

データ駆動型材料設計に関する産総研の取り組み

Data-Driven Materials Design in AIST

産業技術総合研究所 °濱川 聡

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), °Satoshi Hamakawa

E-mail: hamakawa.s@aist.go.jp

産業技術総合研究所（産総研）は、「マテリアル革新力強化戦略」において物質・材料研究機構と並んでデータ中核拠点に指定されており、データ駆動型材料開発・マテリアル DX を組織的に推進している。本講演では、以下の3つのトピックスについて紹介する。

（1）超超プロジェクトにおけるマテリアルズ・インフォマティクス（MI）研究 [1]

NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術開発プロジェクト（超超プロジェクト）」(2016-2022 年度)は、主に有機材料を対象とした MI プロジェクトで、産総研と研究技術組合 ADMAT の共同研究体制で推進された。計算・計測・プロセスの三位一体の基盤技術と AI を組み合わせて、材料の開発期間・試作回数を 1/20 にすることを目標とした。その結果、合成・反応評価・分析を高速に行うハイスループットシステムと機械学習を活用した高活性ブタジエン合成触媒の開発、計算シミュレーションと機械学習を用いた低誘電率・低誘電正接のポリイミド材料の提案と実験検証、深層学習（GAN）による画像生成、分光スペクトル生成を活用して材料特性を予測するマルチモーダル AI 技術の開発などの成果を得た。

（2）AIST Materials Gate DPF の構築 [2]

産業用途の材料は不純物、欠陥、高次構造等を含み、汎用的な構造化が困難である。そこで、超超プロジェクトで得られた様々な材料系のデータを5つのカテゴリーに分類し、それぞれに適したデータプラットフォーム AIST Materials Gate DPF（DPF）を構築した。この DPF を核とし、高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術、それにデータ解析の AI ツールを一体化した材料設計プラットフォームを開発した。現在、データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアムにおいて、DPF の利用を主たる目的とした活動を展開している。

（3）マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォームの整備 [3]

MI の成功事例が積み重なるにつれ、「何を作るか」を課題とする MI から「いかに作るか」を課題とするプロセス・インフォマティクス（PI）に関心が広がっている。産総研では、製造プロセスの高度化を目的とし、3か所の拠点（つくば、中部、中国）に最先端のプロセス装置群や分析装置群を導入した。これらの装置群で得られるプロセスデータを一括して収集し、その解析やデータ駆動型の製造プロセス改善を行うマテリアル・プロセスイノベーションプラットフォームの整備を推進している。

[1] <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/ja/tech/index.html#chouchou>

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

[3] <https://unit.aist.go.jp/dmc/platform/MPI/index.html>