

「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」

事業原簿【公開】

|     |  |
|-----|--|
| 担当部 | 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機<br>材料・ナノテクノロジー部 |
|-----|--|

# 目次

## 概要

|  |     |
|--|-----|
| 用語集  | i   |
| 第1章 事業の位置付け・必要性について                                | 1   |
| 1. 事業の背景・目的・位置付け                                   | 1   |
| 1. 1 事業の背景   | 1   |
| 1. 2 事業の目的及び意義                                     | 1   |
| 1. 3 事業の位置付け                                       | 1   |
| 2. NEDOの関与の必要性・制度への適合性                             | 2   |
| 2. 1 NEDOが関与することの意義                                | 2   |
| 2. 2 実施の効果（費用対効果）                                  | 2   |
| 第2章 研究開発マネジメントについて                                 | 3   |
| 1. 事業の目標   | 3   |
| 2. 事業の計画内容   | 6   |
| 2. 1 研究開発の内容及び全体スケジュールと予算                          | 6   |
| 2. 1. 1 研究開発の内容                                    | 6   |
| 2. 1. 2 研究開発のスケジュール                                | 18  |
| 2. 1. 3 研究開発予算                                     | 19  |
| 2. 2 研究開発の実施体制                                     | 20  |
| 2. 3 研究開発の運営管理                                     | 20  |
| 2. 4 研究開発の実用化に向けたマネジメントの妥当性                        | 21  |
| 3. 情勢変化への対応  | 23  |
| 4. 評価に関する事項  | 26  |
| 第3章 研究開発成果について                                     | 27  |
| 1. 事業全体の成果   | 27  |
| 1. 1 研究開発成果と目標の達成度および成果の意義                         | 27  |
| 1. 2 成果の普及と知的財産権等の確保に向けた取り組み                       | 34  |
| 2. 研究開発項目毎の成果                                      | 37  |
| 2. 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(研究課題1)...      | 37  |
| 2. 1. 1 CPS型複合計測分析用機種対応コンバータの開発(研究課題1-1).....      | 37  |
| 2. 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(研究課題1-2).....    | 40  |
| 2. 1. A 島津製作所.....                                 | 41  |
| 2. 1. B 日本電子.....                                  | 45  |
| 2. 1. C 日立ハイテク.....                                | 50  |
| 2. 1. D 堀場製作所.....                                 | 57  |
| 2. 1. E 住友ゴム工業.....                                | 65  |
| 2. 1. F TDK.....                                   | 65  |
| 2. 1. G 理化学研究所.....                                | 66  |
| 2. 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(研究課題2).....      | 85  |
| 2. 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(研究課題2-1).....  | 85  |
| 2. 2. 2 測定位置精密位置合わせ技術の開発(研究課題2-2).....             | 90  |
| 2. 2. A 島津製作所.....                                 | 102 |
| 2. 2. B 日本電子.....                                  | 115 |
| 2. 2. C 堀場製作所.....                                 | 124 |
| 2. 2. D 九州工業大学.....                                | 132 |
| 2. 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(研究課題2-3)..... | 142 |

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| 2. 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(研究課題3)...      | 158        |
| 2. 3. 1    | 測定データの信頼性向上技術の開発(研究課題 3-1) .....              | 158        |
| 2. 3. 2    | 相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発(研究課題 3-2).....          | 174        |
| 2. 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(研究課題 3-3)..... | 201        |
| <b>第4章</b> | <b>成果の実用化に向けた取組及び見通しについて .....</b>            | <b>246</b> |
| 4. 1       | マテリアル関連分野における現状と成果の実用化へ向けた戦略.....             | 246        |
| 4. 2       | 成果の実用化へ向けた次段階での具体的な取組について.....                | 248        |
| 4. 3       | 成果の実用化の見通し .....                              | 249        |

(添付資料)

1. 基本計画
2. 事前評価資料

概 要

|                        |   |          |            |
|------------------------|---|----------|------------|
|                        |   | 最終更新日    | 2020年9月11日 |
| プロジェクト名                | 省エネ製品開発の加速化に向けた<br>複合計測分析システム研究開発事業   | プロジェクト番号 | P18009     |
| 担当推進部/<br>PMまたは担当者     | 材料・ナノテクノロジー部 PM 氏名 長島 敏夫 (2019年9月1日～2020年11月現在)<br>材料・ナノテクノロジー部 PM 氏名 大滝 篤史 (2017年12月25日～2019年8月31日)  |          |            |
| 0. 事業の概要               | <p>本事業で開発するCPS型複合計測分析システムは有機部材、無機部材の製品開発に活用される。有機部材向けの複合計測分析システムは、複合階層構造解析の目的に活用され、マクロスケールからマイクロ（ナノ）スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。（液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、核磁気共鳴装置）。無機部材向けの複合計測分析システムは、粒界構造解析の目的に活用され、主としてマイクロ（ナノ）スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。（走査型電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、ラマン分光分析装置、原子間カプローブ顕微鏡、蛍光X線分析装置、電子線後方散乱回折装置）。この2種類をCPS型複合計測分析システムのモデルと位置づけ、次のステップで研究開発を進める。</p> <p>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（以下、課題1）<br/>CPS型複合計測分析システムを構成する個別計測分析装置の測定結果に、装置の動作状態、試料の処理など固有の情報を付与し、遡及性、信頼性、再現性を確保してデータの品質保証が可能な共通データフォーマットを開発・策定する。併せて、個々の計測分析装置によるデータを共通データフォーマットに変換するコンバータの開発を行う。更に、サイバー空間に集約されたデータの秘密性・安全性を確保できるデータ収集・管理技術の仕様を作成する。</p> <p>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（以下、課題2）<br/>CPS型複合計測分析において同一試料の同一部位を測定可能とするため、各種複数計測分析装置に共通的に利用できる試料ホルダーの開発と精密位置合わせ技術の開発を行う。同時に、共通試料ホルダーを活用した、複合計測分析遂行中の試料環境のセンシング技術の仕様を作成する。</p> <p>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（以下、課題3）<br/>CPS型複合計測分析システムの測定結果の信頼性を向上するため、計測手法毎に主たる不確かさ因子を検討する。次に信頼性の検討結果を踏まえて、マクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした複合階層構造解析用の統合ビューアと、マイクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした粒界構造解析用の統合ビューアの研究開発を試行する。合わせて、それぞれを、タイヤ材料、および、磁石材料の性能向上を目指す2つの開発事例に適用させ、AI等の技術の活用や統合ビューア用のデータ解析／管理用ソフトウェアツール群の整備を試行することで製品開発サイクルの効率化を表現する複合解析システムを試作開発し、またそれらをモデル事例として評価する。</p> |          |            |
| 1. 事業の位置<br>付け・必要性について | <p>計測分析機器は、ものづくり産業の発展の源泉であり、その国際競争力を高めることは我が国産業全体の国際競争力を維持・向上させる上で必要不可欠である。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。近年、ものづくりの現場では、部素材の組成やナノメートルスケールから製品レベルまでの構造が複雑化することで、構造と機能との相関解析が困難となる状況が増加しており、各種計</p>   |          |            |

