

資料5  
科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会  
第11期ナノテクノロジー・材料科学技術委員会  
(第2回)

CRDS提言書紹介

戦略プロポーザル

# 材料創製技術を革新するプロセス科学基盤 ～プロセス・インフォマティクス～

2021年8月5日

JST-CRDS



国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター  
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

# CRDS提言の骨子

材料合成プロセスを効率的かつ統合的に探索する技術基盤としてプロセスインフォマティクスを確立することを提案

プロセス・インフォマティクス (PI) :

「従来からの実験科学、理論科学、計算科学と、近年進展の著しいデータ科学を、統合的・融合的に活用することにより、目的材料の合成プロセスを効率的かつ統合的に探索する方法」と定義。

## 研究開発を実施する意義

- マテリアルズ・インフォマティクス (MI) が強力な予測ツールとなることが実証されつつあるが、候補となる新材料の合成方法がわからない場合も散見。
- 合成プロセスは、材料・プロセスの種類が多く、プロセス制御パラメータが複雑なため、統合的に扱うことが難しい。
- データ科学、シミュレーション、オペランド計測、ロボットを使ったハイスループット実験など、PIに取り組むベースが近年充実しつつある。

## 研究開発の課題

- 主要材料領域におけるPI手法の構築 :  
有機、無機材、複合材料等のそれぞれの中核となるプロセスから開始し、領域ごと展開
- PI共通基盤構築 : 個別プロセスのニーズを越えて、PIを強化するために共通化・標準化
- プロセスサイエンス基盤拡充  
各論的・局所的議論から、データ科学による共通因子で分類されたプロセスサイエンスへの刷新を

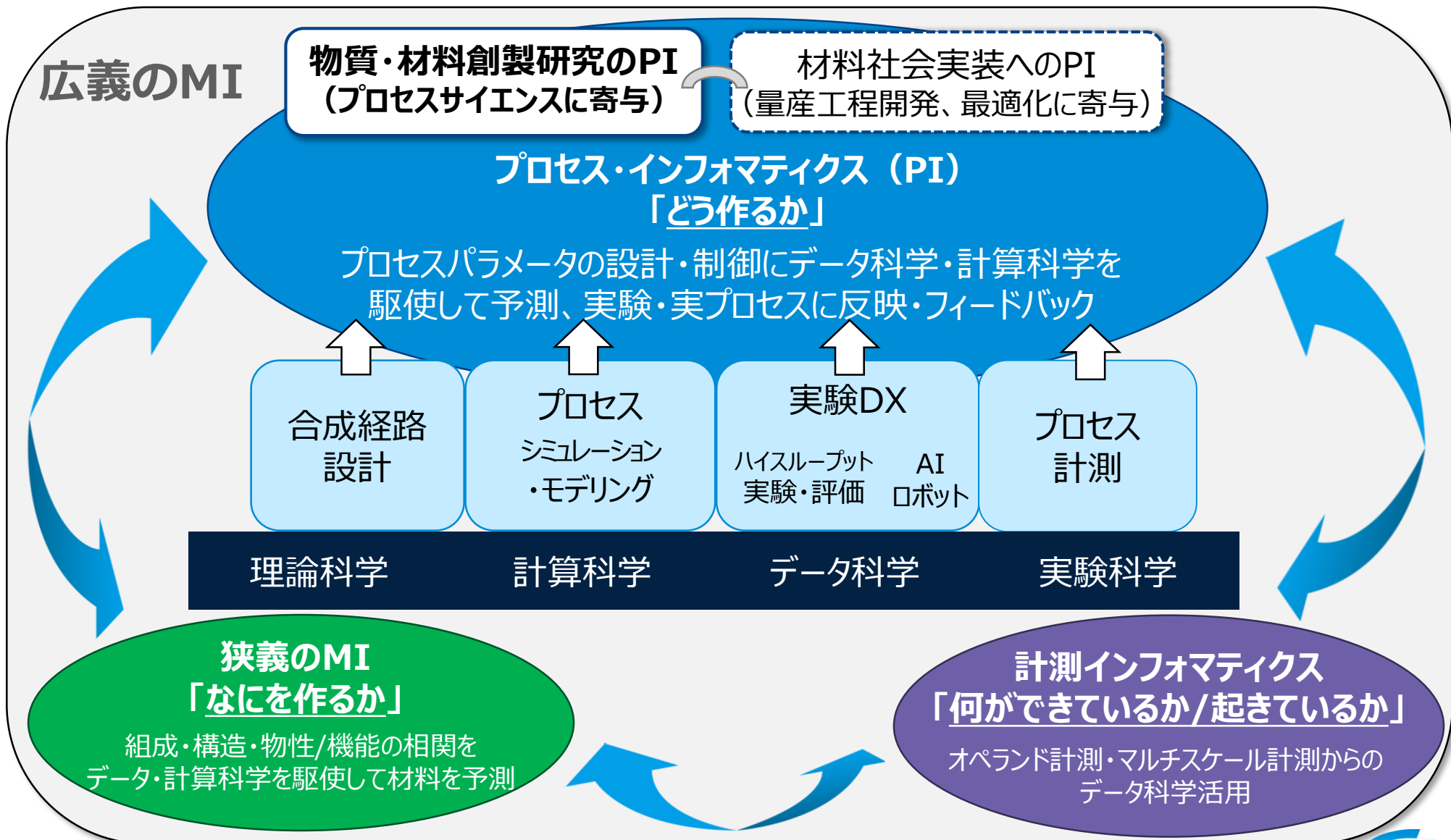
## 推進方法

- 主要プロセスごとの拠点を設置し、合成プロセス装置、評価・計測装置を整備
- プロセスセンター/共通基盤拠点の全体を束ねる仕組み（ガバニングボードなど）が必要
- 人材育成として、材料研究者とデータ科学者の知識・経験を融合させることが大切



