

**「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」
(事後評価)**

(2018年度～2019年度 2年間)

プロジェクトの概要 (公開)

5.1「事業の位置付け・必要性」「研究開発マネジメント」

NEDO

材料・ナノテクノロジー部

2020年11月18日

発表内容

I. 事業の位置づけ・必要性

- (1)事業の目的の妥当性
- (2)NEDOの事業としての妥当性

NEDO

II. 研究開発マネジメント

- (1)研究開発目標の妥当性
- (2)研究開発計画の妥当性
- (3)研究開発の実施体制の妥当性
- (4)研究開発の進捗管理の妥当性
- (5)知的財産等に関する戦略の妥当性

III. 研究開発成果

- (1)研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義
- (2)成果の普及
- (3)知的財産権の確保に向けた取組

PL

IV. 成果の実用化・事業化に向けた取組及び見通し

- (1)成果の実用化に向けた戦略
- (2)成果の実用化に向けた具体的取組
- (3)成果の実用化の見通し

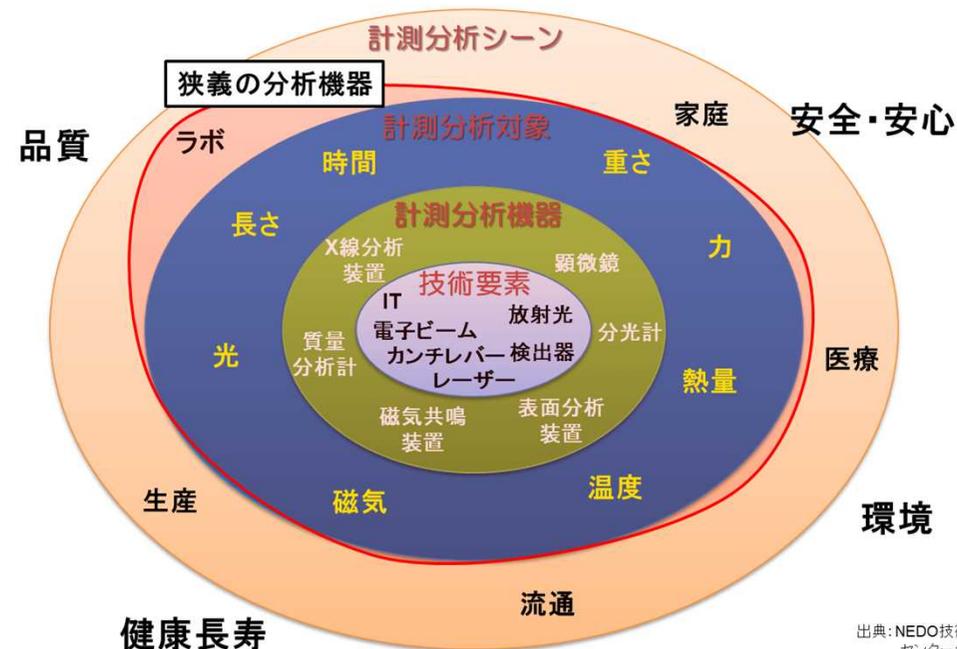
◆ 事業実施の背景と目的

課題

- 計測分析機器は我が国の科学や産業技術の発展を支える重要な基盤。計測分析機器産業の継続的な発展は、我が国の産業競争力を維持する上で必要不可欠である。
- 計測分析機器産業の発展には、絶え間ない技術開発投資による技術革新が必要とされている。我が国の計測分析機器産業は分野によっては海外の巨大計測分析機器メーカーからの強い攻勢にさらされており、全体としてもかつての強みを失う危険をはらんでいる。

新規市場の創出必要

レイヤー：社会課題



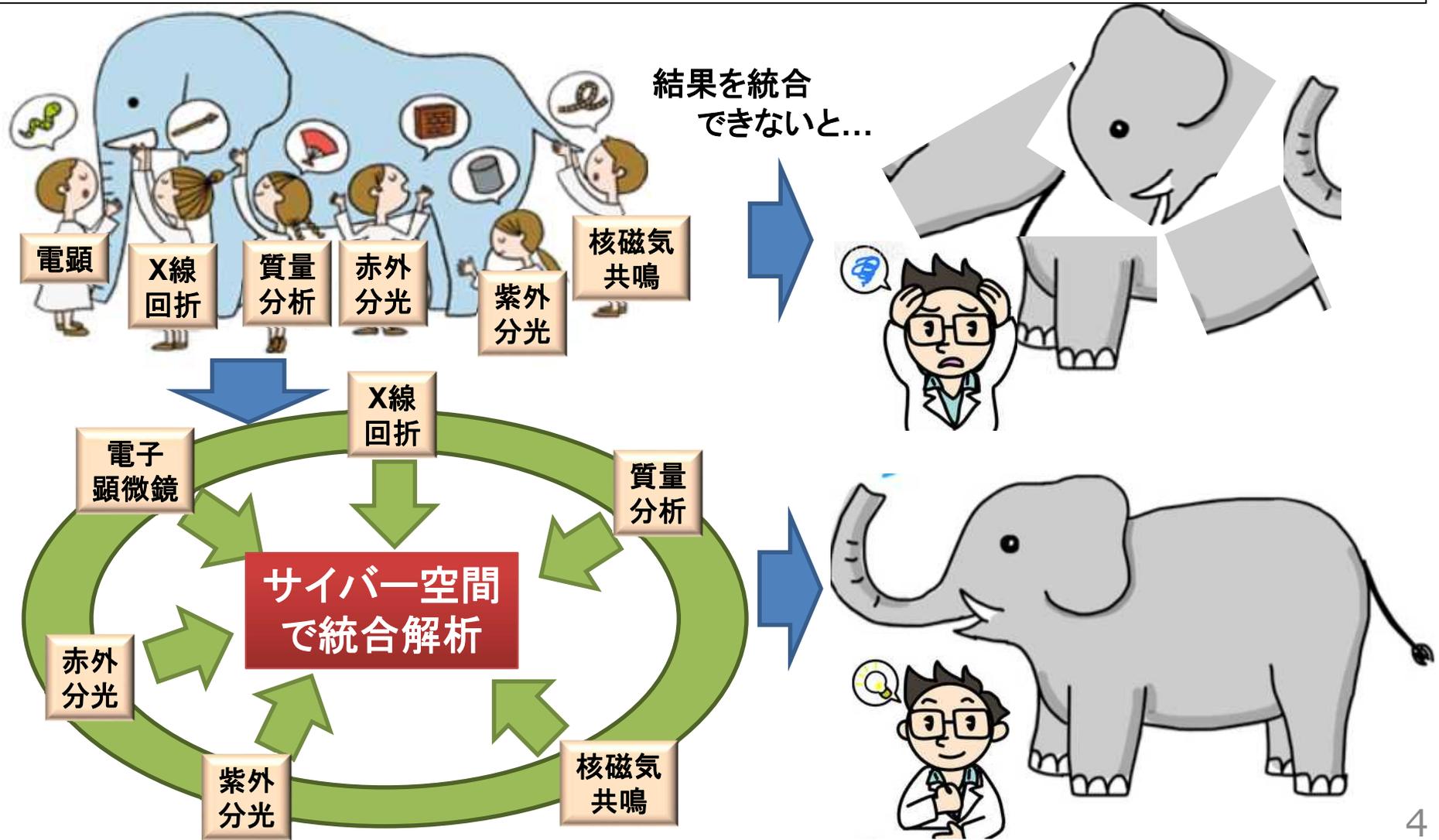
1. 事業の位置付け・必要性 (1) 事業の目的の妥当性

計測分析のトレンド：カーボンナノチューブ開発の例



1. 事業の位置付け・必要性 (1) 事業の目的の妥当性

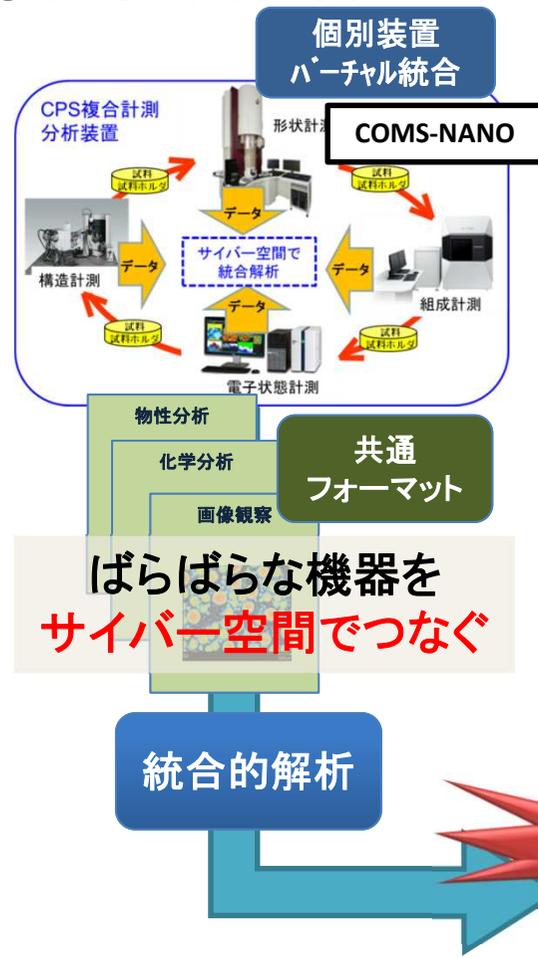
- 製品の高機能化や開発期間の短期化等に伴い、**課題解決の難度が高まっている**。
- 問題解決に**複数の計測分析手法が用いられることが常態化**している。
- 研究者には、複数の計測分析手法の**結果を統合しさらに高度な結論を導き出す能力**が要求される。



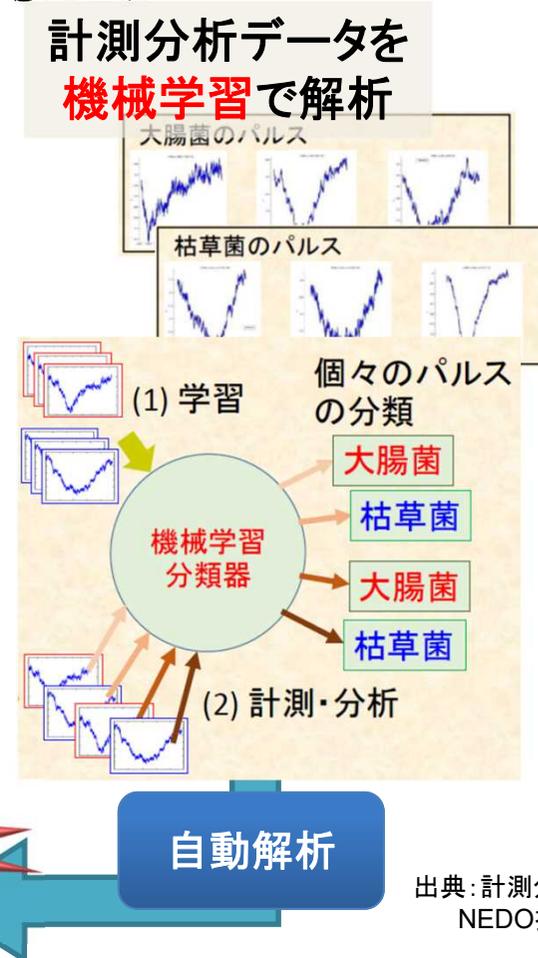
1. 事業の位置付け・必要性 (1) 事業の目的の妥当性

■ 今までバラバラだった計測分析機器を、IoT技術を活用して「つなぐ」、AI連携により非専門家でも高度な解析を可能にする、材料開発の効率向上に寄与するCPS(Cyber Physical System)複合計測システムを開発する。

①計測分析情報の統合



②AI連携



出典：計測分析機器ワークショップ資料等より
NEDO技術戦略研究センター作成(2017)

◆政策的位置付け

内閣府が作成した「科学技術イノベーション総合戦略2017」では、ビッグデータ解析技術、IoTシステム構築技術を含むAI関連技術による、ものづくり現場等における生産性向上の重要性が指摘されている。

また、サイバー空間関連技術やフィジカル空間(現実空間)関連技術の開発を横断的に支える技術として先端計測技術が言及されている。

その強化にあたっては、計測分析分野における精度・感度・省エネ等の様々な点で、従来技術の課題を解決し、産業へ応用してゆくことの重要性が述べられている。

◆技術戦略上の位置付け

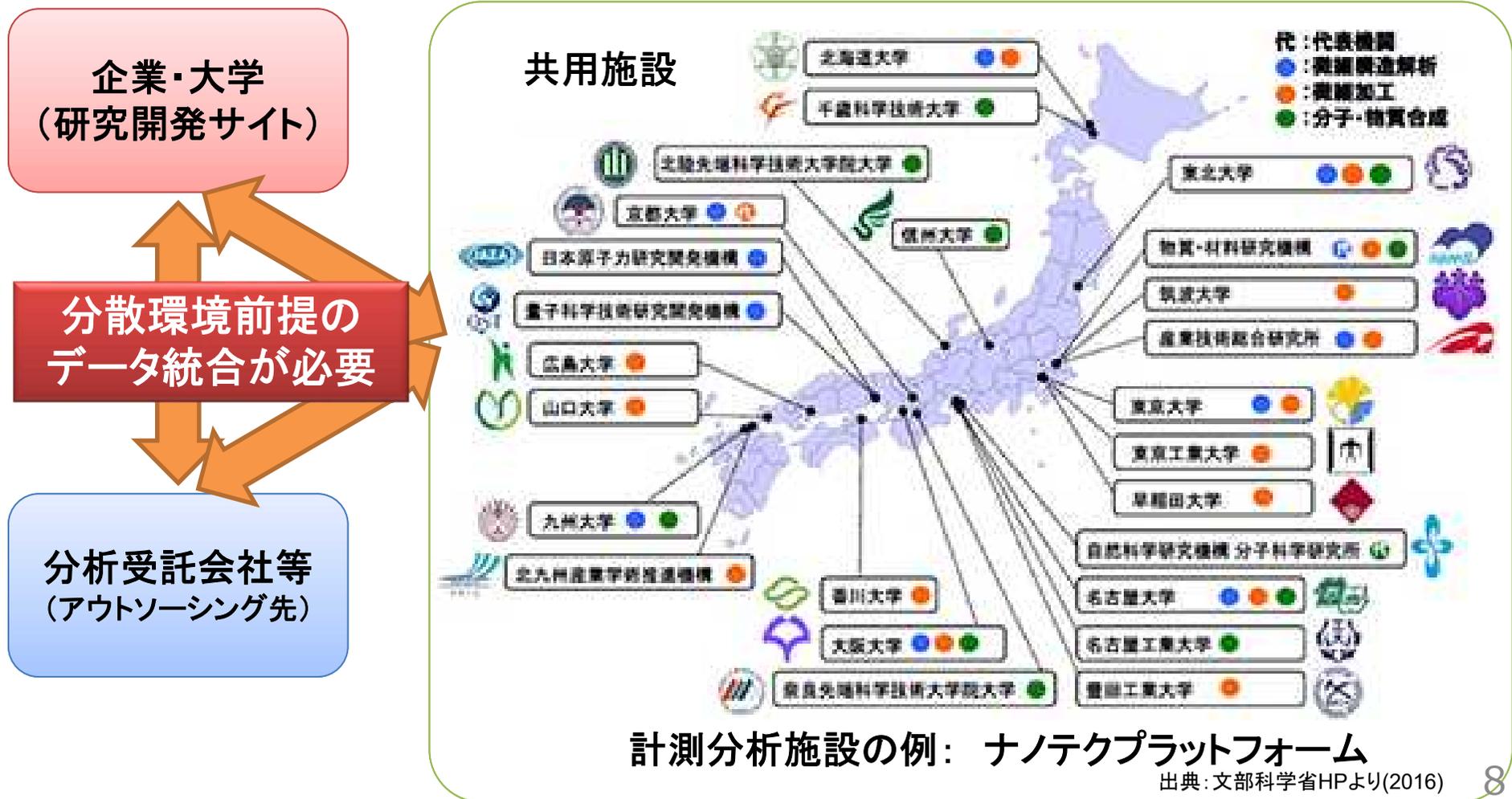
- 計測分析技術のプロジェクト立案に関しては、いろいろな観点と方向性が考えられる。
- 計測技術に関するCRDSの分類に基づき、**計測技術の開発から(=アウトプット)産業や科学技術の発展に貢献(=アウトカム)すること**を狙う。