測分析機器データの統合的な解析を容易に行う環境作りが必要となってきた。本事業は、ものづくりの現場において部素材の組成や構造が複雑化・微細化している状況を踏まえて、計測分析技術における喫緊の課題解決を目指す。すなわち、部素材のサブミクロン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サイバー空間に集約して統合的な解析を容易に行う環境作りと、ビッグデータや AI 等による高度な解析に向けた基盤技術の開発を行うことを目的とする。合わせて、ものづくり産業（計測分析機器ユーザー）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ため、CPS（Cyber Physical System）型複合計測分析システムを開発し、部素材研究開発の高度化・効率化などの課題解決に有効であることを検証することを目的とする。

2. 研究開発マネジメントについて

|   |  |  |        |  |  |  |
|---|--|--|--------|--|--|--|
| 事業の目標   | 研究開発項目「複合計測分析システムの開発」<br>【最終目標（2019年度）】<br>・電子顕微鏡観察や顕微分光分析、顕微質量分析等、複数の機器において同一試料の観察位置を3μm以下の精度で合わせこむ技術を開発する。<br>・各種計測分析機器データフォーマットの統一を図り、ビューア（各種観測データを表示できるソフトウェア）を開発する。 |  |        |  |  |  |
| 事業の計画内容   | 主な実施事項   | 2018fy   | 2019fy |  |  |  |
|   | 複合計測分析システムの開発  | →  |        |  |  |  |
| 事業費推移<br>（会計・勘定別にNEDOが負担した実績額（評価実施年度については予算額）を記載）<br>（単位:百万円）<br>（委託）・（助成）・（共同研究）のうち使用しない行は削除 | 会計・勘定  | 2018fy   | 2019fy |  |  |  |
|   | 一般会計   |  |        |  |  |  |
|   | 特別会計<br>（電源・需給の別）  | 281  | 102    |  |  |  |
|   | 開発成果促進財源   | 0  | 0      |  |  |  |
|   | 総 NEDO 負担額   | 281  | 102    |  |  |  |
|   | （委託）   | 281  | 102    |  |  |  |
|   | （助成）<br>：助成率△/□  |  |        |  |  |  |
|   | （共同研究）<br>：負担率△/□  |  |        |  |  |  |
| 開発体制  | 経産省担当原課  | 製造産業局産業機械課   |        |  |  |  |
|   | プロジェクトリーダー   | 【プロジェクトリーダー】<br>学校法人早稲田大学リサーチイノベーションセンター教授：一村 信吾   |        |  |  |  |
|   | プロジェクトマネージャー   | 材料・ナノテクノロジー部 氏名 長島 敏夫<br>（2019年9月1日～2020年11月現在）<br>材料・ナノテクノロジー部 P M 氏名 大滝 篤史<br>（2017年12月25日～2019年8月31日） |        |  |  |  |

|               |  |   |   |     |
|---------------|--|---|---|-----|
|               | <p>委託先<br/>(助成事業の場合「助成先」とするなど適宜変更)<br/>(組合が委託先に含まれる場合は、その参加企業数及び参加企業名も記載)</p>  | <p>委託先：(株)株式会社島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、国立大学法人九州工業大学、国立大学法人名古屋大学、国立研究開発法人産業技術総合研究所、国立研究開発法人理化学研究所<br/>再委託先：(株)日立ハイテクサイエンス、学校法人早稲田大学</p> |   |     |
| 情勢変化への対応      | <p>進捗状況や技術推進委員会の結果をふまえ、2018年度に研究開発実施体制を変更した。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) に関する研究開発推進のために、国立研究開発法人産業技術総合研究所の再委託先として、学校法人早稲田大学を追加した。</p> |   |   |     |
| 中間評価結果への対応    | <p>中間評価未実施</p>   |   |   |     |
| 評価に関する事項      | 事前評価   | 2017 年度実施 担当部 材料ナノテクノロジー部   |   |     |
|               | 中間評価   | 未実施   |   |     |
|               | 事後評価   | 2020 年度実施 担当部 材料ナノテクノロジー部   |   |     |
| 3. 研究開発成果について | 項目   | 最終目標  | 成果  | 達成度 |
|               | 1. CPS 型複合計測分析用機種対応コンバータの開発 (研究課題 1-1)   | ①CPS 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。  | 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」で得られた共通データフォーマットを拡張し、4 つのタグ : 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、共通データフォーマット (Ver.0) を開発した。 | ◎   |

|  |   |  |  |   |
|--|---|--|--|---|
|  |   | <p>②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。</p>                         | <p>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各社分析装置(計 14 種類)用のデータコンバータを開発した。変換後の XMAIL ファイルを使用して、後述する課題 3-2 で製作した統合ビューアで、共通に扱えることを確認した。データコンバータを開発した装置(担当計測装置メーカー)は下記の通り</p> <p>【(株)島津製作所】<br/>液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計</p> <p>【日本電子(株)】<br/>走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、核磁気共鳴装置、蛍光 X 線分析装置、電子線後方散乱回折装置</p> <p>【(株)日立ハイテクノロジーズ】<br/>走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光 X 線分析装置</p> <p>【(株)堀場製作所】<br/>ラマン分光分析装置、蛍光 X 線分析装置</p> | ◎ |
|  |   | <p>③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想定利用フローと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。合せて X 線画像検出器の標準評価プロトコルを確立する。</p>                          | <p>調査研究の結果から放射光施設のデータシステムに新規にデータフォーマットを相互に変換するコンバータを作成することで、複合計測分析システムと放射光施設の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。</p> <p>また実験室 X 線源を用いた X 線画像検出器の評価方法を見出すことができた。光子判定しきい値による画素間ばらつきや画素内アンプの時定数などを評価特徴量として掲げている。</p> <p>標準評価プロトコルについて記載する事</p>  | ○ |
|  | <p>2. 秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発(研究課題 1-2)</p> | <p>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、開発したデータコンバータで変換された測定データのインテグリティ(データの完全性)に関し、パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されていることを確認する。これにより、秘密性・安全性を確保したデータ収集・データ</p> | <p>ユーザ企業である住友ゴム工業と TDK からのデータの秘密性/安全性に関する要望・意見に基づいて、データ収集・データ管理技術に係わる以下の仕様を決定・作成した。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・改竄や差し替えを防ぐため、データファイル全体に XML 署名を行うこととした。</li> <li>・公開したくない装置の中間データ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仕様とした。</li> <li>・部分的な暗号化については、XML エlement 暗号技術を使用するものとした。</li> </ul> <p>「パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されて</p>  | ○ |

