

のか?」という疑問に対して望む機能を有する物質・材料を効果的に探索する方法であり, 対してPIは「どうやって作れば良いのか?」という疑問に対して目的材料の合成プロセスを効率的に探索する方法として区別ができる。MIでは新たな物質の発見にも繋がる比較的基礎フェーズの研究にも近いことから, PIよりも先に実例が出る傾向にも思われる。産総研でも, MIに関しては2016年から2022年まで, (国研) 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PI)³⁾を主導し, ここで培われたデータ, シミュレータの活用を推進するための材料設計プラットフォームやデータ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム⁴⁾を設立して, MIを活用した成果の社会実装を既に推進しているところである。一方, PIの方は材料開発における基礎研究の次の, いわば後段の過程が主対象でもあり, MIに比べると事例としての報告はまだ多くはないようにも思えるが, 実用化に繋がるプロセスの最適化は産業の現場ではむしろ重要視されるため, PIの活用をより推進することは産総研としても重視すべき喫緊の課題と考えている。図1(下)にPIの具体的なイメージを示した。原材料から目的の製品を作る過程では多段階で様々なプロセスを経由するが, その条件最適化はスケールアップやコスト減などに直接繋がる重要な開発要素である。PIでは, その各プロセスにおける諸条件,

例えば温度や圧力, 濃度などの物理・化学の入出力値を実測し, また, その各プロセスで得られる中間体や加工品, 製品の分析による特性データを併せて収集して, それらのデータをAIが解析して条件の最適化がおこなわれることで, 人間の手による実験の繰り返しや経験と勘による試行錯誤に頼らず, 「どうやって作るか」の答えを迅速に導くことになる。

3. MPIプラットフォームの概要

3.1 MPIプラットフォームの目的

インフォマティクスの活用においては, AIが解析や学習に用いるデータ(教師データ)の蓄積数が多いほど精度が増す。また, 1つの化学反応だけではなく, 複数のプロセスを組み合わせでの最適化が実生産プロセスでは必要となる。そこで産総研では, PIを積極的に活用するための原資とも言うべきデータの収集を効果的におこなえる環境を用意するため, 様々なプロセス実験を1ヵ所で連続で実施できる施設と設備を整備し, 一貫通貫・ハイスループットでデータを取得できる最先端の製造プロセス装置や評価・分析装置を一堂に揃えたオープンイノベーション拠点として, MPIプラットフォームを立ち上げた。その目的を, 主に我が国のマテリアル産業支援を念頭に, 以下の2つに定

めている。

①拠点利用による社会実装支援

産業界に対して、拠点に整備した製造・評価装置群を活用した研究開発や人材育成を実施することで、開発技術の迅速な社会実装を支援する。

②データ駆動型材料研究開発基盤の整備

製造プロセスデータを収集し活用するための基盤（設備やネットワーク）を拠点に整備し、企業や国プロ等の研究開発で利用することで、データによって製造プロセスを高度化するPIに関わる基盤技術を創出する。

3.2 整備をおこなう3つの拠点

産総研は国内に11カ所の研究拠点を有しているが、特に前述の重点領域の材料開発に高いポテンシャルと研究リソースを有する3カ所(図2)に、MPIプラットフォームの拠点を設置した。これらの3拠点は、地域産業とも連動したそれぞれ特色のある分野の材料開発に既に強みを持ち、触媒、セラミックス、有機素材の各研究開発拠点と位置付けられてきており、既存の研究リソースも活用しつつ、新たにPI活用を強力に推進する開発と連携の場として設備環境の整備を進めた。以下に、各拠点の概要を紹介する。

3.2.1 先進触媒拠点

産総研では茨城県つくば市にあるつくばセンター内に、2013年より触媒化学融合研究センターを設置している。先に述べた超超PJにおいては、触媒自動合成装置および触媒活性迅速評価装置を用い、第一原理計算で得られた触媒データなどから触媒活性の予測をおこなって高活性な触媒の開発を短時間で成功している。更に、得られた高性能触媒を用いて触媒反応プロセスの開発もおこない、スケールアップした反応装置によりエタノールを用いた大量のブタジエン製造にも成功している。このインフォマティクスを活用した知見と実績を更に発展させ、高

度なデータ駆動型研究開発によって触媒設計と製造法探索を一体的におこなうことが可能な触媒研究に特化したプラットフォームを提供し、CO₂やNO₂の回収・再資源化に必要な触媒の実用化などに取り組む企業を既に支援しているところである。