	(基幹) 国家技術	(基礎) 科学技術	(応用) 産業技術
計測を基盤とする分野 (測ることは別の目的を達成するための手段)	(第1領域) 公共インフラ、テロ対策、防犯等の安心・安全の保障	(第3領域) 生命、ナノ・物質、情報・通信、環境・エネなど基礎科学の進展	(第5領域) 医薬、食品、素材、資源、電子機器、輸送機械等の産業発展・ベンチャー創出
計測分野 (測ること自体のレベル向上が目的)	(第2領域) 長さ、重さ等の計量標準の設定	(第4領域) 計測科学(計測工学、分析化学、ナノ計測、計測システムなど)の進展	(第6領域) 計測(機器、分析サービス等)の産業発展・ベンチャー創出

出所: CRDS調査報告書「科学における未解決問題に対する計測ニーズの俯瞰調査」(2011)

◆ 国内外の研究開発の動向と比較

- ナノテクプラットフォームなど、**先端計測分析機器の共用化**が進んでいる。(国内)
- 分析受託会社等への**アウトソーシング**も加速。(国内)



1. 事業の位置付け・必要性 (1) 事業の目的の妥当性

◆ 国内外の研究開発の動向と比較

データ駆動型の研究開発が世界的に進展

データ駆動型の研究開発に対して、**2011年以降、主要国の政府や企業が投資を強化。**

主要国政府のマテリアル×データの取組

国	概要
米国	<ul style="list-style-type: none"> ◆ Materials Genome Initiativeを2011年に立上げ。マテリアル開発の短期化・低コスト化に向け、従来の実験、計算に加え、データの重要性に着目。2014年6月に“Strategic Plan”を公表。2016年までに約5億米ドル（約560億円）を投資。 ◆ NIST, NSF, DOE, DoDなどで関連プロジェクトを実施（下記は代表例）。CNGMD（ローレンスパークレー国立研究所, UCバークレーなど）、SUNCAT Center（スタンフォード大, SLAC国立研究所）、CHiMaD（NIST, ノースウェスタン大, シカゴ大など）、PRISMS（ミシガン大） ◆ データプラットフォーム（レポジトリ）も各所で構築。
欧州	<ul style="list-style-type: none"> ◆ EUの枠組みでNOMAD（Novel Materials Discovery）プロジェクト（2015～2018：約500万ユーロ（約7億円））を実施。マックスプランク協会フリッツ・ハーバー研究所が中核。 ◆ スイスは独自にMARVEL（Materials’ Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials）プロジェクト（第1フェーズ：2014～2018で約1800万スイスフラン（約20億円））を実施。スイス連邦工科大学（EPFL）が中核。
アジア	<ul style="list-style-type: none"> ◆ 中国では、2016年、国家重点研究開発計画の一つとして、「材料ゲノム工学のキーテクノロジーと支援プラットフォーム」（約3億元（約50億円）/5年）を開始。上海、北京において大学を中心に拠点を構築。 <ul style="list-style-type: none"> ・上海大学に「Materials Genome Institute」（2015年）、上海交通大学に「材料ゲノム共同研究センター」（2016年）を設立。 ・中国科学院物理研究所・北京科技大学、中国鋼研科技集団有限公司等が共同で「北京材料ゲノム工学イノベーションセンター」（2017年）を設立。 ◆ 韓国では、2015年から10年計画で「Creative Materials Discovery Project」を実施（採択課題あたり最大約2.4億ウォン（約2500万円）/6年）。2016年、韓国科学技術研究所（KIST）に「Materials Informatics Database for Advanced Search（MIDAS）」を設置。

【出典】 科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター作成資料を基に文部科学省作成

マテリアル開発をAIで支援するスタートアップ（例）

シトリン・インフォマティクス@シリコンバレー

- **2013年**に創設されたスタートアップ企業
- マテリアルデータベースにAIの機械学習機能を統合して、求められる条件に最適化された組成を選び出すなど、マテリアル開発を加速するソフトを開発。
- 投資家にはアルファベット（旧グーグル）元会長のエリック・シュミット氏やヤフー創業者のジェリー・ヤン氏らが含まれている。

【出典】 三菱総合研究所「17号 フロネシス 知財誕生！」より文部科学省作成

日本におけるマテリアル×データの取組動向

- 我が国政府では、**2013年**にJST研究開発戦略センターが戦略プロポーザル（※）においてデータ駆動型物質・材料開発の重要性について政府に提言を行ったことをきっかけに、**2015年**にNIMSを中核機関とする「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」が発足。その後、内閣府（SIP）、文科省、NIMS、経産省、AIST等が取組を強化。

（※）「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）～物質・材料研究を飛躍的に発展させるための新たなパラダイムシフト～」

- 企業においても、特に**2017年以降**、素材メーカーで、IT関連投資を拡大させる動き
 - **2017年10月** 日立製作所
新材料開発の期間・コストの削減を支援する「材料開発ソリューション」提供開始
AIを活用したマテリアルズ・インフォマティクスに基づくデータ分析支援サービスなどを提供
 - **2017年10月** 横浜ゴム
インフォマティクス技術を活用したタイヤ設計技術を開発
 - **2019年6月** 三菱ケミカル株式会社
統計数理研究所と三菱ケミカルの共同研究部門設置について
 - **2019年10月** 住友ゴム工業株式会社
タイヤの性能持続技術開発を加速させるAI技術「Tyre Leap AI Analysis」を確立

【出典】 各社ニュースリリースより文部科学省作成

◆他事業との関係

マ名	研究開発テーマ名	2014年度	2015年度	2016年度	2017年度	2018年度	2019年度
	NEDO:エネルギー・環境新技術先導プログラム「ビッグデータ適応型の革新的検査評価技術の研究開発」						
	NEDO:「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」						
	イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築プロジェクト(JSPS)						

開発した共通データフォーマットを元に、改良型の共通データフォーマットを構築し、その最適化を行った。

イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォーム戦略の構築プロジェクト(JSPS)で提唱された独立可用性の概念に基づき、共通データフォーマットの仕様を決定した。

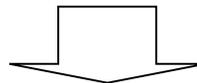
◆NEDOが関与する意義

社会的必要性が大きい

- ・本事業で開発される技術は、我が国が強みを有する素材開発技術、更には次世代ものづくりを支えるものであり、将来性が極めて高い。
- ・構造部材(カーボンコンポジット等)などの高性能化や、高効率製造技術の確立に寄与し、最終的に省エネに大きく貢献することが期待されるため、国民や社会のニーズを的確に反映している。

民間企業単独での実施が困難

- ・研究現場に限らず、開発・生産技術段階から量産へ向けたあらゆるシーン(生産、流通、故障解析等)に展開して、新規の市場の創出・獲得に繋げることが必要であり重要であるが、これを実現するためには、計測分析機器メーカー同士の連携、ユーザとの連携、研究機関との連携が必要であり、産官学の連携で実施する必要がある。
- ・長期かつ多額の研究開発費が必要。投入し、産学官の連携で実施する必要がある。



N E D O が も つ こ れ ま で の 知 識 、 実 績 を 活 か し て 推 進 す べ き 事 業

◆実施の効果 (費用対効果)

プロジェクト費用の総額 3.8億円(2年間)

売上予測(2030年)

年間売上額

1400億円

(新規市場創出効果として)

CO₂削減効果

11万tCO₂/年

(制御機器使用電力削減の効果として)

※売上、効果は全2030年度の推定値

◆事業の目標

複合計測分析システムとして、部素材のマイクロレベルの局所領域における各種計測分析機器のデータを統合し、AI等による高度な解析を可能とするハード・ソフトウェアプラットフォームを開発することで、ユーザが求める機能(機械特性、電気特性等)を有する部素材の開発を支援する

計測分析情報を統合し、且つAI等の解析を利用することで、未解決の複雑課題を解決



◆研究開発目標と研究内容

事業目標達成のため開発項目「複合計測分析システムの開発」に対し3つの課題を設定

研究課題名	技術開発の概要
課題1 CPS型複合計測「分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発	計測分析データの再現性、信頼性、遡及性が担保できる共通データフォーマットの開発を行い、データプラットフォームの構築を目指します。
課題2 CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発	共通試料ホルダーの開発と精密位置合わせ技術の開発により、同一試料の同一場所を分析対象にして、シームレスな空間情報の取得・利用を目指します。
課題3 AIを活用したビックデータ解析のモデル実証による評価技術の開発	統合解析を視覚的に実行できる統合ビューアおよび特徴量抽出などAI解析に向けたソフトウェアを開発します。

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

◆ 研究開発目標と研究内容

課題1: CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発

サブ課題名	研究開発目標	内容及び成果
[課題1-1]CPS型複合計測分析用機種対応データコンバータの開発	CPS型複合計測分析システムを構成する個別の計測分析装置で測定した結果に測定条件、試料処理などの情報を付与し、データの遡及性、信頼性、再現性を確保したデータフォーマットを開発する。	サイバー空間で遡及性、信頼性、再現性を保証した各分析装置共通のXMAILデータフォーマットの仕様を決定した。これにより共通データフォーマット(Ver.0)を開発した。
	タイヤ材料開発と磁石材料開発において活用が想定されるCPS型複合計測分析システムをモデル例にして、研究開発に使用する異なる計測分析装置の測定データを変換して、共通に取り扱うことを可能にするデータコンバータを開発する。	XMAILフォーマットに変換できる分析装置(4社で計14種類)用のデータコンバータを開発した。
	放射光施設での測定データとCPS型複合計測分析システムの測定データを連携させるためのデータフォーマット等に要求される機能・性能を明らかにする。	放射光施設(SACLA)のデータシステムに新規にデータフォーマットを変換するコンバータを作成、データを連携させることが最も適切であることを明らかにした。
[課題1-2]秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の確立	タイヤメーカーと磁石材料メーカーの研究開発をモデル事例として、秘密性・安全性を確保したデータ収集・データ管理技術の仕様を作成する。	秘密性/安全性を確保したデータ収集・データ管理技術の仕様を作成した。

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

課題2 : CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発

研究サブ課題名	研究開発目標	内容及び成果
[課題2-1]CPS型複合計測分析に適応する試料ホルダ作成技術の開発	各種分析装置に適用する試料ホルダを開発する。測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能なアダプタも搭載可能な仕様を作成する。	同一試料を各種計測機器にて測定可能とする共通的な試料ホルダを製作し、試料観察の際に十分機能することを確認した。また測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能な環境アダプタの仕様を策定し、その仕様に基づく試料輸送用チャンバーを試作した。4計測機器メーカーによるラウンドロビン試験を実施し、仕様を満たす結果が得られることを確認した。
[課題2-2]測定位置精密位置合わせ技術の開発	研究課題2-1で開発・試作した共通試料ホルダを使用し、複数の機器において位置再現性を向上させる試料保持方法の共通化技術を開発する。装置間の位置再現精度は位置合わせマーカとアライメント法の確立により実現する。さらに、ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において、同一試料の観察位置を分散したナノ粒子をマーカとして3 μ m以下の精度で合わせこむ測定位置合わせ技術を開発する。	共通試料ホルダに各社計測機器メーカーの装置で観察可能なマーカを実装し、位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発。位置合わせマーカとアライメント法の確立で $\pm 3.0 \mu$ m以内の位置再現性を確認。 併せてナノ粒子によるフィンガープリント法で蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において $\pm 3.0 \mu$ m以内の精度が実現できることを確認し、測定位置合わせ技術を開発
[課題2-3]試料前処理技術の開発:均質な試料調整法とその評価法の開発	①安定かつ均一な分散液作成のため、ナノ材料分散に関与する影響因子を抽出し、分散性等の評価手法を検討する。 ②一次粒子のサイズと形状や二次粒子の形態など、多様な情報を顕微鏡観察で引き出すため、ナノ材料の顕微鏡用基板上展開法について、試料品質を左右する要因を確定し、表面展開試料品質の簡易評価法を確立する。	①液中ナノ材料分散に対する影響因子FBDとして整理し、液中分散試料作製に係る重要な影響因子を特定した。さらに微粒子を表面展開する方法と表面展開した試料粒子の分布の均一性についてFBDに整理した。 ②電子顕微鏡評価用試料の均質調製方法とその評価法の開発を行った。試料品質に影響を与える因子をFBDにまとめるとともに、蛍光顕微鏡を利用した粒子の均質展開状態を判定する迅速かつ簡易な評価法や、光学顕微鏡による白色光斜上照射暗視野顕微法を用いた孤立粒子試料部の簡易検出法などを開発した。

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

課題3: AIを活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発

研究サブ課題名	研究開発目標	内容及び成果
[課題3-1] 測定データの信頼性向上技術の開発	タイヤ材料の開発に使われる計測分析法4種類(ガスクロマトグラフ、ガスクロマトグラフ質量分析計、液体クロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計)、磁石材料の開発に使われる3種類(走査電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、蛍光X線分析装置)の手法について、信頼性に対して大きな影響を与えうる不確かさ因子を検討しFish-bone図(FBD)の基本骨格をまとめる。	タイヤ材料開発用(4種類)、磁石材料開発用(3種類)の計測分析法についてFBDにまとめるとともに、実データに基づいて主たる因子の寄与を評価した。
[課題3-2] 相関解析に向けた統合ビューア作成技術の開発	AI活用に必要な解析用ソフトウェア環境(アプリケーションフィールド)を構築するため、A)タイヤ材料の研究開発に適用される複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)とB)磁石材料の研究開発に活用される粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)の統合ビューアを試作し、統合ビューア技術を開発する。	A) 複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)の統合ビューアを完成させた。B) 粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)統合ビューアを完成させた。
	統合ビューアで活用される画像データを補償する補償ツールを試作し、計測・分析方法や試料作成等のフローを可視化し、修正するための可視化ツールを試作する。	ある条件、電子顕微鏡で撮影した画像のデータ補償を行い、異なる条件、異なる電子顕微鏡で撮影された画像と比較できるようにするためのデータ補償ツールを開発し公開した。 複数のXMAIL内に記述された計測・分析のフローをペトリネットと呼ばれる離散分散システムを数学的に表現するための記法であるPNML形式と対応する形で記述することで可視化し、接続がおかしい部分を明確にすることで修正できるツールをXMAIL-Viewer(仮名)として試作した。

2. 研究開発マネジメント (1) 研究開発目標の妥当性

課題3: AIを活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発

研究サブ課題名	研究開発目標	内容及び成果
[課題3-3] 相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価	<p>磁石材料およびタイヤ材料を対象として、材料の組成や界面構造、欠陥等の因子に関する情報を多数の計測分析装置を使って収集した結果をもとに、構造化ライブラリを試作開発する。合わせて物性との相関を誤差要因も考慮して解析し、製品の性能の予測が可能となる評価項目の候補を決定する。</p>	<p>ゴム材料の分子量分布推定の精度について、ベイズ推定を用いた精度と不確かさを定量化する手法についても検討し、マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を用いて分子量分布の不確実性を定量的に評価可能な手法を開発した。</p> <p>磁石材料に関して、多変量相関図を作成して特徴量間の関係性の強いものを選出し、それを基に構造方程式モデリングを用いて相関解析を行い構造化ライブラリとした。また、製品性能を予測する評価項目を新たに示唆することができた。</p>
	<p>タイヤ材料、磁石材料を対象にフィラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出とこれに基づく解析アルゴリズムを試作開発する。</p>	<p>タイヤ材料解析に向けて、フィラー凝集状態に関わる特徴量を抽出し、それに基づき相関解析するソフトウェアパッケージを試作開発した。磁石材料開発に向けて、実際の結晶粒界画像から特徴量を自動抽出できるソフトウェアパッケージ、開発した関数パッケージとともにMatlab機能を利用する新たな変換・表示用ソフトウェアパッケージを試作開発した。</p>
	<p>タイヤ材料、磁石材料のビッグデータ・AI活用に向け、モデル計測データやモデル解析データの授受を通して複合計測分析システムモデルの評価を行う。</p> <p>A) タイヤ材料開発の効率化に向けて共通フォーマットに変換されたデータ群の蓄積を進め、統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。</p> <p>B) 磁石材料開発の効率化に向けて、多種の計測分析装置で収集された複合・補間データと粒界構造解析用統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。</p>	<p>2種類の複合計測分析システムモデルを構築した。</p> <p>A) 複合積層構造解析用統合ビューア これまで経験的にしか知られていなかった相関関係を明確化することが可能になり、新たなタイヤ材料開発の指針を得ることが可能になった。</p> <p>B) 粒界構造解析用統合ビューア Nd系磁石5種類のモデル試料を用いて収集された多量の複合・補間データを活用して、構造と物性の相関を迅速に解明できることを明らかにした。</p>