|   |   |  |                          |  |
|---|---|--|--------------------------|--|
|   |   | 管理技術の仕様を作成する。  | いることを確認する」に関する記述を追加すること。 |  |
| 3. 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<br>(研究課題 2-1) | 走査電子顕微鏡（日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズ）、電子線プローブマイクロアナライザ（日本電子(株)）、顕微赤外分光光度計（(株)島津製作所）、ラマン分光分析装置（(株)堀場製作所）間に適用する試料ホルダを開発する。<br>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。<br>水系試料の凍結試料を用いる事で大気等による試料劣化しない試料観察が可能な両社製のクライオ電子顕微鏡用の共通試料ホルダ（50-100K の温度可変型）を試作し、日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズと協力し、汎用化への提案を行う。 | <ul style="list-style-type: none"> <li>・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た。この共通試料ホルダが、参画 4 計測機器メーカーの装置における試料観察の際に十分機能することを確認した。</li> <li>・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。試料輸送用チャンバーを用いて参画 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。</li> <li>・走査型電子顕微鏡と透過型電子顕微鏡で使用可能な凍結試料を保持する試料ホルダを製作した。</li> <li>・上記試料ホルダにて、水系凍結試料の大気等による試料劣化のない観察が可能であることをクライオ電子顕微鏡により 50-100K の温度範囲で確認した。</li> </ul> 汎用化への提案に関して記載すること   | ○                        |  |
| 4. 測定位置の精密位置合わせ技術の開発<br>(研究課題 2-2)            | 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ーとアライメント法の確立により実現する。<br>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ーとして 3 $\mu$ m 以下の  | <ul style="list-style-type: none"> <li>・上記研究課題 2-1 の成果物である試料ホルダに参画 4 計測機器メーカーの装置で観察可能なマーカーを実装し、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した。また位置合わせマーカーとアライメント法の確立により、各装置（FTIR、ラマン分光、走査型電子顕微鏡）の位置再現情報が<math>\pm 3.0 \mu\text{m}</math>以内で一致することを確認した。</li> <li>・ナノ粒子用の試料分散基材を開発し、ナノ粒子によるフィンガープリント法でも蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡において<math>\pm 3.0 \mu\text{m}</math>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した。</li> <li>・位置合わせの精度は実際のユーザが使用する装置の状態に依存することになるが、少なくとも位置情報を取得し、観察領域の指定等の作業を容易にすることが可能であることが確認できた。</li> </ul> | ◎                        |  |

|  |   |   |  |  |
|--|---|---|--|--|
|  |   | 精度で合わせこむ測定位置合わせ技術を開発する。   |  |  |
| 5. 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 (研究課題 2-3) | <p>①安定かつ均一な分散液作製のため、ナノ材料分散に関与する影響因子を抽出し、分散性・均質性の評価手法を検討する。</p> <p>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。</p>  | <p>①液中ナノ材料分散に対する影響因子 FBD として整理した。作成された FBD に基づき、因子間の相関影響評価を実施し、液中分散試料作製に係る重要な影響因子を特定した。さらに調製されたナノ材料分散液を対象とした分散性・均質性の評価方針を確定した。</p> <p>微粒子分散液を基板上に均一に微粒子を表面展開する方法について、その試料品質、すなわち表面展開した試料粒子の分布の均一性について、影響を与える 4 要因を抽出し FBD に整理した。</p> <p>②電子顕微鏡法用には、ナノ粒子のリング状積層物の形成の有無を評価指針とし、リング形成の有無を迅速に評価するナノ蛍光標識方法を開発した。</p> <p>原子間力顕微鏡用には、試料品質の FBD を確定した。またサンドイッチ凍結乾燥法を採用し、白色光斜上照射暗視野顕微法と SEM 計測の複合による高速試料評価法を開発し、良好領域探索のプログラムを確定した。その検証をカーボンブラック試料で行って FBD との関連を概観し、開発の適切性を示した。</p> |  |  |
| 6. 測定データの信頼性向上技術の開発 (研究課題 3-1)             | <p>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る不確かさ因子を検討し Fish-bone 図(フィッシュボーンダイヤグラム：以下 FBD)の基本骨格をまとめる。</p> | <p>不確かさ因子を 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測定結果の信頼性を向上させるため、GC-FID、LC-UV、Py-GC-FID (-MS)、LC-MS を用いた測定での主たる不確かさ因子を明らかにし、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。GC-FID や 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、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それぞれ明らかにした。LC-MS では定性分析に影響を与える主たる因子を選定した。</p> <p>略号で示された装置を、目標に記載された装置名称と対応づけること。例) 液体クロマトグラフ質量分析設計 (LC-MS)</p> <p>結晶粒とそれを囲む境界からなる材料についてグレイ境界判定方法を調査した。磁石材料のモデル試料の走査電子顕微鏡 (SEM) ・エネルギー分散型 X 線分析装置 (SEM-EDS) ・蛍光 X 線</p>     |  |  |