<https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2021-SP-01.html>

# データ駆動型材料研究開発における MI、PI、計測インフォマティクスの関係概念図 (イメージ)



シミュレーション  
・モデリング

文献・特許

実験DX

HT実験  
AIロボット

MI (狭義)

材料  
データ

材料  
設計

合成可能？

Yes

No

検証

合成  
プロセス  
確立

量産  
安定  
生産

シミュレーション  
・モデリング

文献・特許

実験DX

HT実験  
AIロボット

合成プロセス探索

プロセス  
データ

プロセス  
設計

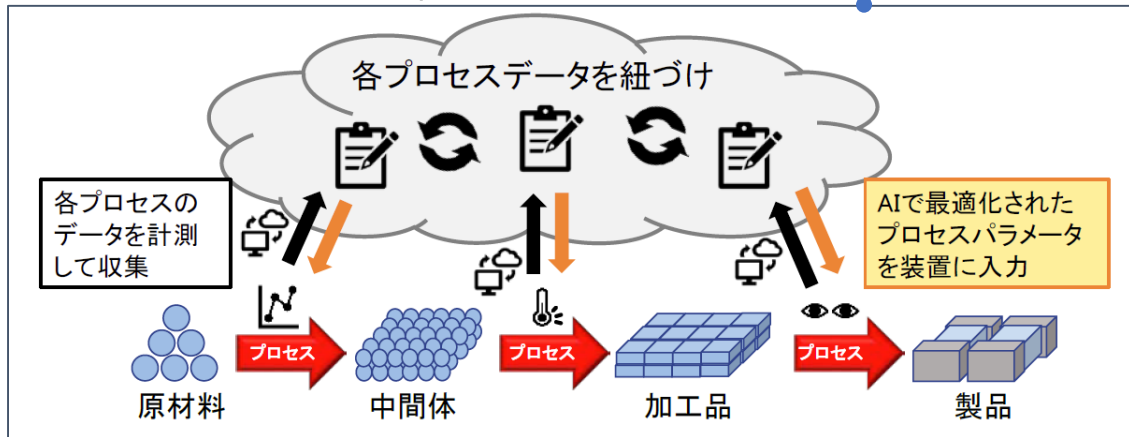
Yes

No

本提言におけるPIの主要部

マテリアル戦略有識者会議

AIST 村山委員資料より (2020年10月)



プロセス工程管理  
異常検知等

# 材料に関する現状認識と問題点

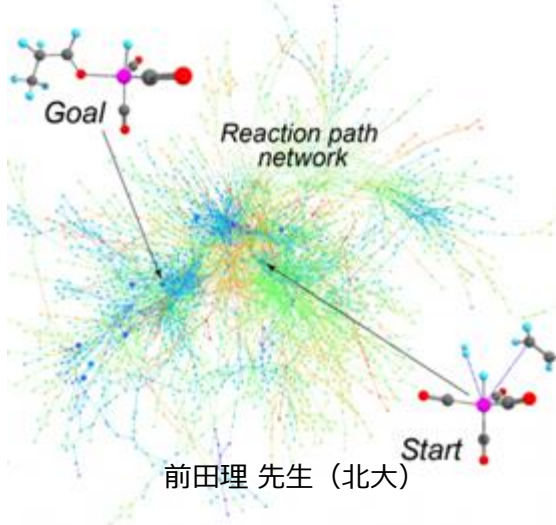
PI： プロセス・インフォマティクス  
MI： マテリアルズ・インフォマティクス

下線部：問題点

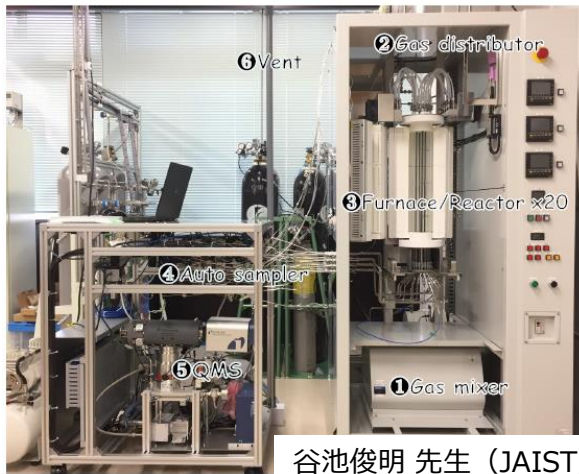
1. 材料に対する多様な要求・ニーズは内外で高まりつつづけている
2. 一方、日本の材料研究開発・産業の国際競争力への陰り・危機感
3. MIの成果は徐々に始めている。主要各国ともMIの取り組みを相次ぎ強化中
4. 従来の狭義のMIでは「どう作るか」に踏み込むことが課題となっている
5. PIに活用可能な要素技術の登場・発展が確認できる
6. 近年のMIで取り組んできた知見を活かし、PIを発展させられるかが焦点に
7. データ科学に必要な計算機資源やGPU等も進展している
8. MIと比較してPIではパラメータ量が遥かに多く複雑。ハードルは非常に高い
9. データ科学を活用するためのプロセス・データ量は不足
  - 装置依存性が高く、PIに必要な情報が欠けていたり、ネガティブデータが不足しているなどの問題から、既存データをそのまま活用することが難しい
  - 企業における量産プロセス制御パラメータなどは、各社の重要な資産であり外部に公開されるようなものではないことに留意がいる
10. PIに関する研究事例は散見されるが、知見やツールを統合・展開できていない
  - 材料/プロセスのバリエーションが多く、主として各論的・局所的な取り組みに留まる