2. 研究開発マネジメント (2) 研究開発計画の妥当性

◆ 研究開発のスケジュール

課題1 CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発

(課題リーダー；島津製作所)	2018年度	2019年度
課題1-1 CPS型複合計測分析用機種対応データコンバータの開発		
<ul style="list-style-type: none"> 実データ/付加情報の提供 (住友ゴム、TDK) 	<ul style="list-style-type: none"> ユーザー視点でのコンバータ作成協力 実データの提供および必要なデータの新たな取得 データに付与すべき情報の選定および検証 	
<ul style="list-style-type: none"> データフォーマットの作成 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場、九工大) 	<ul style="list-style-type: none"> 共通フォーマット仕様の作成 	
<ul style="list-style-type: none"> データコンバータ開発 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場) 	<ul style="list-style-type: none"> データコンバータ要素開発 	<ul style="list-style-type: none"> データコンバータの開発と課題抽出
<ul style="list-style-type: none"> CPS型計測分析高度化のための調査研究 (理研) 	<ul style="list-style-type: none"> 放射光施設と計測分析器の調査研究 次世代検出器対応に関する調査研究 X線画像検出器の標準評価 	<ul style="list-style-type: none"> データ連携に関する調査研究 プロトコルの検討
課題1-2 秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発		
<ul style="list-style-type: none"> 秘密性/安全性の提案 (住友ゴム、TDK) 	<ul style="list-style-type: none"> データの秘密性・安全性に関してユーザーの立場からの仕様提案 	
<ul style="list-style-type: none"> 秘密性/安全性確保のための管理技術の開発 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場、九工大) 	<ul style="list-style-type: none"> DIを確保したデータ収集/管理方法の仕様作成 	

2. 研究開発マネジメント (2) 研究開発計画の妥当性

課題2 CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発

(課題リーダー; 日立ハイテクノロジーズ)	2018年度	2019年度
課題2-1 CPS型複合計測分析に適応する試料ホルダー製作技術の開発		
<ul style="list-style-type: none"> 試料ホルダー共通化技術 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場) 	<ul style="list-style-type: none"> 仕様検討および試作 	<ul style="list-style-type: none"> 実証、課題抽出、改良版の試作品
<ul style="list-style-type: none"> 試料ホルダー共通化技術 (クライオ電顕) (九工大) 	<ul style="list-style-type: none"> 製品設計およびプロトタイプ 	<ul style="list-style-type: none"> 改良、ドリフト補正検討、同一視野精度の向上
<ul style="list-style-type: none"> 試料状態モニター技術 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場) 	<ul style="list-style-type: none"> 技術調査、仕様検討 	<ul style="list-style-type: none"> 試料環境測定アダプタの仕様決定
課題2-2 測定位置精密位置合わせ技術の開発		
<ul style="list-style-type: none"> マイクロ解析装置とマクロ解析装置との位置合わせ (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場、九工大) 	<ul style="list-style-type: none"> 先導研課題の抽出と改善法の検討 	<ul style="list-style-type: none"> アライメントマークの最適化アライメントのアルゴリズムの検討
課題2-3 試料前処理技術の開発:均質な試料調整法とその評価法の開発		
<ul style="list-style-type: none"> ナノ材料の液体中への均質分散法・評価法の確立 (産総研) 	<ul style="list-style-type: none"> 影響因子の抽出 分散性、均質性の評価 手法検討 	
<ul style="list-style-type: none"> 顕微鏡用試料の均質試料調整法とその評価法 の開発 (産総研) 	<ul style="list-style-type: none"> SEM:課題整理、要員の確定 AFM:滴下法の評価 	

2. 研究開発マネジメント (2) 研究開発計画の妥当性

課題3 AI活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発

(課題リーダー；産総研)		2018年度	2019年度
課題3-1 測定データの信頼性向上技術の開発			
・FBD作成と不確かさ評価 (産総研)	・粒界判定の影響要因抽出とFBDの基本骨格まとめ		
課題3-2 相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発			
・データ補償ツールの開発 (九工大)	・データ補償ツール仕様検討と試作 ・フロー可視化ツール仕様検討と試作		
・有機材料系/無機材料系統合ビューアの開発 (島津、日本電子、日立ハイテック、堀場)	・マイクロ系、ミクロ・マクロ系の統合ビューア仕様検討とコンポーネント試作開発		
・有機/無機データの取得と統合ビューアの検証 (住友ゴム、TDK)	・タヤ、磁石材料の提供と各種測定 ・特徴量抽出の議論・提案		・AI解析に向けたタヤ、磁石材料用統合ビューアの検証
課題3-3 相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価			
・構造ライブラリーの作製 (名大)	・マイクロ、ミクロ・マクロ構造や物性に関するデータ取得		・構造ライブラリーの作製
・AI利用環境のモデル化・構築 (島津、日本電子、日立ハイテック、堀場)	・タヤ材料、磁石材料の特性データ解析の基本検討 ・データ間の特徴抽出、因果構造抽出		・各種解析前処理 ツールの作成・検証
・特徴量抽出とベイズモデリングによる最適化 (産総研)	・課題把握と作業仮説作成 ・特徴量抽出と実証アルゴリズムの検討(主に磁石材料)		・結晶粒自動分割AI及び解析ソフトウェアパッケージ作成(磁石材料) ・フィラー形態、分散性の画像診断手法開発(タヤ材料)
・データの相関解析とAI解析による効率化検証 (住友ゴム、TDK)	・各種ゴム、磁石材料の提供と構造パラメータ化、ライブラリー化		・ゴム及び磁石材料の特性データ取得と各データの組み合わせ解析

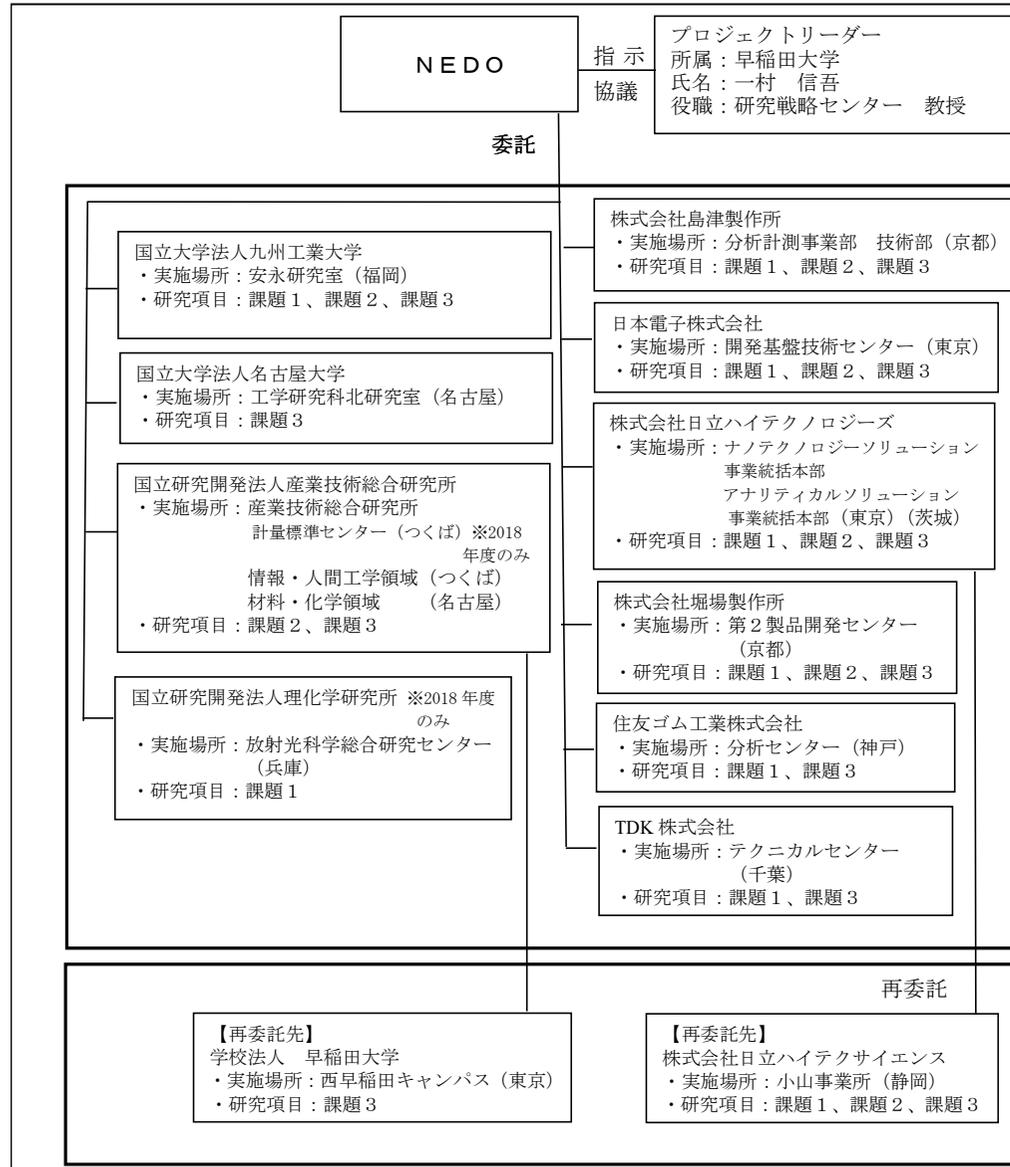
◆プロジェクト費用

(単位：百万円)

研究開発項目	2018年度	2019年度
複合計測分析システムの開発	281	102

2. 研究開発マネジメント (3) 研究開発の実施体制の妥当性

◆ 研究開発の実施体制



2. 研究開発マネジメント (3) 研究開発の実施体制の妥当性

◆ 研究開発の実施体制

研究開発項目に対して、3つの課題を設定し役割を分担

計測分析装置メーカー(4社)/大学
島津製作所、日本電子、日立ハイテック、堀場製作所、九州工業大学

課題①

- ・データフォーマットの作成(計測分析装置メーカー、九工大) [課題1-1]
- ・データコンバータ開発(計測分析装置メーカー) [課題1-1]
- ・秘密性/安全性確保のための管理技術の開発 [課題1-2]
(計測分析装置メーカー、九工大)

課題②

- ・CPS型複合計測分析用の試料ホルダー共通化技術 [課題2-1]
(計測分析装置メーカー、九工大)
- ・試料状態モニター技術(計測分析装置メーカー) [課題2-1]
- ・測定位置精密位置合わせ技術の開発 [課題2-2]
(計測分析装置メーカー、九工大)

課題③

- ・データ補償ツールの開発(九工大) [課題3-2]
- ・統合ビューア技術の開発 (計測分析装置メーカー) [課題3-2]
- ・AI利用環境のモデル化・構築(計測分析装置メーカー) [課題3-3]

素材・部材メーカー/国立研究機関

住友ゴム工業、TDK、名古屋大学、産業技術そごう研究所、理化学研究所

課題①

- ・実データ/付加情報の提供(住友ゴム、TDK) [課題1-1]
- ・CPS型計測分析高度化のための調査研究(理研) [課題1-1]
- ・秘密性/安全性の提案(住友ゴム、TDK) [課題1-2]

課題②

- ・試料前処理技術の開発(産総研) [課題2-3]
- ・均質な試料調整方法とその評価方法の開発(産総研) [課題2-3]
- ・顕微鏡用試料の均質試料調製法と評価法の開発(産総研) [課題2-3]

課題③

- ・測定データの信頼性向上技術の開発(産総研) [課題3-1]
- ・有機/無機データの取得と統合ビューアの検証(住友ゴム、TDK) [課題3-3]
- ・構造ライブラリーの作成(名古屋大学) [課題3-3]
- ・微量量抽出とベイズモデリングによる最適化(産総研) [課題3-3]
- ・データの相関解析とAI解析による効率化検証(住友ゴム、TDK) [課題3-3]

2. 研究開発マネジメント (4) 研究開発の進捗管理の妥当性

◆ 研究開発の進捗管理

主な会議	開催頻度	メンバー	内容	実績
技術推進委員会(NEDO主催)	年1回	実、P、外部委員、N	外部委員による進捗議論	1回(外部有識者の意見を運営管理に反映させ、研究開発を加速化した。)
プロジェクト進捗報告会	2か月に1回	実、P、N	プロジェクト推進のための検討委員会	12回
各実施者への訪問、ヒヤリング	年2回(1実施者)	実、N	進捗確認	20回(10実施者分)
個別課題打ち合わせ	随時	実、P、N	プロジェクト推進のための検討会議	随時
知財委員会	随時	実、P	知財に関する検討委員会	6回
展示会	随時	実、P、N	成果の普及	1回
シンポジウムでの講演	随時	P	成果の普及	3回

実：実施者、P：PL、委：外部委員、N：NEDO

◆ 動向・情勢の把握と対応

情勢	対応
<p>政府予算方針の変更に伴い、事業期間を5年から2年に短縮した。</p>	<p>基本計画を変更した。</p>
<p>3年目以降に実施すべき項目から、特に重要な標準化については、経済産業省直轄事業「戦略的国際標準化加速事業のテーマである「計測分析装置の計測分析データ共通フォーマットおよび共通位置合わせ技術のJIS開発」」に移行した。</p>	<p>経済産業省産業技術環境局国際標準課、製造産業局産業機械課、NEDO標準化ユニットと連携し、経済産業省が設置するステアリンググループに、材料ナノテクノロジー部として参画し、相互にフィードバックしている</p>

◆ 開発促進財源投入実績

年度	金額	目的	成果
2018年度	2百万円	ゴム系材料の特徴量抽出・評価の為に、微弱信号のノイズとの分離や高速データ処理に向けたソフトウェアを開発することを目的とした。	再委託先を新規に加えて、ゴム系材料のAI活用に向けたモデル実証の為に、AI等を利用した特徴量抽出のための解析パッケージ開発を行うことができた。

◆ 知的財産権等に関する戦略

課題1: CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発
課題2: CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発
課題3: AI活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発
課題3-1: 測定データの信頼性向上技術の開発
課題3-2: 相関解析に向けた統合ビューアー作製技術の開発
課題3-3: 相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価



課題1、課題2: 研究成果のオープン化を基本方針⇒標準化への展開を進める方向;
防衛的観点での取得にとどめ、成果の用途が確立した時点で、出願を進める。

課題3-1: オープン戦略に基づく広範な展開を図る。

課題3-2: 新たな素材を開発するグループの知見・ノウハウを活用することが想定される部分については限定的なメンバーでの利用を第一ステップとするセミクローズとする。統合解析に向けたソフトウェアやアルゴリズム、データベースシステムなどは、オープン戦略に基づいて積極的な活用を図る。但し、研究成果物の知的財産化には配慮する。

課題3-3: 新たな素材開発するグループの研究開発に係わる知見・ノウハウが集約されることが想定される部分については、クローズな運用を基本として研究開発を推進する。AI技術や開発されるソフトウェアなどは、基本フレーム部分のみをオープンな成果物の対象とする。

◆知的財産管理

➤ 知的財産権取扱規程の制定

◇「知財及びデータの取り扱いについての合意書」を制定

- ・知的財産権の帰属
- ・知的財産権の組合員間での実施許諾
- ・成果の秘匿及び届出
- ・知財委員会の役割 等について規定

➤ 知財委員会の運用

◇ 全実施者をメンバーとし、PLを委員長とした。

◇ 特許出願等の可否、論文等による成果公表の是非等について判断し決定した。

◇ 委員会を開催(PJ期間中、計6回開催)

**「省エネ製品開発の加速化に向けた複合計測分析システム研究開発事業」
(事後評価)**

(2018年度～2019年度 2年間)

**5.2 研究開発成果、成果の実用化に向けた取組及
び見通し**

PL 一村信吾 (早稲田大学)

2020年11月18日

Ⅲ. 研究開発成果

(1) 研究開発目標の達成度及び研究開発成果の意義

(2) 成果の普及

(3) 知的財産権の確保に向けた取組

3. 研究開発成果 (1) 研究開発課題・サブ課題と実施期間

- 3つの研究課題（各課題に複数のサブ課題）を設定して研究を推進
- 一部のサブ課題は、2年目の見直して実施をとりやめ（実質1年間の研究遂行）

研究課題名	研究サブ課題名と実施期間	
	2018年度	2019年度
【研究課題1】CPS型複合計測分析用のデータプラットフォーム構築技術の開発	【課題1-1】CPS型複合計測分析用機種対応データコンバータの開発（注1）	
	【課題1-2】秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発	注記：実施しない
【研究課題2】CPS型複合計測分析用の試料保持、精密位置決め技術の開発	【課題2-1】CPS型複合計測分析に適応する試料ホルダ作製技術の開発	
	【課題2-2】測定位置精密位置合わせ技術の開発	
	【課題2-3】試料前処理技術の開発：均質な試料調製法とその評価法の開発	注記：実施しない
【研究課題3】AIを活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発	【課題3-1】測定データの信頼性向上技術の開発	注記：実施しない
	【課題3-2】相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発	
	【課題3-3】相関解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価	
注1 課題1-1の中で理研が担当する調査研究は2018年度のみ（1年間）		