|  |  |   |  |          |
|--|--|---|--|----------|
|  |  |   | <p>分析装置（XRF）測定について、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測定に関する因子を抽出して FBD の基本骨格を完成した。また SEM 法によるグレイン境界判定を容易にする試料の前処理方法を開発し、広範な領域の結晶粒境界判定を可能とした。結晶粒の面積や形状測定の精度評価に必要な二次元画像の歪みの評価方法を開発した。</p>   |          |
| <p>7. 相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発<br/>(研究課題 3-2)</p> |  | <p>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。このため、<br/>【実施計画記載の最終目標】<br/>①-1 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）を試作し統合ビューアを開発する。<br/>①-2 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）用統合ビューアを試作し、統合ビューア技術を開発する。</p> | <p>①-1 住友ゴムと島津製作所において、クロマトグラフ、NMR、顕微鏡の各装置のデータコンバートと共に XMAIL 内に特徴量を内包する手法を検討し、データマネージャアプリ、All ビューアアプリ、特徴量ビューアアプリ、テンプレート Editor アプリ、プロパティテーブル・インポータを有し、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。<br/><br/>①-2 TDK が磁石材料の材料提供および各種測定を行い、相関解析に向けた特徴量抽出の議論・提案、特徴量をもとにした物性との回帰解析などを行った。この結果を踏まえて、日立ハイテックは SEM、日本電子は SEM および EBSD、堀場製作所はラマン分光顕微鏡のデータをそれぞれ読み込むことが可能な XMAIL 変換テーブルを作製し、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。加えて、データをローカル環境に置かず CPS 環境（共通サーバー）から引き出し、結果を CPS 環境に戻す構造を構築し、CPS の安全性を確保しつつユーザがストレスなくデータのアップデートと解析が可能になる環境を提供する仕組みを開発した。</p> | <p>◎</p> |

|  |   |   |   |   |  |
|--|---|---|---|---|--|
|  |   | <p>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。</p>   | <p>②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た。計測・分析条件の違い等を補償して比較検討が可能なデータを提供するデータ補償ツールの成果は、OSDN(<a href="https://ja.osdn.net/projects/eos/">https://ja.osdn.net/projects/eos/</a>)を通して公開した。</p> <p>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。</p> | ○ |  |
|  | <p>8. 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 (研究課題 3-3)</p> | <p>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>①タイヤ用ゴム材の原料であるゴム材原料の分子量分布推定の精度について、ヘ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。</p> <p>磁石材料に関して特徴量がサンプルサイズと比較して多い条件であったため、観測変数間での多変量相関図を作成し、特徴量間の相関係数の大きさにより関係性の強いものを選出し、それを基に数十パターンのパス図を作成した。作成したパス図に関して構造方程式モデリングを用いて相関解析を行い、モデル適合度の高いものを構造化ライブラリとした。</p> <p>また、製品性能を予測する評価項目に関しても、タイヤ材料に関しては材料の熱伝導率、磁石材料に関してはビッカース硬度を新たに示唆することができた。</p>                       | ○ |  |
|  |   | <p>②タイヤ材料、磁石材料を対象にファイ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>②ファイラー形態や粒界構造等に関する特徴量抽出を行い、これに基づく解析アルゴリズムを試作開発した。タイヤ材料解析に向けては、ファイラーサイズやファイラー粒間距離などの形態学的特徴量抽出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は、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や、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>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。</p> <p>③-1 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>③-2 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>③-1<br/>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となった。</p> <p>③-2<br/>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な複合・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> | ◎ |
|                             | 投稿論文   | 0件  |   |   |
|                             | 特許   | 「出願済」4件   |   |   |
|                             | その他の外部発表(プレス発表等)   | 研究発表・講演：9件  |   |   |
| 4.成果の実用化・事業化に向けた取組及び見通しについて | <p>本プロジェクトである「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」では、2機関のユーザー企業が参画し統合的なデータ解析等の検証を行い成果を得ることができた。将来的に、本事業で使用した計測分析装置は2機関のユーザー企業の関連する分野のみではなく、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設備である。</p> <p>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であり、次段階で、いくつかの業界団体の参画を含めた体制で実施するプロジェクトを計画しており、国内へ本事業の成果を浸透させるための適切な展開が可能となる。また、さらに広い範囲の関係機関への本事業成果の普及を加速しなければ、世界各国で進められているデータ駆動型研究開発に対する競争力の維持は困難であるため、標準技術として規格化することを計画しており、本事業の成果を実用化へつなげることが可能となる。</p> |   |   |   |

|               |      |                             |
|---------------|------|-----------------------------|
| 5. 基本計画に関する事項 | 作成時期 | 2018年1月 作成                  |
|               | 変更履歴 | 2019年10月 改訂（研究開発期間の変更による改定） |

## 用語集

| No. | 用語                                      | 説明  |
|-----|---|---|
| 1   | API                                     | Application Programming Interface<br>下位レベルのプログラムが、上位プログラムから使われるために用意するアクセスのためのインターフェース。複数の関数の形をとることが多い。上位プログラムは下位プログラムが中で何をしているかを知らずとも、APIを呼び出すだけでその機能を利用できるようになる。APIの関数の呼び出し方を決めておけば、下位プログラムが異なる働きをするものに置き換わっても、上位プログラムは修正しなくてもよいというメリットがある。例えば、上位プログラムはあるデータをファイルに書き出すために下位プログラムを呼ぶが、APIを合わせておけばその下位プログラムが「XMAIL形式を書き出すもの」、「HDFS5形式で書き出すもの」を容易に交換可能となる。 |
| 2   | Cache Storage<br>および<br>Archive Storage | 短時間で大量のデータを出力する測定装置からデータを取得するとき、取りこぼしが無いようにするため、高速に読み書きできるCache Storage(キャッシュストレージ)という媒体(メモリなど)に、まずは一時的にデータを書き込み、その後、低速でしか書きこめないArchive Storage(アーカイブストレージ)に徐々に書き込むという方法が取られる。  |
| 3   | CPS型複合計測<br>分析                          | 複数種類の計測システムが収集した情報を、サイバー空間でAIなどのコンピューター技術を活用し、総合的な分析すること。定量的、複合的な分析結果に基づいてあらゆる産業へ役立てようという取り組み。CPS(Cyber-Physical System:サイバーフィジカルシステムの略)  |
| 4   | configファイル                              | ソフトウェアプログラムで使用する設定ファイルのこと   |
| 5   | GPFS                                    | General Parallel File System<br>IBMによって開発されたクラスタコンピューティング向けの分散ファイルシステムの1種。多くのスーパーコンピューターのファイルシステムで使われている。クラスターを組む複数のコンピューターが持つストレージ上に、分散させた状態でデータを持たせることができる。それによりデータの冗長性が生じ、さらには並列計算が容易にできるようになる。  |
| 6   | GUI                                     | Graphical User Interfaceの略。コンピューターの操作の対象が絵で表現されるユーザーインターフェース。マウスなどを使用して、直感的にコンピューターを操作できる。  |
| 7   | HDF5フォーマット                              | Hierarchical Data Format Version 5。<br>階層化された形でデータを保存することができるファイル形式。複数の種類のデータをまとめて保存したり、多次元データを効率的に扱えるメリットがある。種々のプログラム言語からのアクセスも容易。   |
| 8   | I/O                                     | Input/Outputの略。コンピューター用語で主にファイルの入出力を指す。   |
| 9   | Matlab                                  | 数値解析用ソフトウェアの一つ。Mスクリプトと呼ばれる独自の言語を用いており、Python同様簡単な記述で高度な処理が可能である。統合解析環境のもと、ツールボックスと呼ばれる、目的に特化した専用関数群を組み合わせることで、通常の数値解析のみならず画像処理  |