3.2.2 セラミックス・合金拠点

愛知県名古屋市守山区の産総研中部センターでは、従来から、高い世界シェアを持っている日本のセラミックス・金属材料を活用する製品素材産業への貢献のために新たな素材開発や部品技術の試作開発支援を可能とする機能を備えている。これからの高度なデジタル社会に必要な次世代電子部品分野や、電動化が進む自動車産業などに利用されるセラミックスや合金などについて、原料となる粉体合成から部素材に至るまでの成型・加工、焼結、成膜などのプロセスや、材料評価を1カ所で実施することが可能な試作装置群と分析機器を導入し、PIを活用したこれら材料の開発拠点を新たに整備した⁵⁾。

3.2.3 有機・バイオ材料拠点

広島県東広島市にある産総研中国センターでは近年、高分子やセルロース系素材などの有機系材料の研究を中心におこなっており、環境低負荷な材料の開発や、“材料診断”というコンセプトによるプラスチックなど高分子材料製品の特性評価や劣化の解明をおこなうなどして、産業への貢献と支援をおこなってきている。これらの研究リソースも活用し、新たに導入した装置と合わせて、樹脂の混練や木材の解繊など各種原料の調製から成型加工、性能予測まで一気通貫でのプロセス開発を実施できる環境を整えており、有機・バイオ材料をターゲットとしたPIを活用する材料開発拠点を目指している。

3.3 MPIプラットフォームの設備とデータ管理

MPIプラットフォームでは、各拠点が強みを有する分野

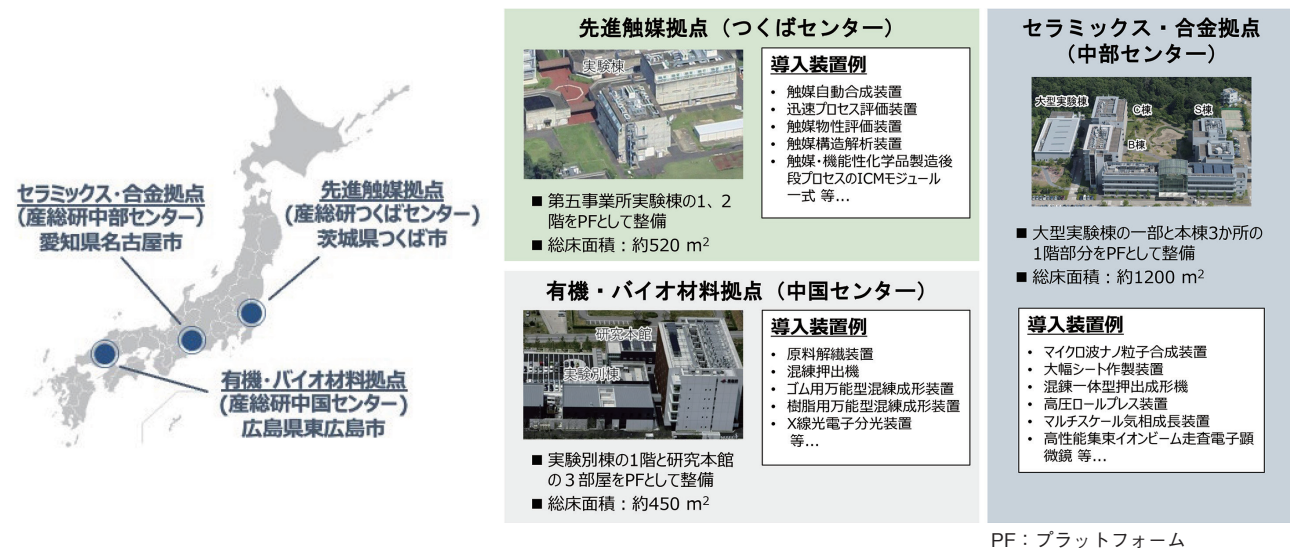


図2 MPIプラットフォーム3拠点、および、各拠点の概要

での材料開発に特に有用な、最先端のプロセス装置や分析装置を多数導入し、中には日本で数台という装置もある。これらと一部既存の設備とを合わせ、産総研の研究者の管理の下で運用をおこなっている。装置のリストについては、一部は図2に示したが、ここに掲載しきれなかったものも含め、詳細はWEBページ²⁾やパンフレットなどを参照されたい。