# プロセス・インフォマティクスに活用可能な新たな要素技術の例

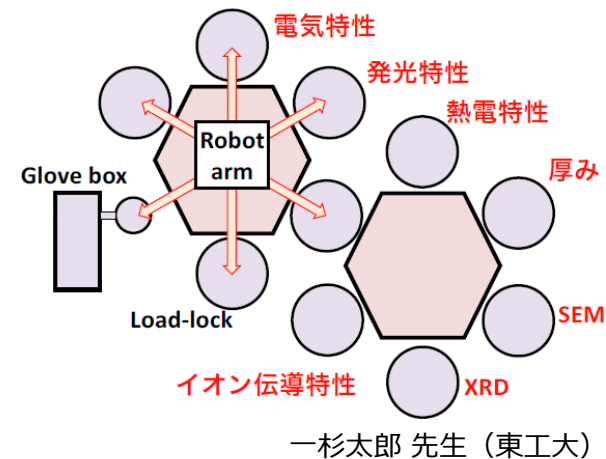
## 反応経路自動探索



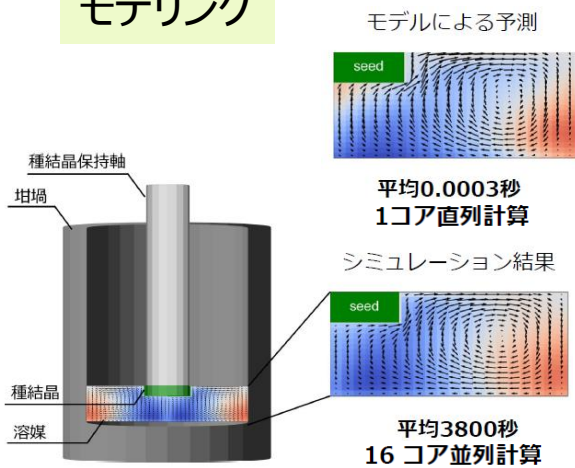
## ハイスループット実験



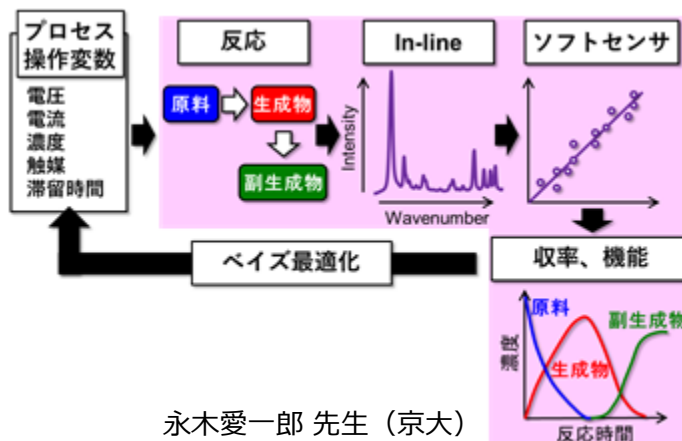
## ロボット



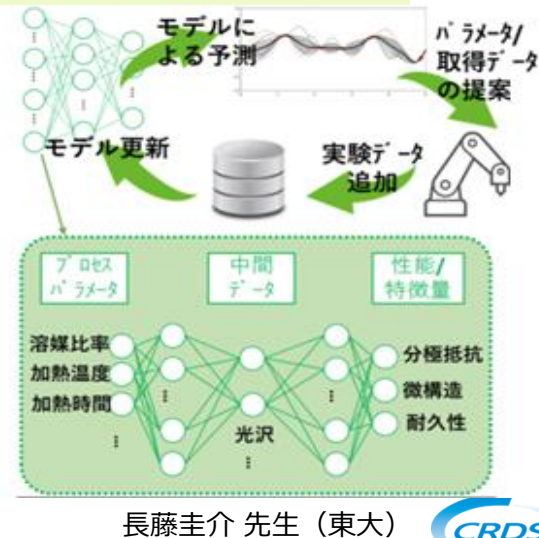
## モデリング



## ソフトセンサー



## 機械学習アルゴリズム



# プロセスインフォーマティクスの実現によって期待されるアウトカムの例

## ➤ 新規材料開発の成功率アップ

- PIを適用できる材料の市場の拡大、成長が予測される
- 所望の機能を持つ新材料をいち早く作ることが可能になり、材料開発の競争力向上
- 外部環境の変化によって、開発スピードの重要性の高まり
  - 速いニーズの変化、製品寿命の短縮
  - 開発期間短縮への要求