|    |                                |   |
|----|--------------------------------|---|
|    |                                | や機械学習を一元的に行える。  |
| 10 | Mie散乱                          | 光の波長程度以上のサイズの粒子による光の散乱現象。   |
| 11 | OSDN                           | 日本のオープンソースソフトウェアプロジェクト向けのホスティングサイト。Open Source Development Networkの略。   |
| 12 | Python<br>および<br>C言語           | プログラム言語の種類。C言語は古くからあるコンパイラ言語で、高速性と実行ファイルのコンパクトさ、小回りが利くことがメリットだが、人に分かりやすいというよりプロセッサに分かりやすい低級言語である。比べてPythonは高級言語であり、簡単な記述で高度な処理が可能である。C言語に比べて実行速度は遅いが、高速なライブラリが益々充実してきており、データや画像処理、機械学習においては最も人気のある言語である。          |
| 13 | RAID6                          | 2台以上のハードディスクを組み合わせることで1台のハードディスクに見せかける技術で、いくつかの種類がある。中でもRAID5は高速性と冗長性の両者を兼ね備えるものだが、RAID6はさらに耐障害性を高めたもの。   |
| 14 | Rayleigh散乱                     | 光の波長よりも小さいサイズの粒子による光の散乱現象。  |
| 15 | Semantic<br>Segmentation       | 画像内の全画素にラベルやカテゴリを関連付けるディープラーニング (Deep Learning) のアルゴリズム   |
| 16 | SHA-2 (SHA-256<br>もしくはSHA-512) | ハッシュ値を計算するハッシュ関数には様々な種類がある。歴史的にできるだけ一意のハッシュ値が計算されるように工夫が凝らされてきており、現状最も良く使われているのがSHA-256/SHA-512という関数である。計算されるハッシュ値のビット長により複数種のハッシュ関数があり、その総称をSHA-2と呼ぶ。SHA-1は前世代のハッシュ関数ですでにハッシュ値が一意にならない例が発見されたため、新規には採用されなくなっている。 |
| 17 | SSL/TLS                        | SSL (Secure Sockets Layer) / TLS (Transport Layer Security) であり、広く利用されているインターネット上で通信を暗号化する技術。利用者が送信するデータは「公開鍵」を使って暗号化され、サーバ側は「秘密鍵」を使ってそれを解読する仕組み。   |
| 18 | URI                            | WebページのアドレスのことをURL (Uniform Resource Locator) と呼ぶが、URIはそれより広い概念で Uniform Resource Identifier の略。XMAIL形式の中では、XMAILファイルの外部に存在する画像データファイルなどの在処を示すタグとして使われ、内容としては相対パス (XMAILファイルから見てどこにあるか) が用いられることが多い。              |
| 19 | UUID                           | Universally Unique Identifierの略語。全世界においてユニークとなるID。通常128ビットの整数値で規定されたソフトウェア上でオブジェクトを一意に識別するための識別子である。生成方法は各種あるが、128ビットとすることにより偶然の一致は宇宙規模で考えてもありえないとされる。一般には32桁の16進数の文字列として扱われることが多い。                               |
| 20 | VOCセンサ                         | 揮発性有機化合物 (Volatile Organic Compounds) を測定するセンサ  |
| 21 | XMAILガイドライン                    | XMAILの仕様に加えて使い方の注意点などが記載された文書。XMAILスキーマがあれば仕様は厳密に規定されるが、スキーマはヒューマンリーダブルではないため、仕様書やガイドラインが必要となる。   |
| 22 | XMLエレメント暗号<br>技術               | XMLを規定しているW3CがXML形式に付帯させる署名も規定している。このうちファイルの一部の要素に対して署名を付ける機能を指す。<br><a href="https://www.w3.org/TR/2002/REC-xmlsig-core-20020212/">https://www.w3.org/TR/2002/REC-xmlsig-core-20020212/</a>                      |
| 23 | XML形式                          | Webページを記載するための言語であるHTML (Hyper Text Markup  |