これらの設備は、産業界や公設試験研究機関、あるいは大学に至るまで広く公開で利用を受け付けているが、産総研との共同研究や技術コンサルティングの契約をおこなったの利用をお願いしている。これは、前項に記載した目的に沿って、MPIプラットフォームが装置利用のサービスのみを提供する共用施設ではなく、材料開発へのインフォマティクスの活用を強力に推進し広めるため、データを収集してモデルの構築とを併せておこなう前提での利用を念頭に置いているためである。PIの成功の鍵は、“如何にデータを効率的に収集し解析に用いるか”である。そこで、MPIプラットフォームの一部の装置では自動的に入出力データの取得をおこない、ネットワークを介してサーバに集約するシステムも導入している。このサーバは産総研つくばセンターに設置しており、各拠点ネットワークで繋ぎ、各拠点で生み出されたデータを収集してPIのモデル構築がおこなわれることになっている。ユーザーの装置の利用に当たっては、得られるデータについて、同意の上でプロセス基盤データとして提供していただき、基盤となるPIモデルの構築に活用させていただくことにしている。無論、集めたデータは直接他者に公開されるものではなく、産総研が独占することでもなく、PIのモデルの構築にのみ利用される。従って、各社個々の開発背景や材料の詳細、生のデータに誰でもアクセスが可能になるのではなく、データ部分のみが秘匿化されて集約され、提供されるのはそれによって構築されたPIモデルのみであることを述べておきたい。ユーザーの希望によっては、得られた一部のデータは基盤データには提供せずに非公開とすることや、独自のデータを別途持ち込んで公開PIモデルへ組み込み・改良して利用することも可能である。このようなデータの運用方針のため、図3のような構造で、ストレージサーバ内部ではユーザー毎、プロジェクト毎に領域分けをしてアクセス権の管理を厳密におこなった上でデータを管理し、PIを活用する材料開発に役立ててもらおうにしている。

4. おわりに

2022年4月の開所式以来、MPIプラットフォームの各拠

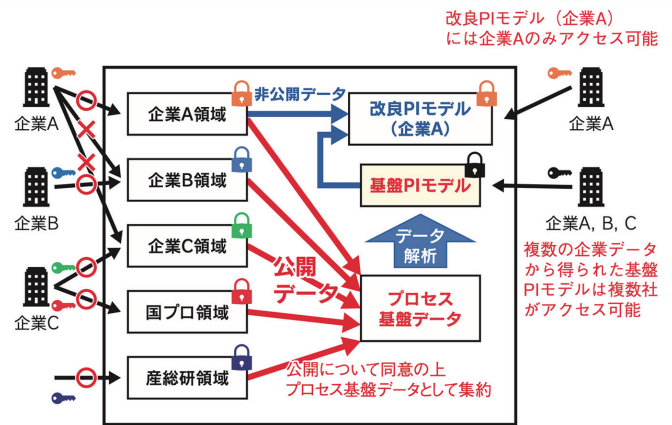


図3 MPIプラットフォームのデータサーバの構造図
(MPIプラットフォーム公式パンフレットより引用)

点への見学や問い合わせ、実際の利用のための共同研究等に至った契約件数は、当初の事業計画で定めた目標件数を大きく上回る（2023年3月現在）ものであり、MIやPIへのマテリアル産業界からの関心が大変高いことを証左するものであろう。特に、流行りのデータ駆動型開発に興味はあるが自社だけではどう進めて良いか分からない、というユーザーは少なくないと思われ、一堂に揃った設備群を利用して一気に通貫での開発を試すことができるMPIプラットフォームは魅力的な設備になるのでは、と思われる。より詳しい施設情報や利用方法、問い合わせ先については公式WEBページ²⁾やパンフレットにも詳しく掲載されており、また、WEBページには施設や装置紹介の動画も用意しているので、ぜひご覧いただきたい。産総研ではMPIプラットフォームを活用した独自の研究開発事例の創出にも鋭意取り組んでいるところであり、また、PIを活用する所内のデジタル人材育成や、先端計算科学を活用した新規材料合成・製造プロセスに関する新たな大型プロジェクト立案にも取り組んでいるところである。これらの具体的活用例の紹介は今回は時期尚早であるため、本稿では概要のみに絞らせていただいたが、そう遠くない時期に、PIを用いた実際の製品開発事例の状況を解説できることを願っている。

参考文献

- 1) 内閣府:マテリアル革新力強化戦略, <https://www8.cao.go.jp/cstp/material/material.html>
- 2) 産業技術総合研究所:材料・化学領域,マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム, <https://unit.aist.go.jp/dmc/platform/MPI/index.html>
- 3) 新エネルギー・産業技術総合開発機構:超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト, https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html
- 4) 産業技術総合研究所: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, <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html>
- 5) 松原一郎:東海化学工学会会報, 317, 5-11 (2023)