## ➤ プロセス開発の期間短縮 ⇒ 費用削減

例) SiC結晶成長では、PI的なアプローチにより約2年で20mm径から150mm径を実現。過去、シリコン結晶成長では、20mm径から150mm径に約20年を要したことから、開発期間は10分の1に短縮されている。開発コスト削減効果はそれ以上の寄与

## ➤ 合成プロセスの設備費（CAPEX）、運用コスト（OPEX）の削減

- 必要最小限の機能を持つ製造設備
- 副生成物抑制、高価な原材料・触媒・反応助剤の使用量削減、エネルギー効率改善

## ➤ 環境への影響を最小限化

- エネルギー負荷やCO<sub>2</sub>削減、国際的な規制対象物質の使用回避等への効果的な対応

# 研究開発・科学技術成果としてのアウトプット

## ➤ 材料合成プロセスの科学的アプローチの進展が期待される

- 4つの科学（実験科学、理論科学、計算科学、データ科学）を統合的に活用することで材料プロセスの科学的理解・解明・体系化が促進。
  - 多次元のパラメータ空間から重要な因子を抽出することができ、その結果としてプロセスの理解に貢献
  - 各論的・局所的だったプロセスにデータ科学的手法を用いることで、異なるプロセス間の共通因子を抽出。個々のプロセス解析ではわからなかった、プロセスを制御する重要共通因子の発見から、プロセスの理解がさらに進む
- より望ましい・最適なプロセス候補の提案を科学的におこなう
- 人間の直感では出てこない新たなプロセス・手法を創出する可能性

## ➤ 従来のMIとの融合による、材料創製技術の進展

- 「目的の特性・機能の実現のためには、どのような物質・材料をどうやって合成するか？」という物質・材料創製の一連の流れを統合的に進めることが可能になると期待

## ➤ 材料創製研究から、実用化・製品化へのよりシームレスな橋渡し。

### 基礎・応用の相互フィードバックループを促進

- プロセスの科学的理解の進展により、プロセス設計の自由度と確度向上
- 生産プロセス（スケールアップ・安定生産）への移行
- 品質管理・品質保証への活用



# 課題の構成

## 課題①

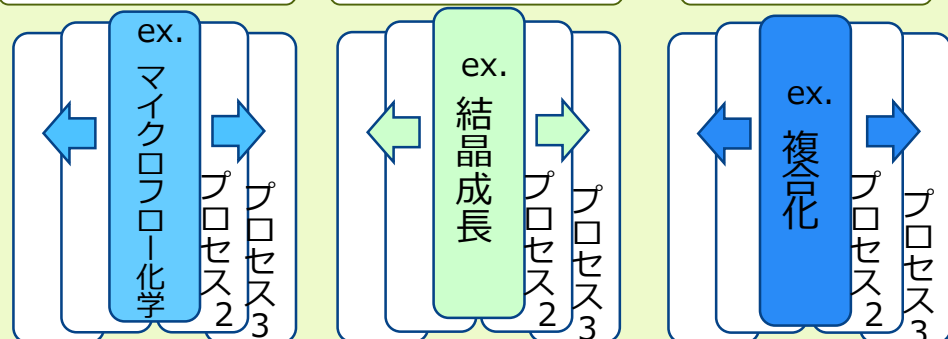
### 各材料領域における プロセス・インフォマティクス手法の構築

各領域の中核になるようなプロセスから開始し、展開

有機材料

無機材料

複合構造



▶データ生成  
・蓄積

- ・文献情報からの抽出
- ・シミュレーション・モデリングで生成
- ・実験DXによる直接取得

▶各領域に適する手法の構築

## 課題②

### プロセス・インフォマティクス 共通基盤構築

▶ 共通化・標準化

- ・機械学習アルゴリズム
- ・自律的最適化手法
- ・シミュレーション・モデリング
- ・実験DX：ハイスループット実験・ロボット
- ・プロセス計測技術
- ・データ収集・解析・蓄積・運用
- ・データ提供に対するインセンティブ設計