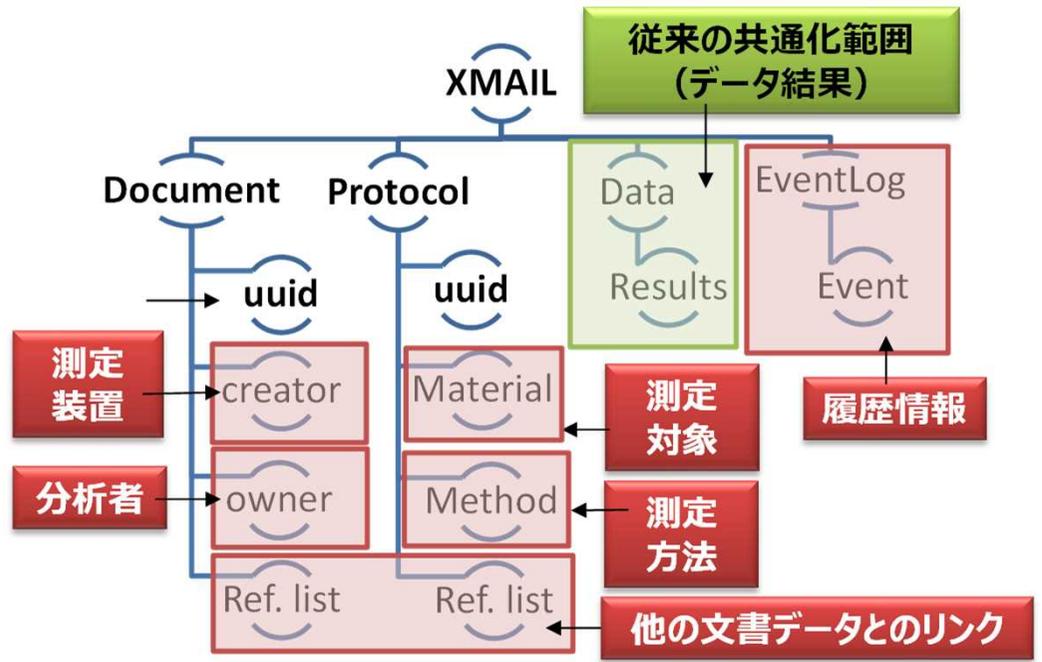
次ページ以降に、各課題(サブ課題)に関する**最終目標**と**成果**を記載。
 成果の達成度の表示 ◎:大きく上回って達成 ○:達成

3. 研究開発成果 (1)最終目標1-①と研究成果、成果の達成度(意義)

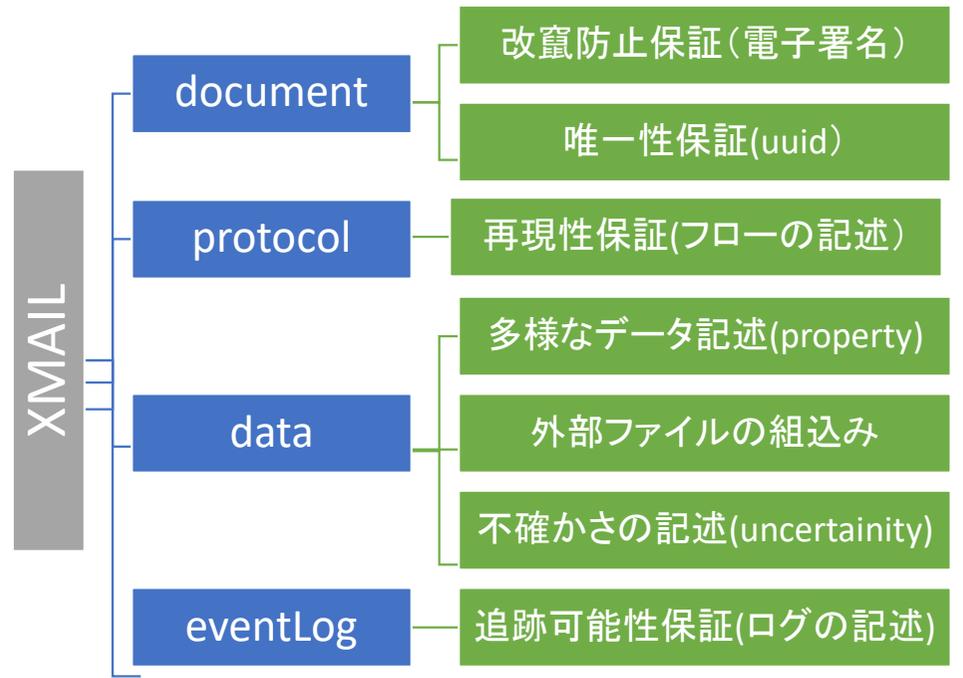
【最終目標1-①】 (研究課題1-1関連)
 CPS型複合計測分析システムを構成する個別の計測分析装置で測定した結果に測定条件、試料処理などの情報を付与し、データの遡及性、信頼性、再現性を確保した共通データフォーマットを開発する。

【研究成果1-①】 成果の達成度 ◎
 独立可用性 (注) を保証するため、4つの主タグ、即ちdocument、protocol、data、およびeventLogを規定し、サイバー空間で遡及性、信頼性、再現性を保証した各分析装置共通のXMAILデータフォーマットの仕様を決定した。これにより共通データフォーマット (Ver.0) を開発した。

注: データがサイバー空間に移行した際に、多様なデータ記述(不確かさを含む)に加えて、計測分析に関わる全ての情報(再現性, 追跡可能性)が改変防止された状態で存在すること。



共通データフォーマットの特徴(従来との比較)



共通データフォーマット XMAILの構造

3. 研究開発成果 (1)最終目標1-②と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標1-②】(研究課題1-1関連)

タイヤ材料開発と磁石材料開発において活用が想定されるCPS型複合計測分析システムをモデル例にして、研究開発に使用する異なる計測分析装置の測定データを変換して、共通に取り扱うことを可能にするデータコンバータを開発する。

【研究成果1-②】 成果の達成度 ◎

タイヤメーカーと磁石メーカーの要求を反映させて、測定データを前述のXMAILフォーマットに変換できる分析装置(4社で計14種類)用のデータコンバータを開発した。

コンバータを開発した装置名と開発担当機関

【(株)島津製作所】

液体クロマトグラフ(LC)、ガスクロマトグラフ(GC)、液体クロマトグラフ質量分析計(LCMS)、ガスクロマトグラフ質量分析計(GCMS)、赤外分光光度計(FTIR)

【日本電子(株)】

走査電子顕微鏡(SEM)、透過電子顕微鏡(TEM)、エネルギー分散型X線分析装置(EDS)、電子線プローブマイクロアナライザ(EPMA)、核磁気共鳴装置(NMR)、蛍光X線分析装置(XRF)、電子線後方散乱回折装置(EBSD)

【(株)日立ハイテクノロジーズ】

走査電子顕微鏡(SEM)、透過電子顕微鏡(TEM)、原子間力プローブ顕微鏡(AFM)、蛍光X線分析装置(XRF)

【(株)堀場製作所】

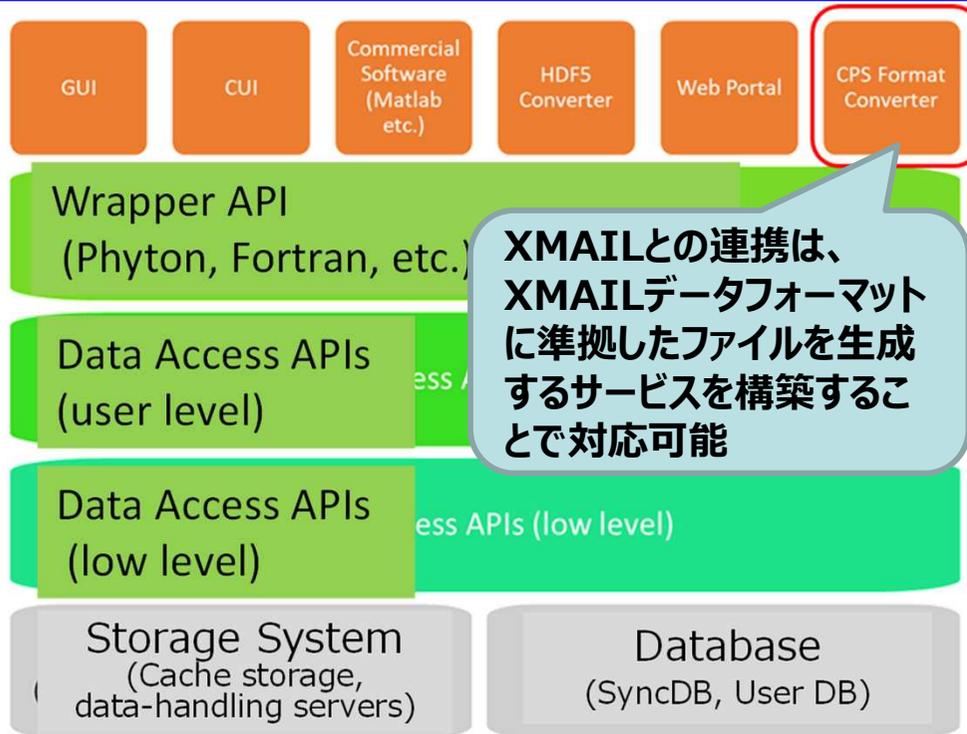
ラマン分光分析装置(ラマン)、蛍光X線分析装置(XRF)

【最終目標1-③】 (研究課題1-1関連)
放射光施設での測定データとCPS型複合計測分析システムの測定データを連携させるためのデータフォーマット等に要求される機能・性能を明らかにする。

【最終目標2】 (研究課題1-2関連)
タイヤメーカーと磁石材料メーカーの研究開発をモデル事例として、秘密性・安全性を確保したデータ収集・データ管理技術の仕様を作成する。

【研究成果1-③】 成果の達成度 ○
放射光施設 (SACLA)のデータシステムに新規にデータフォーマットを変換するコンバータを作成、データを連携させることが最も適切であることを明らかにした。

【研究成果2】 成果の達成度 ○
計測分析装置のユーザ企業である住友ゴムとTDKからのデータの秘密性/安全性に関する要望・意見に基づき、以下の仕様を決定した



- 改竄や差し替えを防ぐため、データファイル全体にXML署名を行う
- 同一条件での計測・分析が可能な情報は全てXMAIL上に持つ。但し公開したくない装置調整条件、中間データなどは非公開データとして、部分的に暗号化することができる
- 部分的な暗号化については、XMLエレメント暗号技術を使用する。(技術の進展や実際の運用に合わせた継続的に審議が必要)
- 暗号化に関しては、完全にデコードできるものとする。暗号化の方式については、SSL/TLS等を想定する(暗号化技術の進展がみられるため継続的に審議が必要)
- 上述の非公開情報は、そのまま外部ファイルとしてリンクできる仕様とする。ただし、外部ファイルのハッシュ値を持つことにより、外部ファイルの改変に耐えられるものとする。
- 外部ファイルが存在する場合には、ZIP形式によりXMAILと併せてひとつのファイルにまとめるものとし、相対パスネームとして記述するものとする。

SACLAのデータアクセスのためのレイヤ構成

決定した仕様の概要

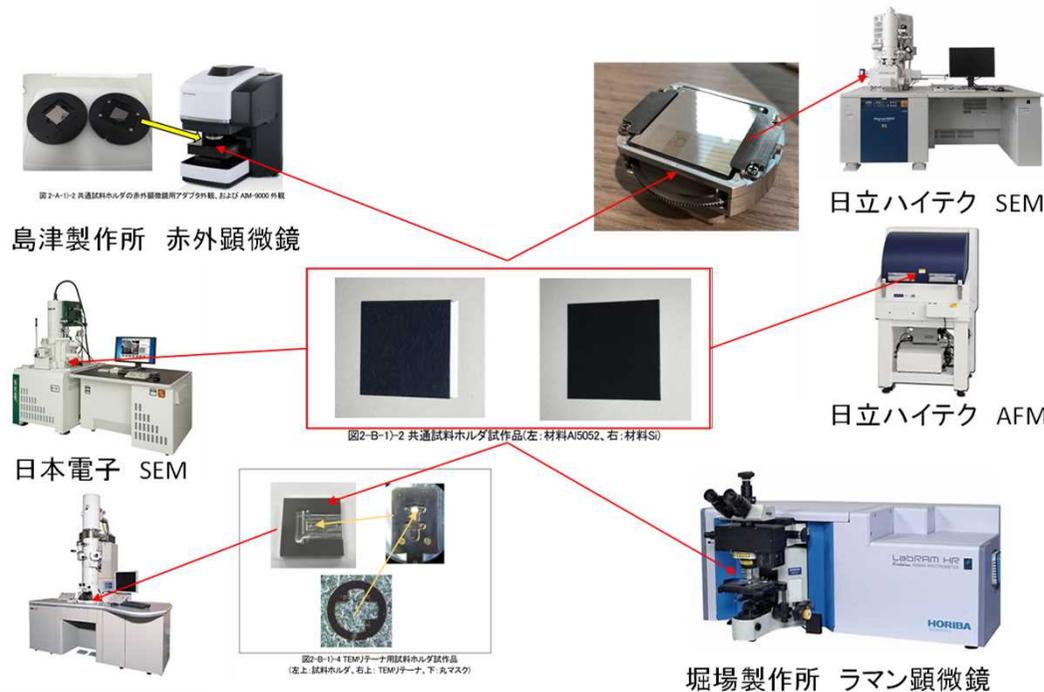
3. 研究開発成果 (1)最終目標3と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標3】 (研究課題2-1関連)

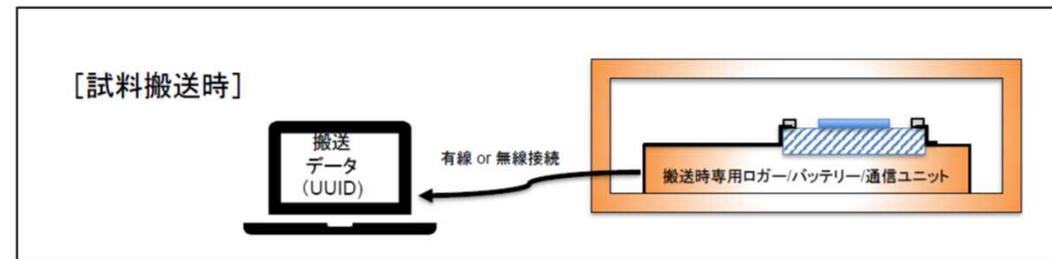
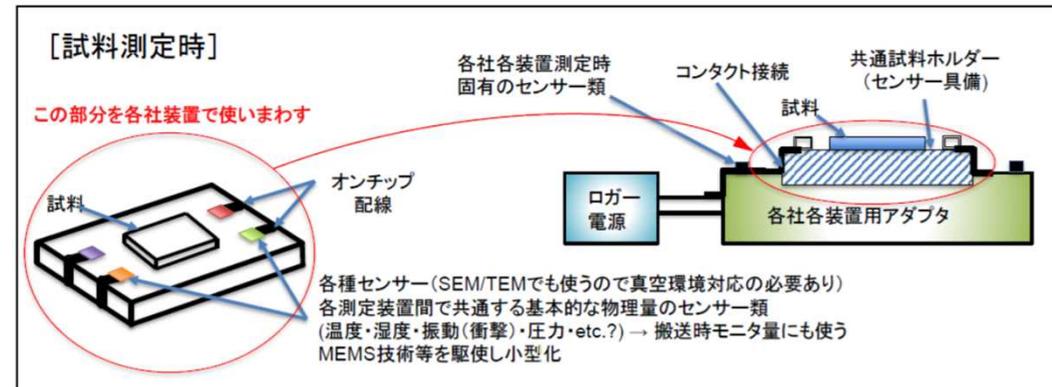
走査電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、顕微赤外分光光度計、ラマン分光分析装置間に適用する試料ホルダを開発する。測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能なアダプタも搭載可能な仕様を作成する。