|    |                                   |   |
|----|-----------------------------------|---|
|    |                                   | Language)は良く知られているが、そこからより一般的なデータを構造的に記述できるように考えられた言語がXML (eXtensible Markup Language)である。インターネット上で使用される各種技術の標準化推進団体である、W3C (World Wide Web Consortium)によって規定されているオープンな規格である。XMLで書かれたファイルをXML形式ファイルと呼ぶ。                           |
| 24 | XML署名                             | XMLを規定しているW3CがXML形式に付帯させる署名も規定している。このうちデータファイル全体に署名を付ける機能を本書ではXML署名と呼んだ。正式名称は“enveloped-signature”である。<br><a href="https://www.w3.org/TR/2002/REC-xmlsig-core-20020212/">https://www.w3.org/TR/2002/REC-xmlsig-core-20020212/</a> |
| 25 | XPath                             | XML形式ファイルの中で、あるデータの要素にたどり着くためのルートから枝葉までのパスを特定の形式で表した文字列を指す。<br>例://document/instrument/name   |
| 26 | ZIP                               | データ圧縮やアーカイブのためのフォーマットで一般に最も使われている。ZIP形式で圧縮されたファイルを“.zip”を付けたファイル名で表す。圧縮だけでなく暗号化も可能。種々のZIPファイル用読み書きライブラリがあるため、プログラムで実現しやすい。  |
| 27 | アフィン変換                            | 画像の拡大縮小、回転、平行移動などをまとめて、3×3の行列を使って行う変換   |
| 28 | アンサンブル計測手法                        | 多数の粒子を含む集合体に対して計測を行う集合体評価手法。個々の粒子を計測する個別評価手法(カウント法)と対比して使用される。  |
| 29 | 安全性(未改変保証、改竄保証)                   | データファイルを第三者が改ざんできないことを指す。手段としては、元のデータから生成したハッシュ値をデータの一部として埋め込んでおき、もし改ざんを受けた場合、改ざん後のデータから計算したハッシュ値が元のハッシュ値と異なることがわかれば改ざんを発見することができる。また、データ全体をパスワード付きのZIP形式などで圧縮することで改ざんを防ぐ方法もあるが、その場合はデータの可読性が失われる。                                |
| 30 | イオンエッチング(FIB:Focused ion etching) | 集束したイオンビームを試料に照射し、加工や観察を行うこと。FIB(集束イオンビーム)加工ともいう。微細加工用ではガリウム(Ga)イオンビームが良く用いられる。   |
| 31 | インスタンス                            | 実体。概念を表したクラスに対して、その概念に含まれる実体を指す。  |
| 32 | 滴下法ナノ粒子展開                         | ナノ粒子を含んだ液体を滴下後、乾燥させてナノ粒子が散らばった試料を基板上に得ること   |
| 33 | 液体クロマトグラフ質量分析計(LC-MS)             | 質量分析計(MS)を取り付けた液体クロマトグラフ(LC)。質量分析計(MS)は、分析種をイオン化し、生じたイオンの質量電荷比(m/z)の違いを利用し分離した個々のイオン強度を測定し、イオン強度をグラフ化したマススペクトルから定性分析を行う。MSは、分析種のイオン化を行うことができれば、他の検出器にくらべ高い感度と高い選択性が得られる。  |
| 34 | 外部ファイルのリンク                        | URIを参照。   |
| 35 | カセグレン鏡                            | 赤外顕微鏡において微小領域を測定するための対物集光鏡で、凹面鏡と双曲面鏡を組み合わせた、天体望遠鏡などによく使用されるタイプの集光鏡  |
| 36 | 仮想環境                              | パソコンやサーバなどを構成するリアルなハードウェアの中で、CPUやメモリなどを理論的に分離、仮想化することにより作りだされた、ヴァ   |

|    |                           |   |
|----|---------------------------|---|
|    |                           | 一チャルな環境のこと。ここではプラットフォームの違いや利用ハードウェア環境の違いにより生じる面倒な準備を省くために利用される。   |
| 37 | 共通データフォーマット(XMAIL形式)      | 分析装置から得られるデータは各社ごと、また1社においても装置によってフォーマットが異なっている場合があり、データの相互利用の点で障害となっている。そこで、九州工業大学が提案した種々の分析装置のデータを表現できるフォーマットがXMAIL形式のフォーマットである。この形式はXML形式に準拠しており、XML形式に対して用意されたエディタなどのツール類や暗号化手法を使用することができる。 |
| 38 | クライオ電子顕微鏡(法)              | 生体内の構造を染色することなくそのまま凍らせて観察する方法。高性能な透過型電子顕微鏡(TEM)に低温(-160~-270℃)で試料観察が出来る装備(クライオホルダなど)を備えた顕微鏡(による観察法)。  |
| 39 | クライオポンプ                   | 真空容器内に極低温面を設置することで、その表面に残留気体を凝縮させ捕捉するタイプのため込み式真空ポンプの一つ。真空容器内で動作する装置が無く、また油を利用しないオイルフリーであるため、クリーンな真空が得られる。   |
| 40 | クラス                       | 複数の実体について、それらを抽象的に表す概念でまとめたもの。  |
| 41 | 蛍光顕微鏡                     | 生体または非生体試料からの蛍光・燐光現象を観察することによって、対象を観察する顕微鏡  |
| 42 | 原子間力プローブ顕微鏡               | 試料と探針プローブの原子間に作用する力を検出して画像を得る走査型プローブ顕微鏡(SPM)の一種。Atomic Force Microscopeの略称としてAFMと呼ばれることが多い。   |
| 43 | 構造化ライブラリ                  | 従来のような変数を羅列したデータベース形式のライブラリではなく、各変数間の相関性や因果関係を含む構造化されたライブラリ。本研究では得られた変数を用いて、それらの相関性を構造方程式モデリングによりパス解析を行い、得られた結果のパス図の集合を構造化ライブラリと呼ぶ。   |
| 44 | 構造方程式モデリング                | 重回帰分析と因子分析、パス解析を併せ持つ統計学的解析手法であり、共分散構造分析とも呼ばれる。観測変数間の相関関係だけでなく、観測変数間の関係を解釈する潜在変数を設定可能である。複雑な統計モデルの構造を、変数間の因果関係を矢印で示したパス図を用いて視覚的にわかりやすく表現することが可能である。  |
| 45 | 後方散乱電子回折パターン(EBSD)        | 約60~70° 傾斜した試料に電子線を照射することで得られる試料表面から約50nm以下の領域の各結晶面の回折パターン。この後方散乱電子回折パターン(EBSD)を解析することで結晶性試料の方位解析の情報が得られ、電子回折法より容易にかつ広い領域の結晶情報を得ることができる。  |
| 46 | 再現可能性                     | ある測定データが生じた際の測定条件や試料情報をそのデータ内に埋め込むことで、そのデータを追試実験で再現できるようにするための機能。   |
| 47 | 紫外吸光度検出器付液体クロマトグラフ(LC-UV) | 紫外吸光度検出器(UV)を付けた液体クロマトグラフ(LC)。紫外吸光度検出器(UV)はLCで最も多く用いられている検出器で紫外域に吸収を持つ成分が測定対象となる。液体中の成分を固定相と移動相の相互作用の差を用いて分離し、紫外吸光度検出器(UV)で検出する。  |
| 48 | 深層学習イメージフィルター             | 与えられた画像の特定成分を取り除く、弱める、強めるなどの処理をする機能を持つ物をイメージフィルターと呼ぶ。既存フィルターの多くは局所的な画素値(分布)に応じて事前に決められたルール内で処   |