## 課題③

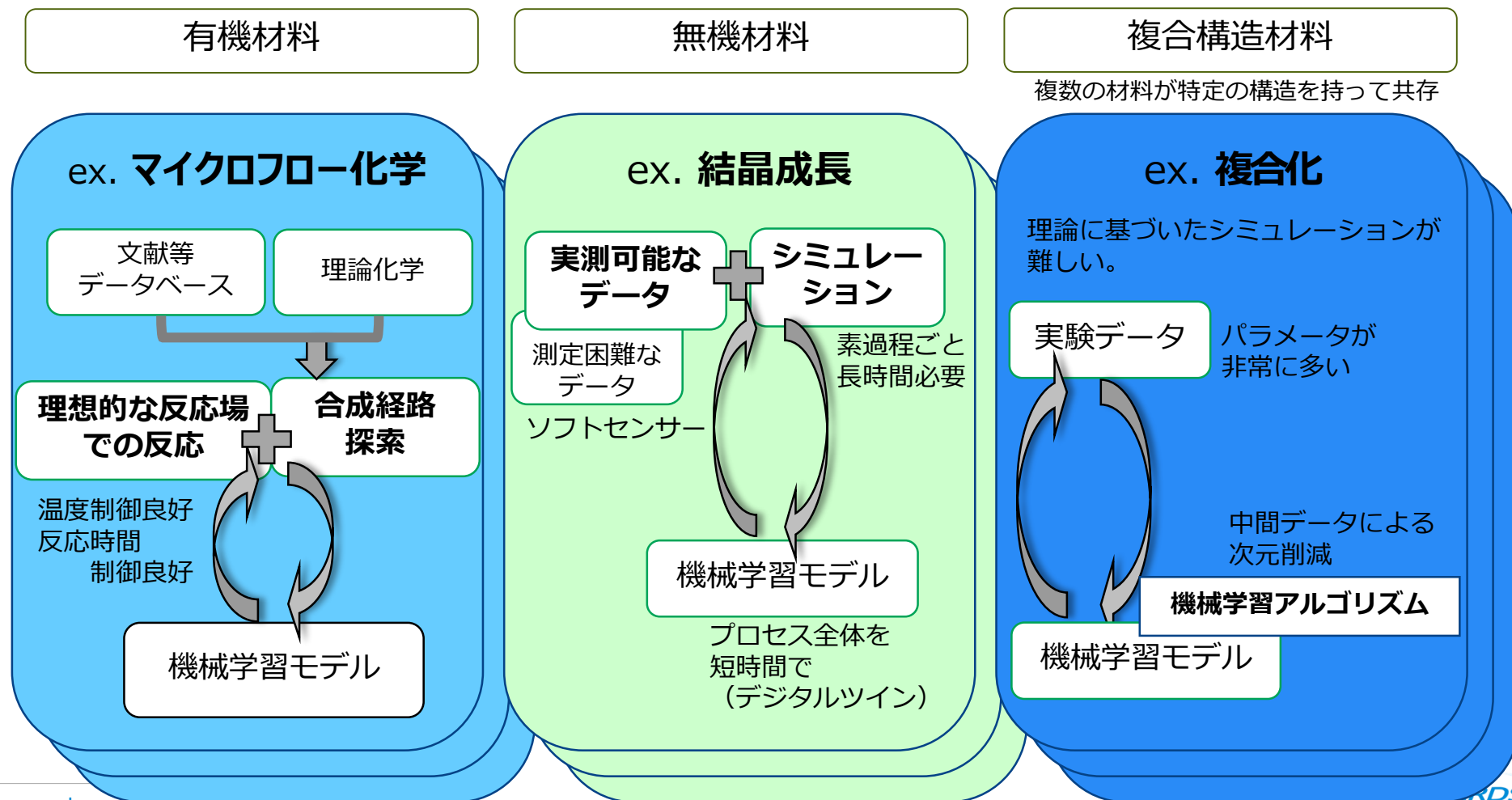
### プロセスサイエンス基盤拡充

- ・共通因子によるカテゴリー分類
- ・プロセスのカテゴリごとの科学的理解

# 課題① 各材料領域におけるプロセス・インフォマティクス手法の構築

- 有機材料、無機材料、複合構造材料それぞれの中核\*になるようなプロセスから開始し、材料領域ごとに展開

\* 産業界からの具体的なニーズがあってプロセス・インフォマティクス活用によって効果があると期待されるもの、且つプロセス・インフォマティクス手法構築に適するもの

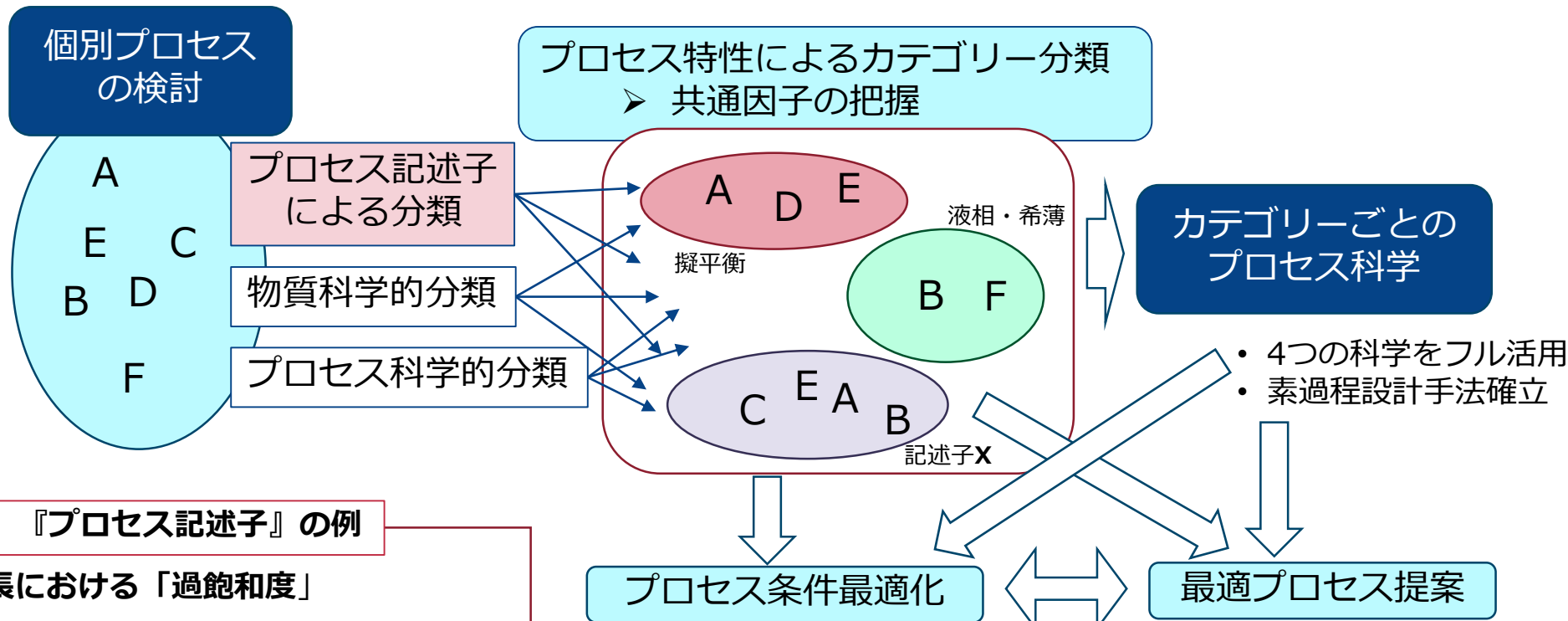


## 課題② プロセス・インフォマティクス共通基盤構築

- プロセス・インフォマティクス用機械学習アルゴリズムおよび自律的最適化手法
  - パラメータ空間が広大
    - ⇒ パラメータの次元削減。物理的意味を持つ中間データを活用する方法
  - 多段階プロセスにおける、前後のプロセスへの影響が複雑
    - ⇒ 前段/後段の機械学習モデルを直列につないで活用する手法
- シミュレーション・モデリング
  - 実験結果に基づく経験パラメータを用いたモデリング
  - 第一原理計算および分子動力学等によるシミュレーション
  - 第一原理計算と統計熱力学との融合によるマルチフィジックス・シミュレーション
- ハイスループット実験、AIロボット技術
  - 共通的な単位操作ごとのモジュールを用意するアプローチも有効
- プロセス計測技術（ソフトセンサー）
  - 直接測定が困難なプロセス変数を、リアルタイムで容易に測定できる変数から予測する技術。プロセスデータ収集の重要な基盤技術を開発
- データ収集・解析方法
- データ蓄積・運用
  - オープン/シェアクローズ/クローズの区分設計
- インセンティブ設計
  - 研究者によるデータ・経験知の提供に対する適切なインセンティブ設計

# 課題③ プロセス科学基盤拡充

- データ科学によって、プロセス特性を適切に表す『プロセス記述子』を導出。
- 物質科学的・プロセス科学的分類と併用し、重要な共通因子を把握 ⇒ カテゴリー分類。
- カテゴリーごとの科学的理解を進めることにより、カテゴリー内で知見やデータを活用