【研究成果3】 成果の達成度 ○

同一試料を走査電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、顕微赤外分光光度計、ラマン分光分析装置にて測定可能とする共通的な試料ホルダを製作し、4社の装置で試料観察の際に十分機能することを確認した。また測定中の温度、湿度、電子ビーム照射量が測定可能な環境アダプタの仕様を策定し、その仕様に基づく試料輸送用チャンバーを試作した。4計測機器メーカーによるラウンドロビン試験を実施し、仕様を満たす結果が得られることを確認した。



共通試料ホルダを各社・各種装置に装着して観察



環境アダプターの試作とラウンドロビン試験の実施

3. 研究開発成果 (1)最終目標4と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標4】(研究課題2-2関連)

研究課題2-1で開発・試作した共通試料ホルダを使用し、複数の機器において位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発する。装置間の位置再現精度は位置合わせマーカとアライメント法の確立により実現する。さらに、ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において、同一試料の観察位置を分散したナノ粒子をマーカとして3 μm 以下の精度で合わせこむ測定位置合わせ技術を開発する。

【研究成果4】 成果の達成度 ◎

共通試料ホルダに参画4計測機器メーカーの装置で観察可能なマーカを実装し、位置再現性を向上させる試料保持法の共通化技術を開発。位置合わせマーカとアライメント法の確立で $\pm 3.0 \mu\text{m}$ 以内の位置再現性を確認。併せてナノ粒子によるフィンガープリント法で蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において $\pm 3.0 \mu\text{m}$ 以内の精度が実現できることを確認し、測定位置合わせ技術を開発



■ 各装置間の位置座標の比較
蛍光粒子 $\phi 6 \mu\text{m}$

	AIホルダ(蛍光粒子1)	
	X方向ずれ(μm)	Y方向ずれ(μm)
FTIR(島津)	0.0	0.0
ラマン(堀場)	0.03	0.13
SEM(日本電子)	0.37	-0.17
SEM(日立)	-0.68	-0.48

アラインメントマーカを搭載した試料ホルダーと評価結果

ナノ粒子マーカを用いた精密位置合わせ結果 (目標とする3 μm 以下の精度を実現)



赤○、緑○は3, 0.2 μm のビーズ

(蛍光+明視野)顕微鏡とTEMのオーバーラップ像
ターゲットは大腸菌(黒で表現)
ステージ誤差補正後の精度: 240nm (黄と橙の十のズレ)

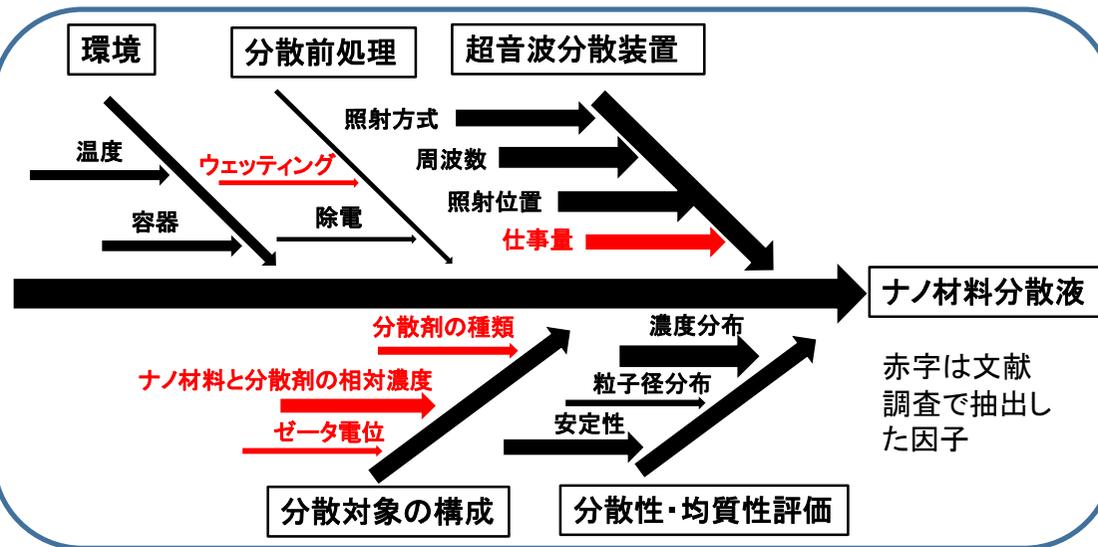
光学顕微鏡とTEMのビーズを用いた高精度位置合わせ

【最終目標5】(研究課題2-3関連)

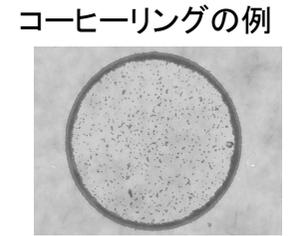
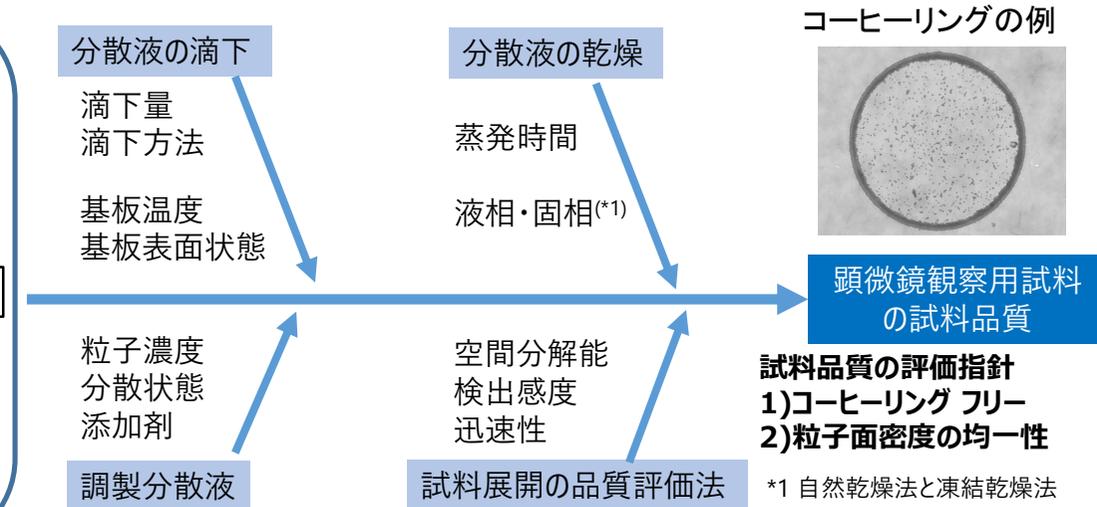
- ①安定かつ均一な分散液作製のため、ナノ材料分散に関する影響因子を抽出し、分散性等の評価手法を検討する。
- ②一次粒子のサイズと形状や二次粒子の形態など、多様な情報を顕微鏡観察で引き出すため、ナノ材料の顕微鏡用基板上展開法について、試料品質を左右する要因を確定し、表面展開試料品質の簡易評価法を確立する。

【研究成果5】 成果の達成度 ○

- ①液中ナノ材料分散に対する影響因子FBDとして整理し、液中分散試料作製に係る重要な影響因子を特定した。さらに微粒子を表面展開する方法と表面展開した試料粒子の分布の均一性についてFBDに整理した。
- ②電子顕微鏡評価用試料の均質調製方法とその評価法の開発を行った。試料品質に影響を与える因子をFBDにまとめるとともに、蛍光顕微鏡を利用した粒子の均質展開状態を判定する迅速かつ簡易な評価法や、光学顕微鏡による白色光斜上照射暗視野顕微法を用いた孤立粒子試料部の簡易検出法などを開発した。



ナノ材料分散に関する影響相関のまとめ(FBD図)



試料品質の評価指針
 1)コーヒーリングフリー
 2)粒子面密度の均一性
 *1 自然乾燥法と凍結乾燥法

ナノ粒子分散液を基板上に展開するときの試料品質要因

3. 研究開発成果 (1)最終目標6と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標6】 (研究課題3-1関連)

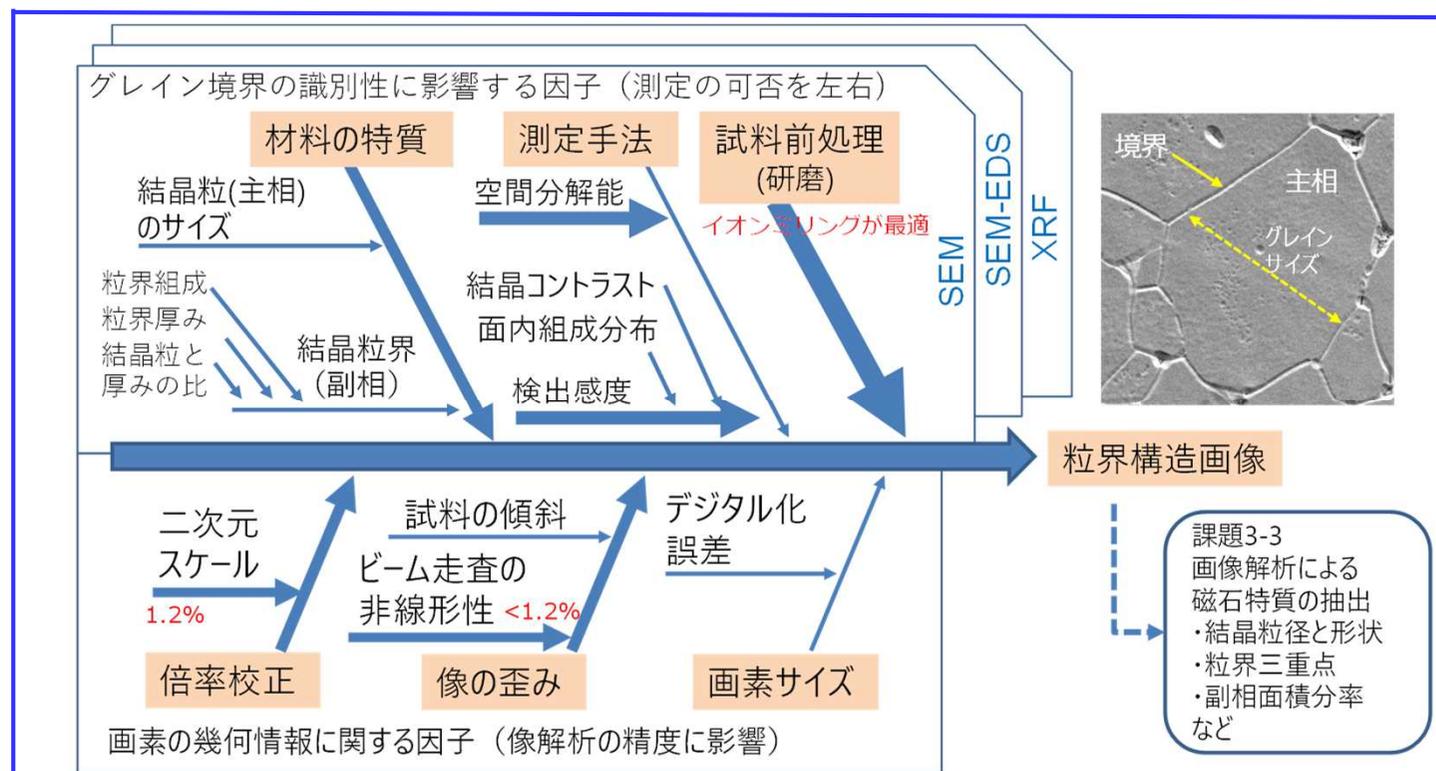
タイヤ材料の開発に使われる計測分析法4種類 (ガスクロマトグラフ[GC]、ガスクロマトグラフ質量分析計[GC-MS]、液体クロマトグラフ[LC]、液体クロマトグラフ質量分析計[LC-MS])、磁石材料の開発に使われる3種類 (走査電子顕微鏡[SEM]、エネルギー分散型X線分析装置[EDS]、蛍光X線分析装置[XRF]) の手法について、信頼性に対して大きな影響を与える不確かさ因子を検討しFish-bone図 (FBD)の基本骨格をまとめる。

【研究成果6】 成果の達成度 ○

タイヤ材料開発用 (4種類)、磁石材料開発用 (3種類) の計測分析法についてFBDにまとめるとともに、実データに基づいて主たる因子の寄与を評価した。**タイヤ材料開発用**では、①カップリング剤の定量に使われる

GC-FIDと、タイヤ老化防止剤の定量に使われるLC-UVでは、主たる不確かさ因子が試料調製の不確かさであること、②ポリマータイプ分析に使われるPy-GC-FIDではPy機種間差や供試料量による差異が結果に影響を及ぼすことを明らかにした。また③LC-MSでは定性分析に影響を与える主たる因子を選定した。

磁石材料開発用では、結晶粒境界を判定して結晶粒の面積や形状を測定するときに判定精度に影響を与える因子について検討し、SEM測定等に関する因子を抽出してFBDの基本骨格を完成した。



粒界構造の画像測定に影響するFBD図 (SEM, SEM-EDX/XRF測定)

3. 研究開発成果 (1)最終目標7-①と研究成果、成果の達成度(意義)

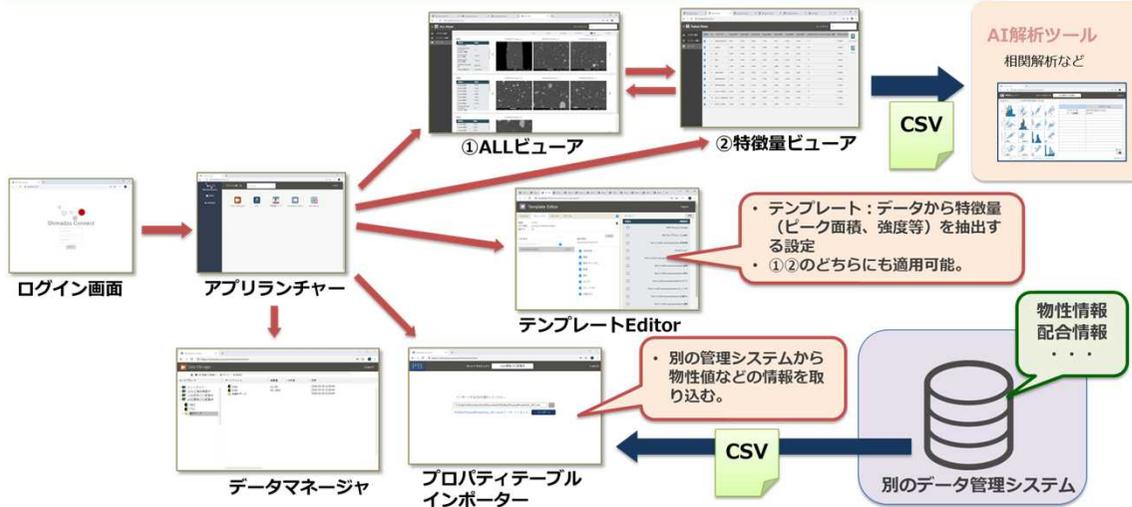
【最終目標7-①】(研究課題3-2関連)

①AI活用に必要な解析用ソフトウェア環境(アプリケーションフィールド)を構築するため、A)タイヤ材料の研究開発に活用される複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析の相関解析用)とB)磁石材料の研究開発に活用される粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析)用の統合ビューアを試作し、統合ビューア技術を開発する。

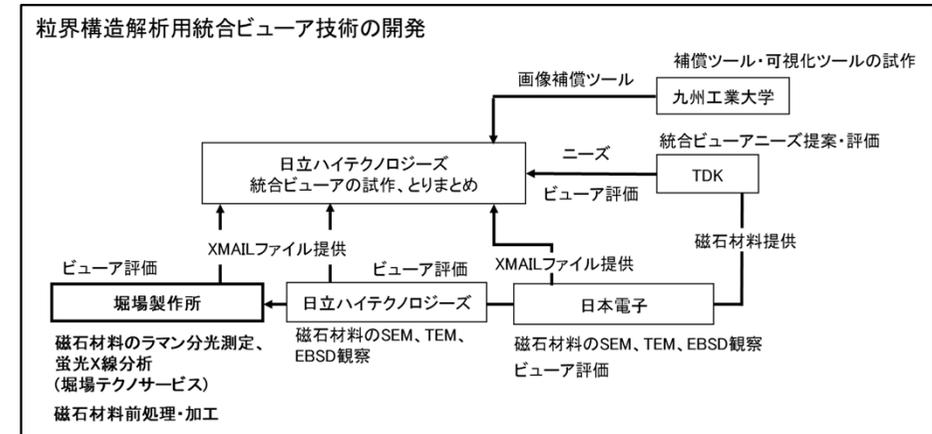
【研究成果7-①】 成果の達成度 ◎

A)クロマトグラフ、クロマトグラフ質量分析計、NMR、電子顕微鏡の各装置を構成要素とする複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)の統合ビューアを完成させた。一般的なWebブラウザ上で動作可能なWebアプリケーションとして複数地点のユーザからの解析が可能となった。