|    |  |  |
|----|--|--|
|    |  | 理を行うため、適応(汎化)性が劣るが、これは機能そのものを学習するため、柔軟な処理を実現することが出来る。  |
| 49 | スキーマ                                   | 独自のXML形式ファイルフォーマットを作ったときに、そのフォーマットの文法を規定するもの。通常は拡張子 .xsd のファイルに記述し、このファイル自体もXMLで記載する。XMAILフォーマットの文法を規定しているのはXMAILスキーマ(XMAIL.xsd)ということになる。このスキーマファイルを使うことで文法に則っていないファイルのエラーを見つけることができる。           |
| 50 | 遡及性(追跡可能性)                             | データファイルに書かれているデータがどのように測定され、どのように解析されたものであるかをたどるための機能。XMAIL形式には<eventLog>と呼ばれる領域が確保されており、その中では測定データが取得された際の装置の動作ログが書きこまれている。また、それが解析後のデータであれば、施された解析手順がログとして残される。このログを閲覧することでデータの出自を明確にすることができる。 |
| 51 | タグ                                     | XMLにおいて、要素の位置を明示したり、要素の属性を表すために記述される文字列。   |
| 52 | データインテグリティ、DI(Data Integrity: データの完全性) | データの安全性、遡及性を合わせた概念。  |
| 53 | データコンバータ                               | 各種分析装置から得られる独自のデータフォーマットを共通データフォーマットのXMAIL形式に変換するためのソフトウェアツール。   |
| 54 | データの唯一性                                | そのデータが全世界でユニークであることを示すことができること。通常はそのデータに全世界でユニークであるUUIDを付けることでそれを表す。   |
| 55 | 電子線プローブマイクロアナライザ                       | 電子線を対象物に照射する事により発生する特性X線の波長と強度から構成元素を分析する装置。略称:EPMA(Electron Probe Micro Analyzer)   |
| 56 | 独立可用性                                  | データファイルがサイバー空間に移行しデータ単体になっても、計測分析に関わる全ての情報が再現可能性、遡及性、安全性が担保された状態で存在できることをいう。   |
| 57 | 熱分解-水素炎イオン化検出器付ガスクロマトグラフ(Py-GC-FID))   | ガスクロマトグラフィ(GC)で用いられる標準的な検出器である水素炎イオン化検出器(FID)を取り付けた分析装置で、ほぼすべての有機化合物を検出可能である。水素炎イオン化検出器(FID)は、可燃性の有機化合物を水素炎中で燃焼させたときに生成されるイオンをコレクターで捕集し、このときに発生した電流を検出する。  |
| 58 | ニューラルネットワーク(NN)                        | 脳の神経細胞(シナプス)に見られる特性に類似した数理的モデル。ネットワーク構造を有する脳シナプスが如く、学習によりシナプス間の結合強度を変化させ、問題解決能力を獲得する。  |
| 59 | ハーメチック導入フランジ                           | 外気を完全に遮断する気密封止構造を持った電流導入端子付きのフランジ。   |
| 60 | バイナリファイルおよびバイナリデータ                     | 中身が分かるように文字列や数値で記述されたテキスト形式ではなく、情報をできるだけ小さいサイズに収まるように詰め込んだ形式のデータファイル。詰め込んだ方法を知らないと読み出すことができない。ただし、読み出す方法が公開されているJPEGなどの画像データファイルもバイナリデータの1種である。  |
| 61 | ハッシュ値                                  | 大きなデータを一意の短いデータに要約する関数をハッシュ関数と   |

|    |                     |  |
|----|---------------------|--|
|    |                     | 言い、それにより計算された値をハッシュ値(=一意の短いデータ)と呼ぶ。大きなデータのうちのほんの一部でも変更されれば異なるハッシュ値が計算されるため、改ざんを検知することができる。   |
| 62 | ハフ変換                | 輪郭検出を行うための特徴抽出法の一つ。  |
| 63 | ビッカース硬度             | 硬さを表す尺度の一つであり、押し込み硬さの一種である。金属材料や無機材料などに幅広く応用されている。ダイヤモンドでできた剛体(圧子)を被試験物に対して押し込み、そのときにできるくぼみ(圧痕)の面積から硬度を算出する。   |
| 64 | 秘密性(機密性)            | データファイルを第三者が閲覧した場合に、データファイル作成者が見られたくない情報を隠すことができるようにすることを指す。例えば、中間的な解析結果を第三者に見せたくない場合、その部分をフォーマット不明なバイナリファイルにして外部にリンクしたり、ファイルの中で部分的に暗号化することで、解読不可能にすることができる。   |
| 65 | ファラデーカップ            | 導電性のある金属製のカップで、帯電した粒子を真空中で捕捉する装置。荷電粒子や電子を検出する時に使用される。  |
| 66 | フィッシュボーンダイアグラム(FBD) | "FBD"は"Fish-Bone Diagram"の略。結果や特性がどのような要因で発生したのかを図式化したもの。魚の骨に似た形のためフィッシュボーンと呼ばれる。品質工学の分野では特性要因図と呼ばれる。  |
| 67 | フィンガープリント(指紋法)      | 元々は指紋の照合による個人の識別を連想して用いられる用語で、ここではデータの同一性を証明するためのハッシュ値に代えて、ランダムに試料の一部にバラまいたナノ粒子の蛍光画像のパターンで試料の同一性を保証する方法の事を言う。なお、一般的にはRAMANや蛍光分光法でスペクトルのパターンの一致度から測定試料の同定法でもフィンガープリント法という言葉が用いられることがある。   |
| 68 | ペトリネット(PNML)        | Petri Net。<br><a href="https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%9A%E3%83%88%E3%83%AA%E3%83%8D%E3%83%83%E3%83%88">https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%9A%E3%83%88%E3%83%AA%E3%83%8D%E3%83%83%E3%83%88</a><br>プレス(丸)とトランジション(縦棒)とアーク(矢印)という単純な3種類の図形を使って、視覚的に事象を記述できるツール。XMAIL形式の中では、データを得た際の測定手順や解析手順を表すために<Protocol>領域にて使用する。自然言語で書くよりも形式的に記述でき、PNML(Petri Net Markup Language)という記述用言語も用意されている。また、PNMLで記述した事象を図形化するツールもいくつか存在する。 |
| 69 | ホモジナイザ              | 液体に含まれる粒子を微細、均一にするための装置。高圧式・超音波式など複数の方式が存在する。  |
| 70 | メタデータ               | データを取得した際の条件、あるいは、データのサマリー的な情報を記載したもの。データに対して付加的に用いられる。  |
| 71 | モルフロジー法(処理)         | 画像中の対象の輪郭や領域などを決定するときによく用いられる画像処理技術の1種。2値化画像などにおいて画像要素の膨張・収縮演算処理により、ノイズ除去や輪郭抽出によく用いられる。  |
| 72 | ラウンドロビン(テスト)        | 箇所間比較試験。同じサンプルを同時に複数の試験所で試験・分析を実施し、統計的に測定値の偏りやばらつきを評価する方法。   |
| 73 | ラマン分光分析装置           | 物質に照射された光とは異なる波長に散乱されたラマン散乱光(非弾性散乱光)を分光し、得られたラマンスペクトルにより分子レベルの構造を分析する装置  |