**『プロセス記述子』の例**

**結晶成長における「過飽和度」**

- 高温融液から引き上げるシリコン結晶
- 大気上層部の低温領域での氷結晶

➤ 一次記述子（温度・圧力・物質密度）では、かけ離れているが、一次記述子の組み合わせによる二次記述子によって統一的理解可能に

- プロセス条件最適化**
- 副生物・不純物低減
  - コスト低減
  - 安定性向上
- 最適プロセス提案**
- プロセスの再構成

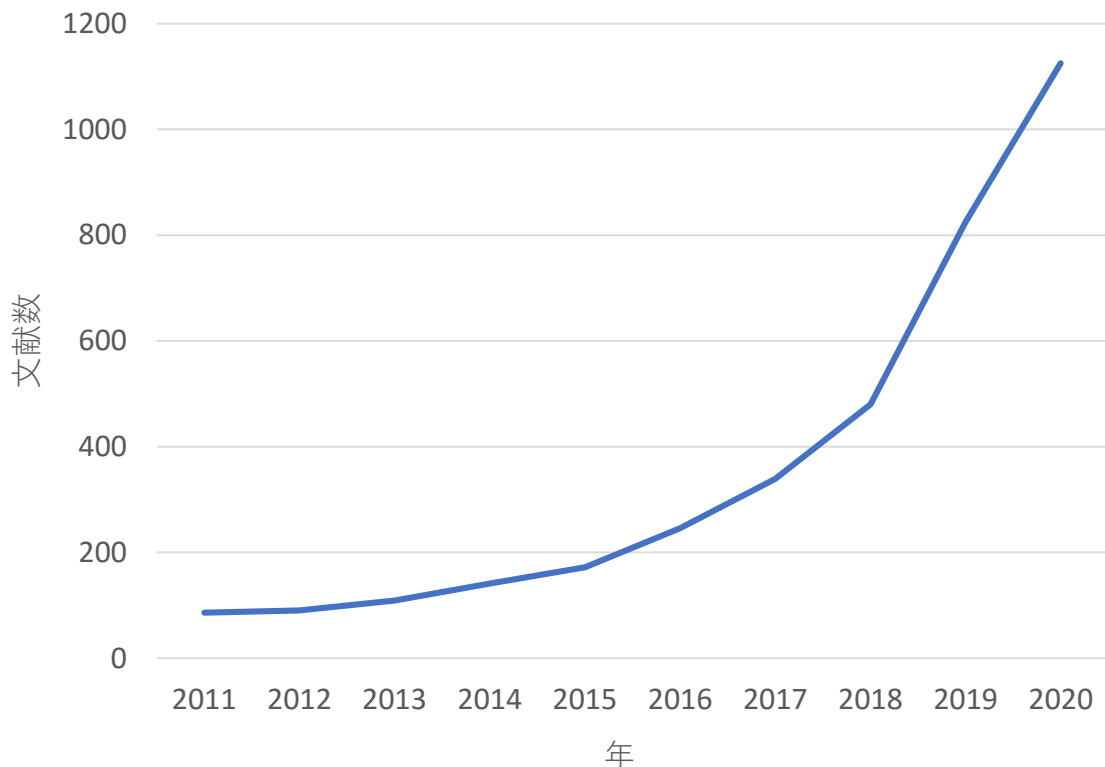
# 材料プロセス×データ科学に関連する進行中の施策・プログラム

施策・プログラム	実施体制	開始年度
<b>文部科学省 材料の社会実装に向けたプロセスサイエンス構築事業（マテリアライズ）</b>		2019
ナノ材料の界面・構造制御プロセスサイエンス	東北大、東京大、産総研、JFCC、東京農工大、東北工大	
全固体電池を実現する接合プロセス技術革新	NIMS、JFCC	
<b>JST 未来社会創造事業 共通基盤領域</b>		2021
マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築	東工大、大阪大、NIMS、オムロンサイニックエックス	
<b>NEDO 新産業創出新技術先導研究プログラム</b>		2020
デジタル駆動化学による機能性化学品製造プロセスの新基盤構築 ～高速遷移状態解析による合成経路探索と実証～	産総研、Transition State Technology、山口大、大阪府立大、東京大	
<b>NEDO マテリアル革新技术先導研究プログラム</b>		2021
SiCバルク成長技術の革新に向けたプロセスインフォマティクス技術の研究開発	電力中央研究所、名古屋大、理化学研究所、Mipox、アイクリスタル	
水分解水素製造用光触媒結晶のマテリアルDX研究開発	信州大、デクセリアルズ	
データ駆動科学によるスマートスケラブルケミストリーの確立	NAIST、JSR、慶應義塾大	
ファインセラミックスのプロセスインフォマティクス基盤構築	産総研、JFCC、村田製作所、京セラ、日本特殊陶業、日本ガイシ、日本ファインセラミックス協会	
<b>産総研 マテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム</b>		2021
資源循環の革新をもたらす触媒材料拠点	産総研 つくばセンター	
セラミックス、合金等の極限機能材料拠点	産総研 中部センター（名古屋）	
脱化石資源を目指したバイオベース（セルロースナノファイバー）材料拠点	産総研 中国センター（東広島）	