B) SEM、EBSD、ラマン分光顕微鏡の核装置を構成要素とする粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)統合ビューアを完成させた。データをCPS環境(共通サーバー)から引き出し結果を戻す構造を構築し、CPSの安全性を確保しつつユーザがストレスなく解析が可能になる環境を提供する仕組みを開発した。



複合階層構造解析用統合ビューアの構成



粒界構造解析用統合ビューアの構成

3. 研究開発成果 (1)最終目標7-②と研究成果、成果の達成度(意義)

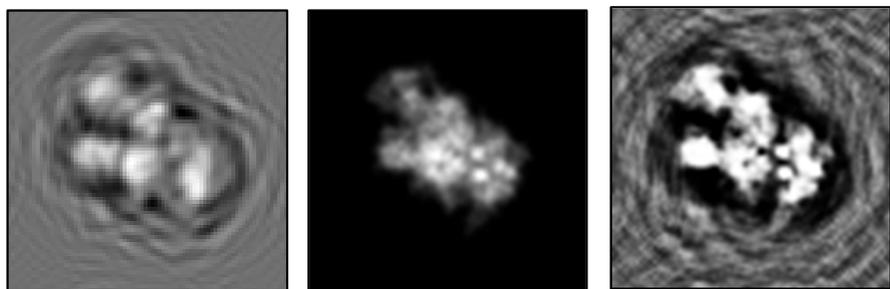
【最終目標7-②】(研究課題3-2関連)

②統合ビューアで活用される画像データを補償する補償ツールを試作し、計測・分析方法や試料作成等のフローを可視化し修正するための可視化ツールを試作する。

【研究成果7-②】 成果の達成度 ○

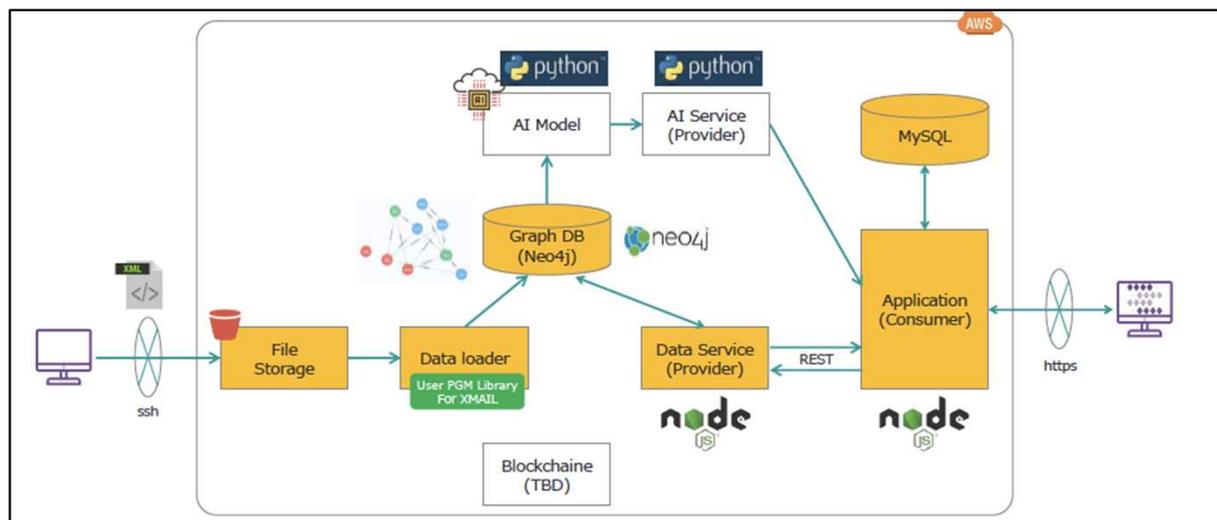
透過型電子顕微鏡画像のみに絞って、ある条件、ある電子顕微鏡で撮影した画像のデータ補償を行い、異なる条件、異なる電子顕微鏡で撮影された画像と比較できるようにするためのデータ補償ツールを開発し公開した。

複数のXMAIL内に記述された計測・分析のフローをペトリネットと呼ばれる離散分散システムを数学的に表現するための記法であるPNML形式と対応する形で記述することで可視化し、接続がおかしい部分を明確にすることで修正できるツールをXMAIL-Viewer(仮名)として試作した。



電子顕微鏡補償ツールの実際

左: 電子顕微鏡画像、中央: 真値の画像、右: 補償画像



MAIL-Viewerの概要。データローダとデータプロバイダを設計

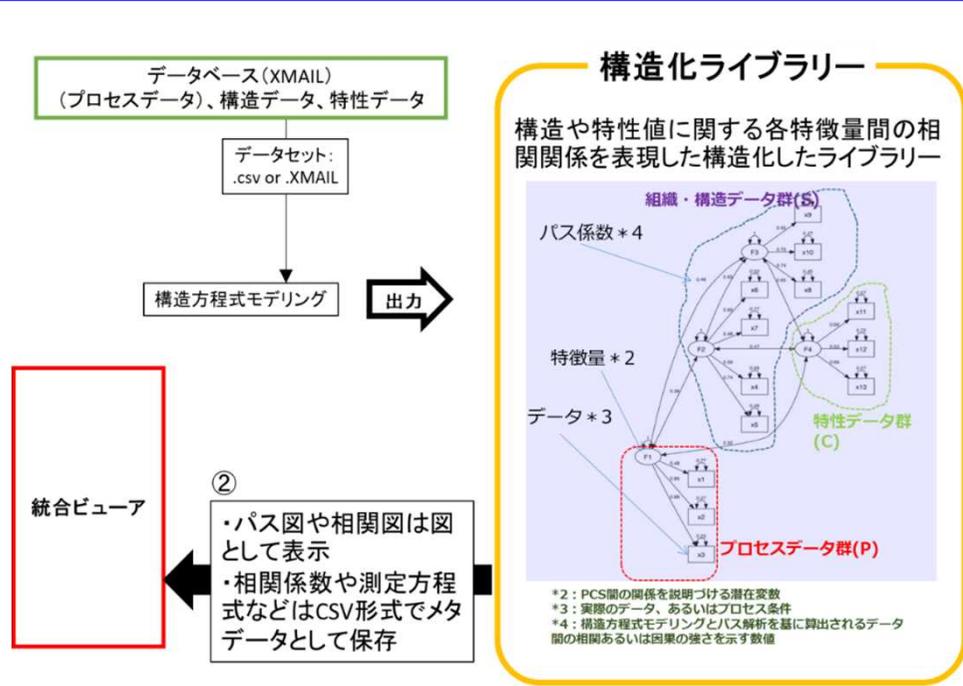
3. 研究開発成果 (1)最終目標8-①と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標8-①】(研究課題3-3関連)

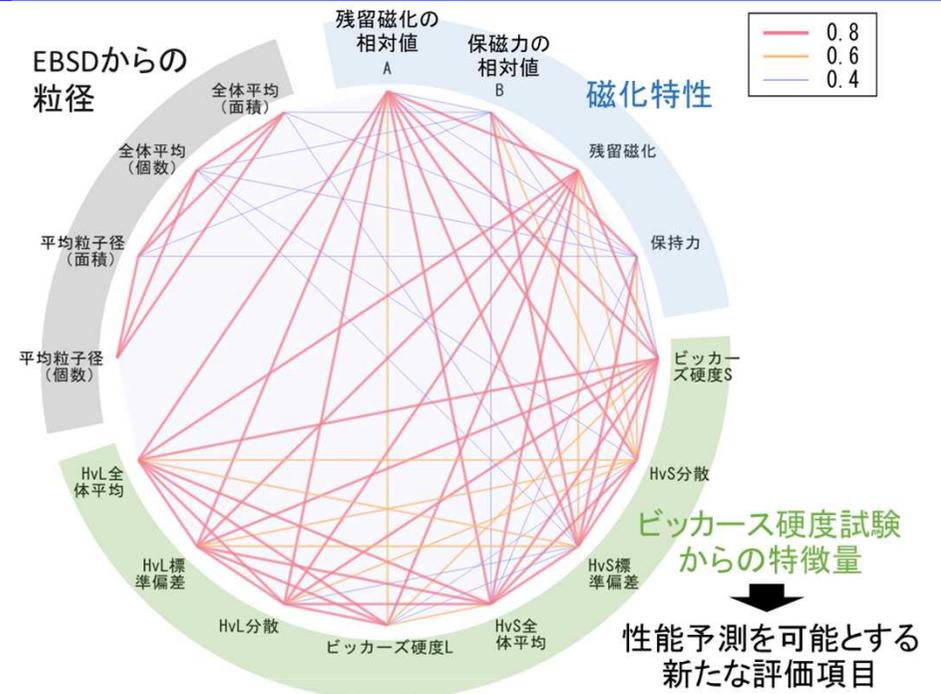
①磁石材料およびタイヤ材料を対象として、材料の組成や界面構造、欠陥等の因子に関する情報を多数の計測分析装置を使って収集した結果をもとに、構造化ライブラリを試作開発する。合わせて物性との相関を誤差要因も考慮して解析し、製品の性能の予測が可能となる評価項目の候補を決定する。

【研究成果8-①】 成果の達成度 ○

ゴム材料の分子量分布推定の精度について、ベイズ推定を用いた精度と不確かさを定量化する手法についても検討し、マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法を用いて分子量分布の不確かさを定量的に評価可能な手法を開発した。磁石材料に関して、多変量相関図を作成して特徴量間の関係性の強いものを選出し、それを基に構造方程式モデリングを用いて相関解析を行い構造化ライブラリとした。また、製品性能を予測する評価項目を新たに示唆することができた



構造化ライブラリおよび統合ビューアとの連携に関する模式図



磁石材料における多変量相関図

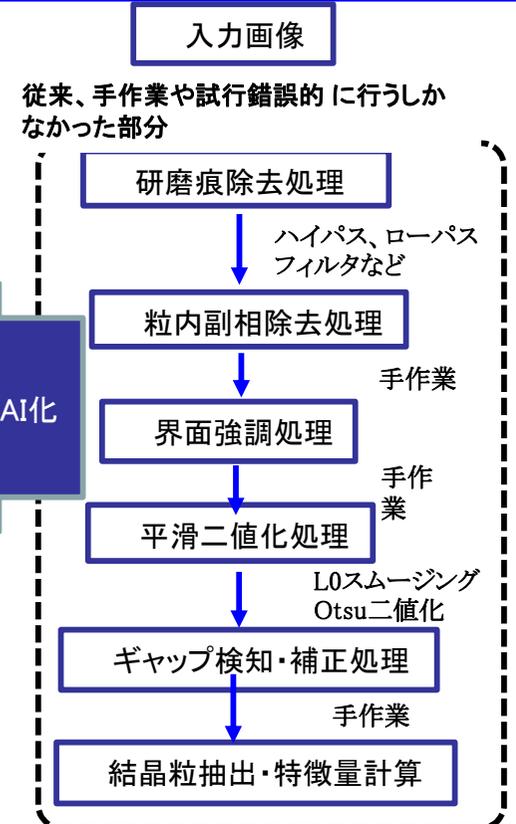
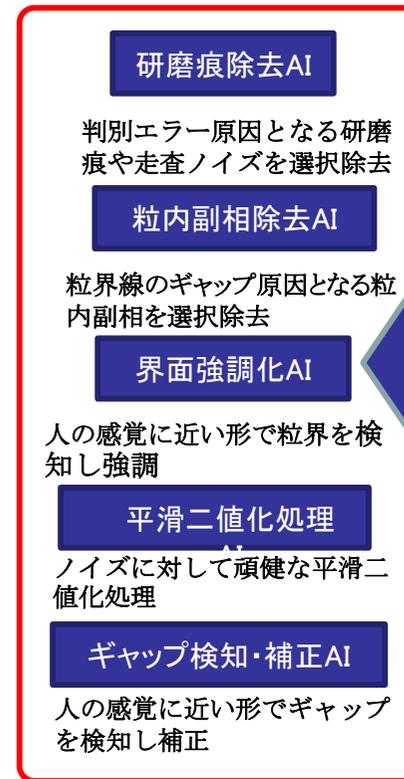
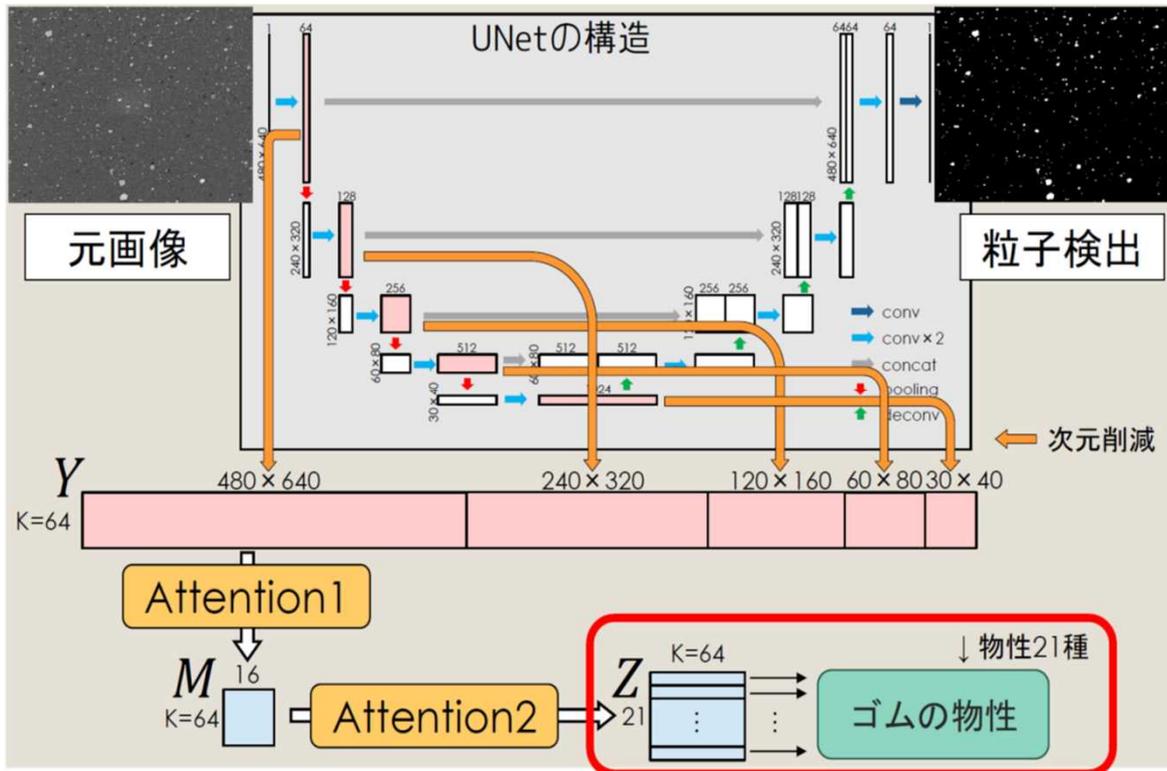
3. 研究開発成果 (1)最終目標8-②と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標8-②】(研究課題3-3関連)

②タイヤ材料、磁石材料を対象にフィラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出とこれに基づく解析アルゴリズムを試作開発する。

【研究成果8-②】 成果の達成度 ○

タイヤ材料解析に向けて、フィラー凝集状態に関わる特徴量を抽出し、それに基づき相関解析するソフトウェアパッケージを試作開発した。磁石材料開発に向けて、実際の結晶粒界画像から特徴量を自動抽出できるソフトウェアパッケージ、開発した関数パッケージとともにMatlab機能を利用する新たな変換・表示用ソフトウェアパッケージを試作開発した。



【タイヤ材料】凝集状態学習モデルに基づく物性との相関解析

【磁石材料】必要なイメージフィルタ処理と対応AI

3. 研究開発成果 (1)最終目標8-③と研究成果、成果の達成度(意義)

【最終目標8-③】(研究課題3-3)

③タイヤ材料、磁石材料のビッグデータ・AI活用に向け、モデル計測データやモデル解析データの授受を通して複合計測分析システムモデルの評価を行う。

A)タイヤ材料開発の効率化に向けて共通フォーマットに変換されたデータ群の蓄積を進め、統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。

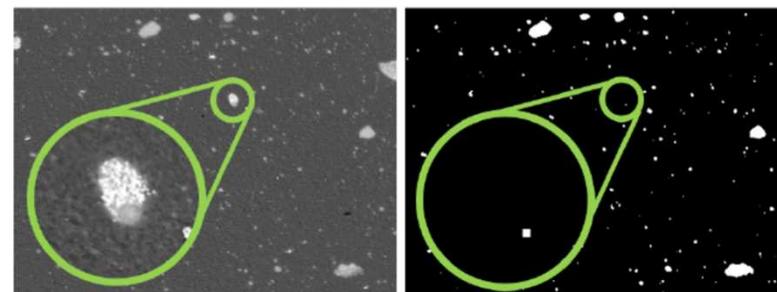
B)磁石材料開発の効率化に向けて、多種の計測分析装置で収集された複合・補間データと粒界構造解析用統合ビューア等を活用して、モデル部素材の構造と物性の相関を迅速に解明できるか検証する。

【研究成果8-③】成果の達成度 ◎

A)島津製作所を責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、モデル計測データやモデル解析データの授受が可能な複合計測分析システムモデル(複合積層構造解析用統合ビューアを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたにもかかわらず、住友ゴムによる実証評価を行い、モデルシステムを用いることで、これまで経験的にしか知られていなかった相関関係を明確化することが可能になり、新たなタイヤ材料開発の指針を得ることが可能になった。

B)日立ハイテクを責任機関とする計測機器メーカー4社の協力により、複合計測分析システムモデル(粒界構造解析用統合ビューアを用いた相関解析用ソフトウェア環境)を構築した。プロジェクト期間が2年に短縮されたため、扱える画像解析可能な計測分析装置の種類(機種)を限定する形になったが、Nd系磁石5種類のモデル試料を用いて収集された多量の複合・補間データを活用して、構造と物性の相関を迅速に解明できることを明らかにした。

AI技術を活用した顕微鏡画像解析
(粒子の自動抽出、特徴量探索)



元画像

提案手法

<従来>

領域抽出には手作業で30分程度要していた

<AI活用>

領域抽出に要する時間が数秒へ短縮

得られる特徴量も大幅に向上

→構造と物性の相関が明確に

3. 研究開発成果 (2) 成果の普及: 成果発表

2年間（一部の課題では1年間）という短い研究開発期間の中で、国立研究開発法人と大学等のアカデミア関係メンバーからの学会等での発表を中心に6件の実績。2件（発表1, 2）は国際シンポジウム・セミナーの場での英語による発表で、我が国発のプロジェクト成果を世界に紹介する良い機会になっている。

	発表年月日	発表媒体(場所)	題名	発表者	所属	
1	2019年 9月16日 ～17日	Frontiers In Cellular, Viral and Molecular Microscopy - with Cryo-specimen Preparation Techniques –	Evaluation of correlation and alignment accuracy toward the same sample observation by CLEM	五味淵由貴 ¹⁾ 江副里紗 ¹⁾ 高橋寛子 ¹⁾ 安永卓生 ¹⁾	1) 九州工業大学・情報工学研究院	サブ課題2-1
2	2019年 11月4日	8 th International Symposium on Practical Surface Analysis (PSA-19) (札幌) プレナリー招待講演	Toward Construction of Measurement/Characterization Platform for Open Innovation	一村信吾 ¹⁾	1) 早稲田大学	課題全般
3	2020年 3月14日	第67回応用物理学会 春季学術講演会 (ウェブ)	光学顕微鏡等を用いた、基板上ナノ粒子分散状態の広域評価	重藤知夫 ¹⁾ 加藤晴久 ¹⁾ 時崎高志 ¹⁾	1) 産業技術総合研究所	サブ課題2-3
4	2020年 3月15日	第67回応用物理学会 春季学術講演会 (ウェブ)	ナノ粒子のサイズ分布計測のための電子顕微鏡用調製試料の品質	黒河 明 ¹⁾ 熊谷和博 ¹⁾	1) 産業技術総合研究所	サブ課題2-3
5	2020年 3月15日 ～17日	化学工学会第85年会 (関西大学)	ゲル浸透クロマトグラフィによる分子量分布推定の不確実性定量化	脇田耕輔 ¹⁾ 矢嶋智之 ¹⁾ 川尻喜章 ¹⁾	1) 名古屋大学	サブ課題3-3
6	2020年 3月18日 ～20日	日本セラミックス協会 2020年会 (明治大学)	構造方程式モデリングを用いた磁石材料の構造・特性データの相関解析	山下誠司 ¹⁾ 乗松 航 ¹⁾ 北 英紀 ¹⁾ 柳内克昭 ²⁾	1) 名古屋大学 2) TDK株式会社	サブ課題3-3

3. 研究開発成果 (2) 成果の普及: シンポジウムの開催

本プロジェクトの成果を広く普及する活動として、下記3件のシンポジウムで講演。このうち①と③は、日本学術会議、日本学術振興会、日本分析機器工業会、日本分析化学会が共同主催するシンポジウムで、本プロジェクトに係わる研究構想を中心に紹介した。多数の参加者を集め、産業界を中心とした参加者に活動内容を紹介・普及した。

①2018年9月6日

JASIS2018におけるシンポジウムでの講演
主題: イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築-これまでの取り組みと今後の展望

②2019年1月30日~2月1日

第18回国際ナノテクノロジー総合展・技術会議
[nano tech 2019]におけるパネル展示とショートプレゼンテーション。

③2019年9月4日

JASIS2019におけるシンポジウムでの講演
主題: イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築-どんな基盤をつくり何をを目指すか-



イノベーション創出に向けた計測分析プラットフォームの構築 -これまでの取り組みと今後の展望-

日時: 2018年9月6日 14:00~17:00 場所: 幕張メッセコンファレンス会場 301A会議室

主催: 日本学術会議・化学委員会・分析化学分科会、日本学術振興会 計測分析プラットフォーム第193委員会、
日本分析化学会、日本分析機器工業会
後援: 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)、産総研COMS-NANO

プログラム

14:00~14:05 開会挨拶 (及び前半司会)

佐藤 緑 (産業技術総合研究所)

14:05~14:25

「計測分析プラットフォームの構築: 学振第193委員会の設立経緯と今後の展望」

一村 信吾 (早稲田大学)

14:25~14:45

「最先端分析・計測機器開発センターおよび共同利用プラットフォーム構想」について

竹内 孝江 (奈良女子大学)

14:45~15:05

「ナノテク分野・先端計測のためのAI技術の適用と展望」

鷺尾 隆 (大阪大学)

休憩 15:05~15:20

【「ビッグデータ対応型の革新的検査評価技術の研究開発 (NEDO先導プログラム)」の活動報告】

司会 保田芳輝 (堀場製作所)

15:20-15:30

ビッグデータ対応型の革新的検査評価技術の研究開発概要について

中川 利久 (島津製作所)

15:30-15:50

CPS複合計測分析のプラットフォーム構築に向けて 1 -データフォーマットの共通化とコンバータの試作-

安永 卓生 (九州工業大学)

15:50-16:10

CPS複合計測分析のプラットフォーム構築に向けて 2 -試料ホルダー共通化と精密位置合わせ技術の試行-

大橋 秀実、杉沢 寿志 (日本電子)

16:10-16:30

ナノ材料用の統合的検査評価技術にむけて 1-統合的データ表示技術 (統合ビューアー) の開発-

山本 聡 (島津製作所)

16:30-16:50

ナノ材料用の統合的検査評価技術にむけて 2-計量計測適性、信頼性評価に基づくビッグデータ解析基盤技術の開発-

藤本 俊幸 (産業技術総合研究所)

16:50~17:00

総括質疑と閉会挨拶

多持隆一郎 (日立ハイテクノロジーズ)

3. 研究開発成果 (3) 知的財産権の確保に向けた取り組み

課題1と課題2はそれぞれ計測分析装置メーカー機関、計測分析装置ユーザー機関で共通利用可能な基盤的技術の開発を目指すものであるため、知的財産の出願の上で公知化し広く普及を図るよりも、後述のように標準化による普及を目指す方針を採用。この結果、知的財産の獲得対象は「課題3：AI活用したビッグデータ解析のモデル実証による評価技術の開発」の成果に限られることになった。

課題3に係わる知的財産の出願実績は、下表の通りである。いずれも、各種計測分析装置のデータを課題1で開発した共通データフォーマット構造に変換（コンバート）して複合的・統合的な解析を行う際の、データ管理や表示、AI活用における利便性向上のための方法に係わる知的財産である。現時点で共通データフォーマットに変換できる計測分析装置が国内メーカーの装置に限定的であることから、知財出願先は国内のみにしている。

知的財産(特許)の出願実績

	出願年月日	出願番号	発明の名称等	出願人
1	2020年 4月30日	特願 2020- 080177	複合分析データ管理システム、複合分析データ管理方法 および 複合分析 データ管理プログラム	株式会社島津製作所
2	2020年 4月30日	特願 2020- 080347	解析用ビューア、表示システム、表示方法および表示プログラム	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社
3	2020年 5月21日	特願 2020- 088916	分析データ管理システムにおける教師用データ生成方法	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社
4	2020年 5月22日	特願 2020- 089675	複合計測統合ビューアおよびプログラム	株式会社島津製作所 住友ゴム工業株式会社

IV. 成果の実用化に向けた取組及び見通し

(1) 成果の実用化に向けた戦略

(2) 成果の実用化に向けた具体的取組

(3) 成果の実用化の見通し

◆本プロジェクトにおける「実用化」の考え方

本プロジェクトは複合計測分析システムの研究開発であり、本事業における実用化とは、当該研究開発に係る成果が、素材・部材を中心にした幅広い産業分野の計測分析装置に適用されることと定義する。

4. 成果の実用化 (1) 成果の実用化に向けた戦略 その1

- ・計測分析技術は素材・部材を中心とする我が国のものづくり産業の基盤を構築。しかし、ものづくり産業は近年の中国をはじめとする各国のマテリアル関連分野への研究開発投資の影響もあり、国際的シェアを大きく落とす懸念が顕在化。この状況を打破するためマテリアルDX推進を目指し、省庁連携により「マテリアル革新戦略」をとりまとめた段階。
- ・本プロジェクトの成果の実用化戦略として、マテリアルDXにおける計測分析装置の位置づけを明確にすることが不可欠。即ち、マテリアルDXを支える上で各種計測分析装置の測定データが共通データフォーマット化されることの重要性を指摘。
- ・この戦略方針のもと、戦略準備会合に意見を表出。その結果、共通データフォーマットの標準化の重要性が、戦略準備会合とりまとめ資料において明確に位置づけられたところ。マテリアル研究開発への貢献が期待できる。

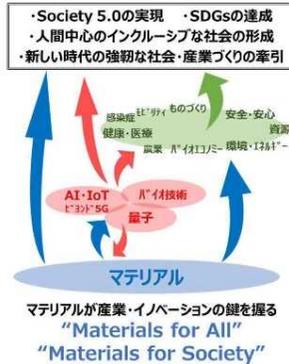
マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けて（戦略準備会合取りまとめ）【概要】

検討の経緯

- ◆ 令和2年2月、文部科学省及び経済産業省は、マテリアル革新力の強化に向けた有識者会議を設置するなど、検討を開始。
- ◆ 同年4月、「マテリアル革新力強化のための戦略策定に向けた準備会合」（座長：大野英男・東北大学総長）を設置し、検討を加速。新型コロナウイルス感染症の発生・拡大を踏まえた追加検討等を経て、同年6月、「マテリアル革新力強化のための政府戦略に向けて（戦略準備会合取りまとめ）」を策定・公表。
- ◆ 本取りまとめは、統合イノベーション戦略2020及び第6期科学技術基本計画を視野に入れ、マテリアル革新力強化のための政府全体の戦略策定に向けた基本的な考え方、今後の取組の方向性等を示したものである。

1. 戦略策定の必要性～今なぜマテリアル（物質・材料・デバイス）なのか

- Society 5.0の実現にデジタル・イノベーションを支えるマテリアル・イノベーションが不可欠。
- AI、バイオ、量子等の先端技術の強化から、SDGsやパリ協定の長期目標の達成、資源・環境制約の克服、安全・安心社会の実現等の社会課題解決に至るまで、マテリアルの革新が決定的に重要。新型コロナウイルス対策にもマテリアルの研究開発が貢献。
- 米中貿易摩擦や新型コロナウイルス感染症の世界的流行を踏まえ、経済安全保障上の観点から、サプライチェーン強靱化のためのマテリアルの革新が求められている。
- デジタルを駆使したデータ駆動型の研究開発が世界的に進展。我が国の産学官の良質なマテリアルデータを戦略的に収集・活用できれば、マテリアルから世界の産業・イノベーションをリード可能。
- 新型コロナウイルスの影響により人々の価値観・行動様式に変化が見られる中、産学官の研究開発・製造現場のデジタルトランスフォーメーションを一気に加速する機会でもある。
- 我が国にはマテリアル・イノベーションを生み出してきた多くの実績があり、大きな強みを有している。その重要性が拡大している現状はチャンスである一方、強みが失われつつある危機。



我が国の強みに立脚した、「マテリアル革新力」（マテリアル・イノベーションを創出する力）を強化するための政府戦略を、産学官共通のビジョンの下で早急に策定する必要

4. 今後の取組の方向性

(1) データを基軸としたマテリアル研究開発のプラットフォーム整備

- マテリアル研究開発の効率化・高速化・高度化にはデータ駆動型研究開発に使う高品質なマテリアルデータが決定的に重要。
- 我が国最大のマテリアルの強みは、世界最高水準の共用施設・設備、産学官の優れた人材、成熟した産学官連携関係の存在。
- マテリアルの研究開発現場や製造現場全体のデジタル化、リモート化、スマート化、オンデマンド化が急がれる状況。

我が国の強みを基盤に、産学官のマテリアルデータが持続的・効果的に創出、共有化、蓄積、流通、利活用される「マテリアルDXプラットフォーム」を日本全体で速やかに整備。研究開発成果の創出における圧倒的な生産性向上を実現するとともに、データ有効活用のジャパンモデルを確立。

産学官のマテリアルデータの取扱いに関する共通指針策定

- ・ 共通的なデータ構造（データフォーマット含む）の開発、データ流通に関する輸出管理、データに関する権利等のルール整備を検討
- ・ 特許等公開情報についてAI学習用のデータベース化を推進

データ創出・活用可能な共用施設・設備の整備・高度化

- ・ 先端共用施設・設備群を活用し、高品質なデータとデータ構造を創出する共用基盤を整備・高度化するとともに、データ専門人材、技術者を育成・確保
- ・ 次世代研究機器を開発・高度化・導入

データ創出・活用型研究開発プロジェクトの推進

- ・ 我が国が強みを持つ重要技術・実装領域を対象に、データ創出・活用と理論・計算・実験が融合する研究開発プロジェクトを実施
- ・ 高品質データを生み出すスマートラボリ化を促進

マテリアルデータの中核拠点・ネットワーク形成

- ・ オープンデータ、シェアードデータを対象に、セキュアな環境の下、データとデータ構造を蓄積・管理する中核拠点を整備
- ・ 中核拠点と、特色ある強みを持つ技術領域で先行取組を進めるデータ拠点を連携・協調

計測・分析機器の共通データフォーマットの開発・標準化

- ・ 高品質なデータ創出の促進に向けて、計測・分析データの共通データフォーマットの開発・標準化を加速
- ・ プラットフォーム上での一元的、統合的な解析を可能に

- これらの取組を包括的に推進し、産学官のマテリアル研究開発・マテリアルユーザーが利活用できるプラットフォームを整備。研究開発活動の停滞リスクにも対応。
- 研究開発期間の短縮化・低コスト化、若手への魅力ある研究開発環境の提供、産学官の連携・融合の加速等を実現。