# データ駆動型材料合成・プロセスの論文数推移

“材料・プロセス” × “データ駆動・機械学習・AI” に関する論文は立ち上がりの途上

## データ駆動型材料合成・プロセスの論文数推移

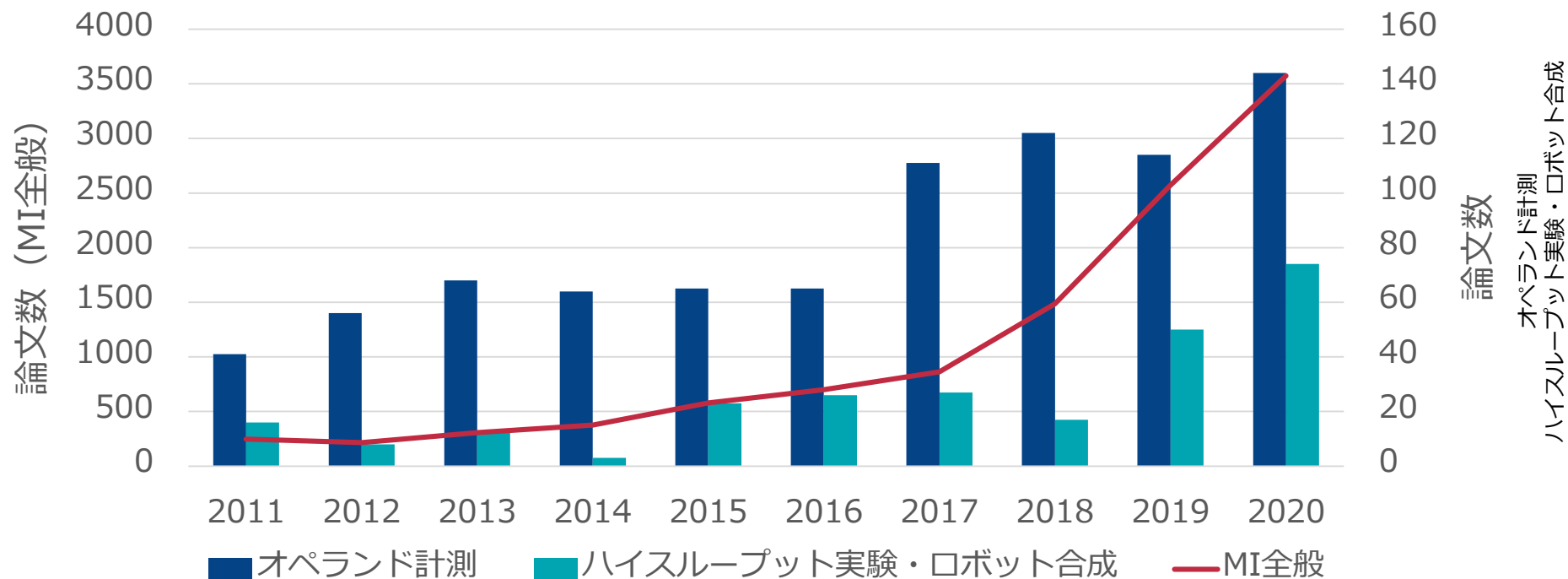


## 論文数の国別比較

順位	国名	論文数
1	米国	1,394
2	中国	730
3	ドイツ	384
4	英国	292
5	インド	245
6	日本	195
7	スペイン	178

データベースはWeb of Scienceを用い、対象期間は2011～2020年  
(data-driven OR machine learning OR AI OR Artificial Intelligence) AND material AND process  
をキーワードとして検索式を作成

# プロセス・インフォマティクス推進に重要な要素技術の論文数推移



## 各要素技術の国別論文数

### オペランド計測

順位	国名	論文数
1	中国	237
2	米国	107
3	インド	57
4	フランス	39
5	ドイツ	38
10	日本	14

### ハイスループット実験・ロボット合成

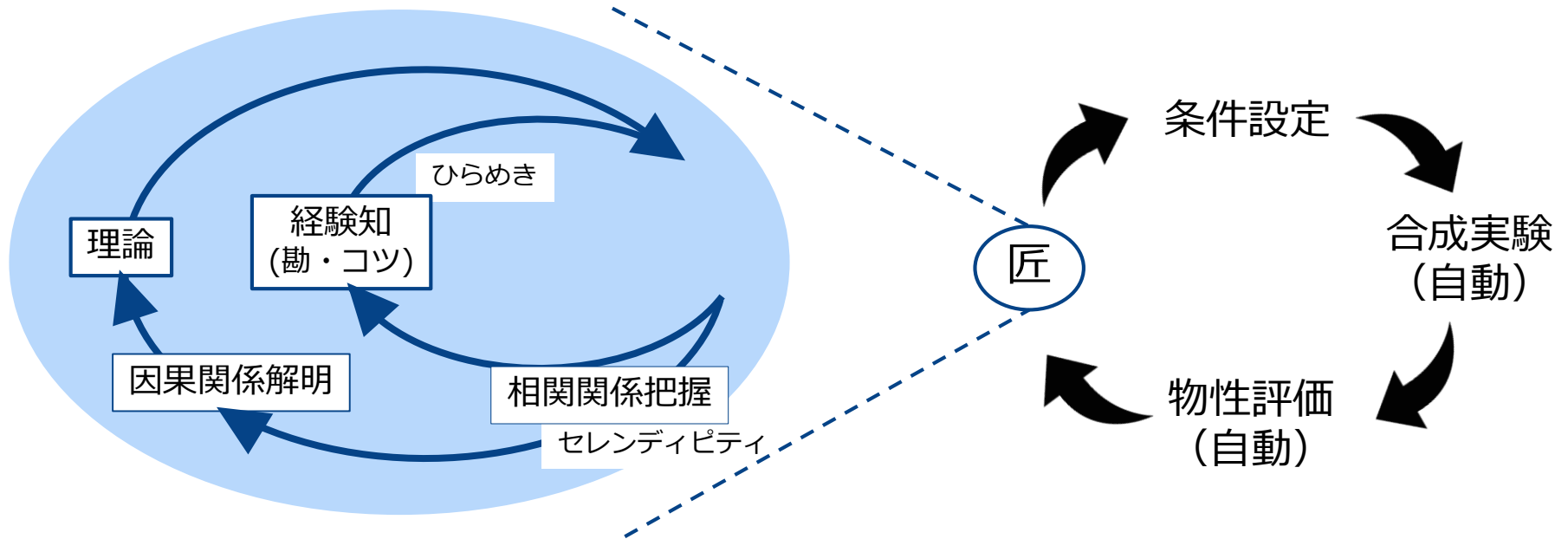
順位	国名	論文数
1	米国	89
2	中国	29
3	英国	18
4	ドイツ	15
5	オーストラリア	8
11	日本	5

データベースはWeb of Scienceを用い、対象期間は2011~2020年。以下のキーワードをもとに各検索式作成。

- ・マテリアルズ・インフォマティクス全般：(データ駆動型 or 機械学習 or AI) AND 材料 AND (設計 or 発見 or 合成)
- ・オペランド計測：(オペランド or in-situ) AND 分析 AND 材料プロセス
- ・ハイスループット実験・ロボット合成：(ハイスループット実験 AND 物質合成) OR (ロボット合成 AND 機械学習・AI)

# 参考) 匠-in-the-loop

研究者の能力・知の拡張への挑戦



## Closed-loop 自律的最適化