【概要版】マテリアル革新力強化のための線府戦略に向けて（戦略準備会合とりまとめ）

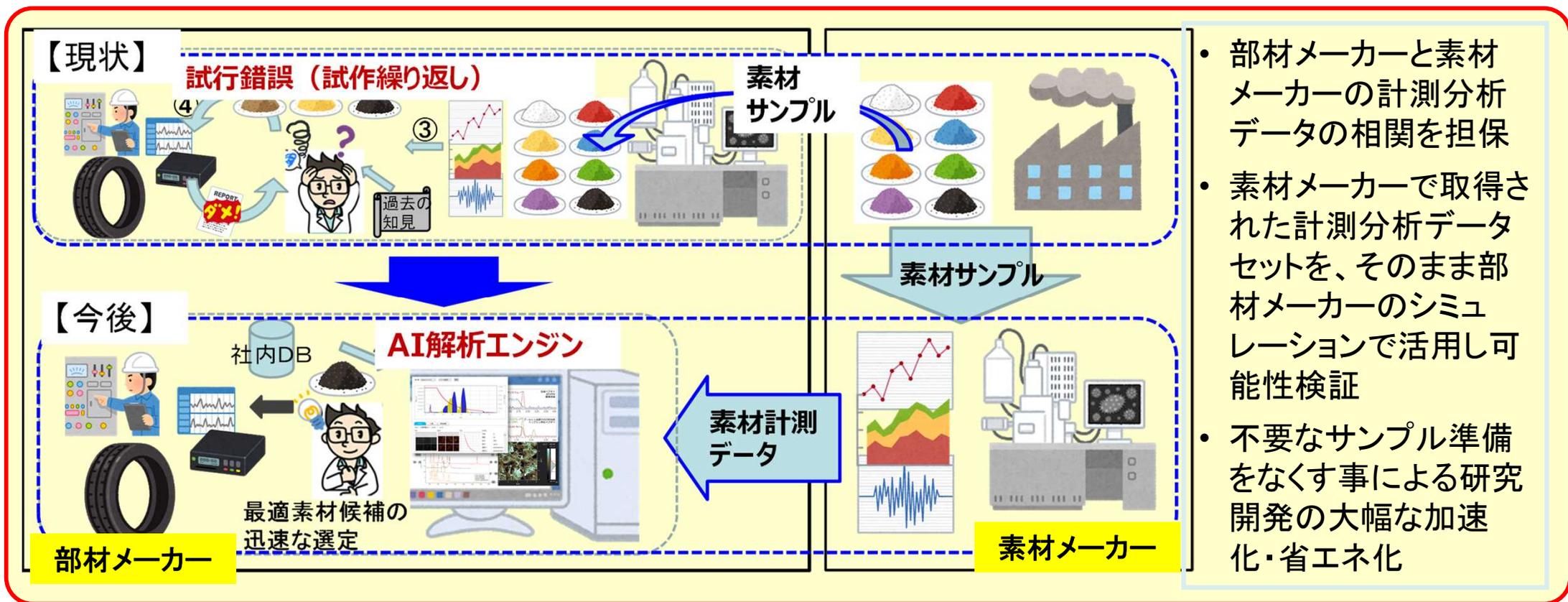
https://www.mext.go.jp/content/20200602-mxt_nanozai-000007507_2_2.pdf から引用

4. 成果の実用化 (1) 成果の実用化に向けた戦略 その2

・戦略準備会合への意見提出では、今後の展開課題として①サプライチェーンにまたがるデータの品質評価・品質保証の枠組み作り、②組織の枠を超えたCPS型複合計測分析の構築による、計測分析データのトレーサビリティ、信頼性、再現性の確保、を提案。

・いずれも、本プロジェクトの成果である共通データフォーマット技術、精密位置合わせ技術や、サプライチェーン間での情報共有ポリシーに沿った計測分析データの秘密保持技術（鍵構造の設定）の普及・展開が不可欠

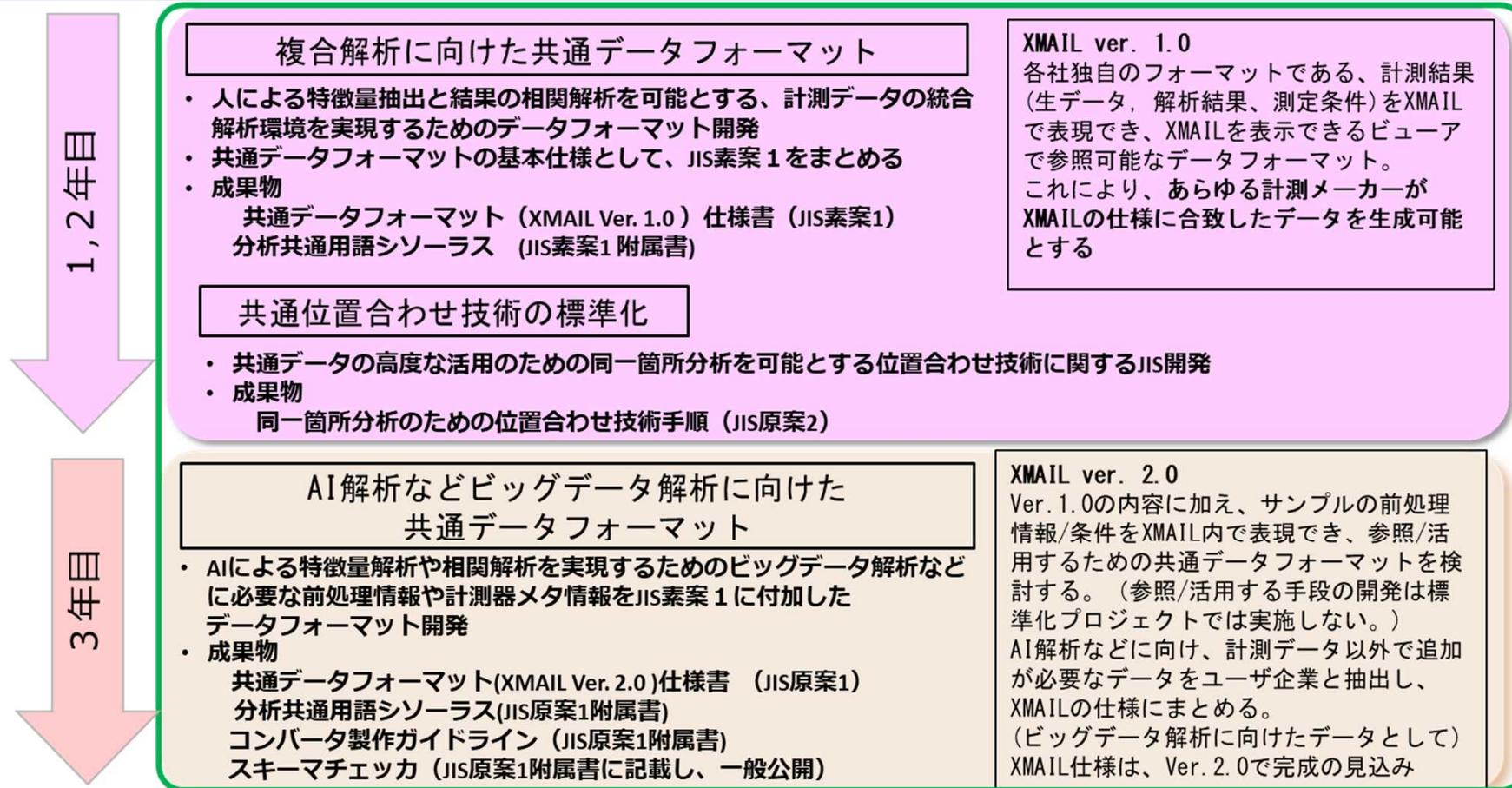
・マテリアル革新戦略に基づく産学官の連携プロジェクトの推進で、本事業の成果が発展的に継承され、研究開発の加速化が推進されることを期待



マテリアル革新戦略準備会合への提案構想 (https://www.mext.go.jp/content/20200424-mxt_nanozai-00006785_2-2.pdf)

4. 成果の実用化 (2) 成果の実用化に向けた具体的取り組み その1

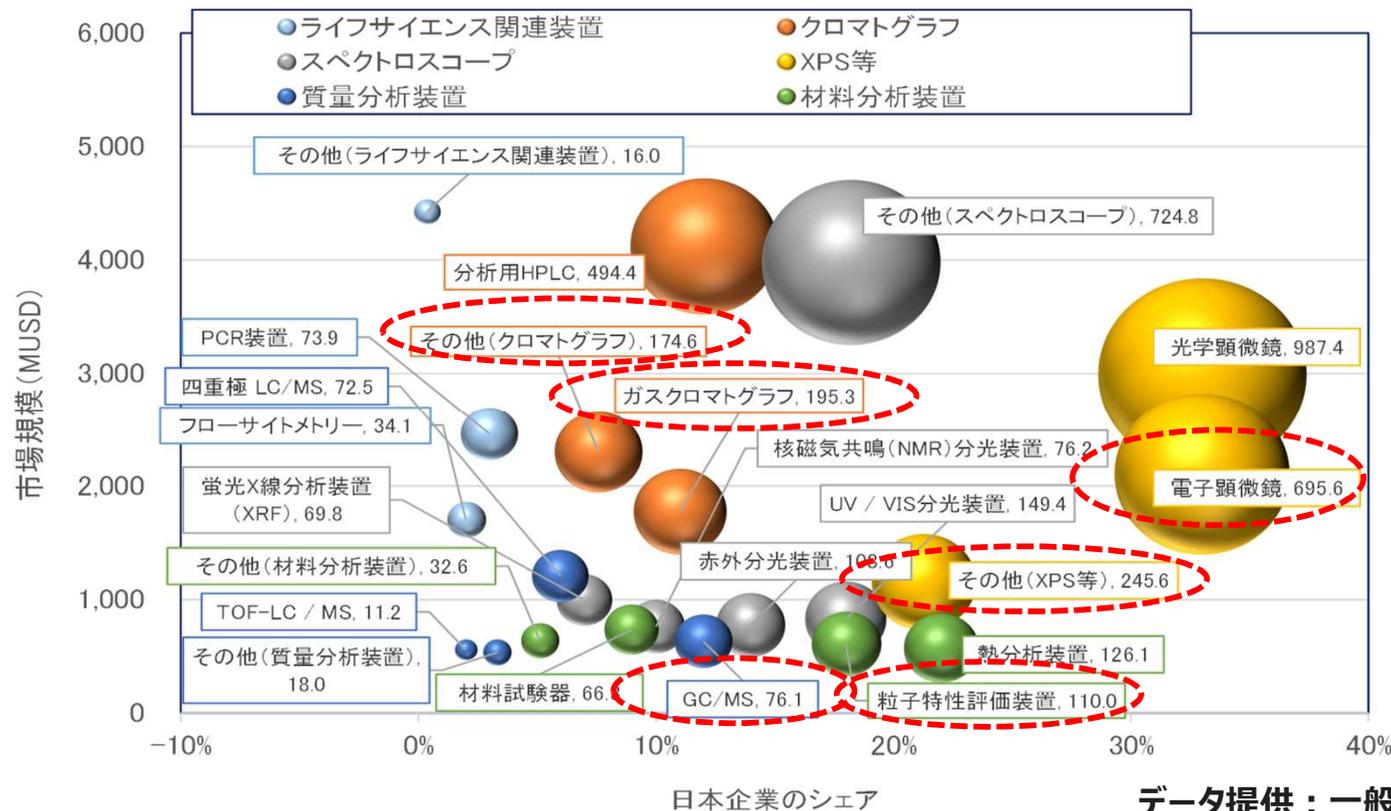
- ・本事業成果の実用化に向けて、標準化の積極的な推進を計画。このため、戦略的国際標準化加速事業のテーマとして「計測分析装置の計測分析データ共通フォーマットおよび共通位置合わせ技術に関するJIS開発」を提案し受託中。受託期間は2020年度からの3年間。
- ・受託機関は、計測装置メーカー4機関、計測装置ユーザ機関4機関と日本分析機器工業会（代表機関）。事業推進に際しては、事業実施者に加えて計測分析機器ユーザ、メーカ、アカデミアのより幅広いマテリアル関連分野の関係者を招聘した委員会からなる実施体制を構築。本事業成果の幅広い広報・普及を図る計画。



本プロジェクトを継承する標準化プロジェクトの目標と年次展開

4. 成果の実用化 (2) 成果の実用化に向けた具体的取り組み その2

- ・計測分析機器のユーザーである素材・部材産業界は、国内メーカーの計測分析装置だけではなく、海外メーカーの装置も幅広く活用。このため、共通データフォーマット等の標準化において、国際標準化も重要である。
- ・国際標準化（ISO化）に向けて、次の方針で展開する計画
 - ✓ 構造解析から物性解析まで、ミクロからマクロまで、幅広い領域をカバーする計測分析装置群を主対象に、JIS規格の普及・浸透を推進
 - ✓ 国際市場で日本が高いシェアを持つ計測分析装置群への展開をトリガーとして、JIS標準に準拠する海外メーカー製の計測分析装置ニーズを喚起し、国際標準化の原動力に。
 - ✓ VAMAS（新材料及び標準に関するベルサイユプロジェクト）の枠組みを活用して欧米等の研究機関と共同研究等を実施し国際コンセンサスの形成を図りつつ、国際標準化を目指す。



NEDOプロジェクトで対象とした計測分析機器

4. 成果の実用化 (3) 成果の実用化の見通し

本事業ではユーザ企業2機関（タイヤ関連、デバイス関連）が参画し統合的なデータ解析等の検証を行ったが、本事業の開発成果は自動車、情報通信機械、医薬品、電気機械、業務用機械、化学、電子部品・デバイス・電子回路などの分野における研究開発で使用される。したがって、本事業の成果をより多くの分野に浸透させることが実用化へ向けた取組として非常に重要。マテリアル革新戦略などの次段階構想のもと、いくつかの業界団体の参画を含めた体制で関連研究を実施することは、国内へ本事業の成果を浸透させるための適切な展開。これらの展開を通して、プロジェクト提案時に記載した次の項目の実現を目指す。

CPS型複合計測分析に関わる電子顕微鏡装置の世界市場規模は、2015年に約1,200億円、2030年には、2,717億円の約1,500億円の増加が見込まれている（注）。そのうち日本メーカーの市場占有率は2015年で35%（約420億円）。CPS型複合計測分析の実現および、その他の企業努力により、2030年には市場占有率約50%（1,359億円）、売上増額約940億円と想定。

素材・部品の研究開発に係わる計測分析装置群（分子分光装置、原子分光装置、質量分析装置などを含めた）全体で考えると、その世界市場規模は2015年に約1.8兆円（電子顕微鏡装置の約15倍。）2030年の計測分析装置群の日本メーカーの売上増は、電子顕微鏡装置の売上増額約940億円の15倍とすると、約1.4兆円と想定される。この売上増分の1割がCPS型複合計測分析の寄与とすると約1,400億円の国内生産の増加が期待できる。

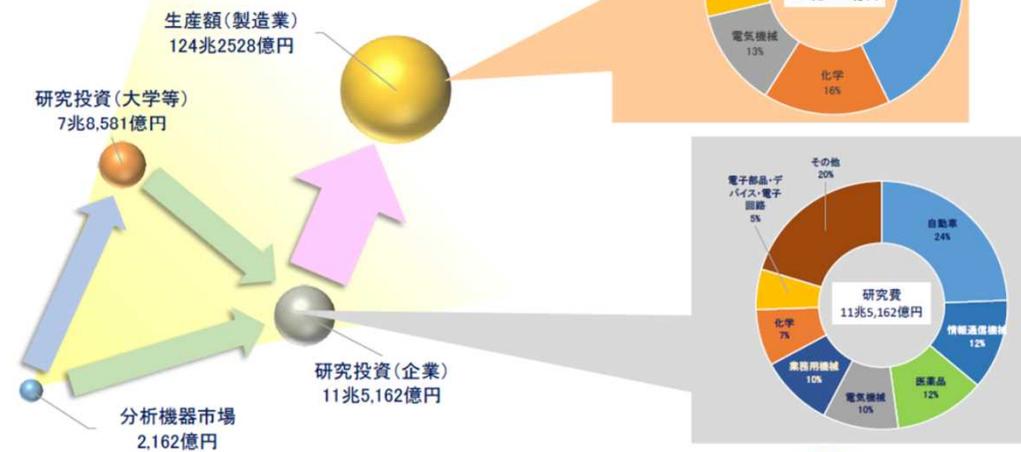
注) SDI Global Assessment Report

1. 分析機器技術に期待される役割

分析機器技術の役割・必要性

3. 生産性の高い研究開発を支える基盤

- 分析機器への研究投資は、その数十倍の研究開発、数百倍の製造業市場に波及
→非常に高いレバレッジで投資対効果が期待



(出所) 科学機器年鑑2017年版(株式会社アールアンドディ)、平成29年科学技術研究調査(総務省)、平成26年工業統計(経済産業省)のデータをもとに、JAIMA作成

JAIMA

計測分析装置の使用が想定される業界分野

(平成30年1月26日 文部科学省「第4回ナノテクノロジー・材料分野の研究開発戦略検討作業部会」資料)

ご清聴有難うございました