## 第 1 章 事業の位置付け・必要性について

### 1. 事業の背景・目的・位置付け

#### 1.1 事業の背景

計測分析機器は、ものづくり産業の発展の源泉であり、その国際競争力を高めることは我が国産業全体の国際競争力を維持・向上させる上で必要不可欠である。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。

近年、ものづくりの現場では、部素材の組成やナノメートルスケールから製品レベルまでの構造が複雑化することで、構造と機能との相関解析が困難となる状況が増加しており、各種計測分析機器データの統合的な解析を容易に行う環境作りが必要となってきた。

#### 1.2 事業の目的及び意義

計測分析技術はものづくり産業の発展の源泉であり、その国際競争力を高めることは我が国産業全体の国際競争力を維持・向上させる上で必要不可欠である。ものづくり現場等における生産性の向上に向けては、ビッグデータ解析技術を含む AI 関連技術の展開が重要であることが、「科学技術イノベーション総合戦略 2017」において指摘されている。

本事業は、上記と、ものづくりの現場において部素材の組成や構造が複雑化・微細化している状況を踏まえて、計測分析技術における喫緊の課題解決を目指す。すなわち、部素材のサブミクロン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サイバー空間に集約して統合的な解析を容易に行う環境作りと、ビッグデータや AI 等による高度な解析に向けた基盤技術の開発を行うことを目的とする。合わせて、ものづくり産業（計測分析機器ユーザ）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ため、CPS（Cyber Physical System）型複合計測分析システムを開発し、部素材研究開発の高度化・効率化などの課題解決に有効であることを検証することを目的とする。

#### 1.3 事業の位置付け

我が国では、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）において、最先端の研究ニーズに応えるため、将来の創造的・独創的な研究開発に資する先端計測分析技術・機器及びその周辺システムの開発を目的に、2004 年度より「先端計測分析技術・機器開発プログラム」が実施されていた。また、2016 年度より、戦略的創造研究推進事業（CREST）の中で、「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」領域が設定され、AI 等を用いた計測データ解析の研究が行われている。しかし、これらのプログラムは、新規性のある独創的な計測分析機器・技術及び解析手法の開発に主眼が置かれている。

2013 年度には、欧州において導入が始まっているナノ材料規制への対応を可能とするナノ材料の特性評価手法・装置の開発を目指し、国立研究開発法人産業技術総合研究所と国内計測機器メーカーが協力して「ナノ材料の産業利用を支える計測ソリューション開発コンソーシアム（COMS - NANO ; Consortium for Measurement Solutions for Industrial Use of Nanomaterials）」の活動が開始されている。本活動は、計測分析機器の統合を志向する先駆的な取組と言えるが、ナノ材料に限定した活動となっている。

一方、米国では、2011年に新材料の開発に要する期間とコストを半減する事を目的とした Materials Genome Initiative (MGI) 政策が策定された。2014年には MGI 実現に向けた短期目標(マイルストーン)を詳細に定めた Materials Genome Initiative Strategic Plan が発表されている。この方針の下、2011年～2015年合計で5億米ドル以上の予算が、分析計測技術開発を含めたマテリアルズ・インフォマティクスに関する研究に対して投じられている。この中で米国国立標準技術研究所(NIST)が中核となり、研究機関を超えたハイスループット実験データの一元管理に関する手法を検討している。また、各種計測分析機器データの統一化の動きとしては、米国試験材料協会(ASTM)において Analytical Information Markup Language (AnIML)を利用したデータ統合の取り組みが行われている。

また、米国エネルギー省(DOE)の Basic Energy Research においても、放射光施設の各種計測機器や電子顕微鏡の高速化、高精細化により生成する大量のデータを如何に整理し、有意な物理的意味にまで結び付けてゆくかとの観点から、データ処理のワークフローや物理モデルに基づくデータ解析の効率化の研究が行われている。

一方、EUにおいても Horizon2020 の中で、複雑あるいはノイズの大きい実データから、機械学習を用いて物理的な意味を抽出するためのデータ処理の研究が行われており、リモートセンシング等への応用が期待されている。

各方面の動向に加えて、先端材料の研究開発では、超精密な計測分析技術が求められるだけでなく、部素材のマイクロレベルの局所領域における各種計測データを取得し、それらと部素材の機能とを詳細に比較検討するニーズが高まっている。

本事業では、このような開発動向に対応するため、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基盤技術の開発を行う。これらを実現するための具体的な基盤技術として、複合計測分析システムの開発に注目し、産学官が協調・連携して取り組み、これらを技術の核として新しい計測分析機器の開発に応用していく。

## 2. NEDO の関与の必要性・制度への適合性

### 2.1 NEDOが関与することの意義

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。

また、開発した技術を、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。しかし、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、長期かつ多額の研究開発費が必要となり、民間企業のみで実施することは困難であるため、国費を投入し、産学官の連携で実施する必要がある。

### 2.2 実施の効果(費用対効果)

本プロジェクトは、事業期間2年間、事業規模3.7億円で実施された委託事業である。本事業は、部素材の組成や構造が複雑化・微細化している状況を踏まえて、ユーザが求める計測分析技術における課題解決を目指すために、研究開発項目「複合計測分析システムの開発」を実施した。本研究開発項目を達成することで、以下の効果が予測される。なお、売上、効果は全て2030年度の推定値である。

- (1) プロジェクト費用の総額 3.7億円(2年間)
- (2) 売上予測 1400億円/年  
(新規市場創出効果として)
- (3) CO<sub>2</sub>削減効果 11万tCO<sub>2</sub>/年  
(制御機器使用電力削減の効果として)

## 第2章 研究開発マネジメントについて

### 1. 事業の目標

#### [アウトプット目標]

本プロジェクトでは、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ための複合計測分析システム(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。

#### [アウトカム目標]

2013年における世界の計測分析機器市場4兆円の内、日本メーカーのシェアは10%となっている。2030年時点で予想される9兆円の世界市場において、日本メーカーのシェア拡大に貢献するため、本プロジェクトで開発する革新的基盤技術(複合計測分析システム等)を活用した計測分析機器の普及を目指す。

省エネルギー効果として、複合計測分析システムの普及による低電力化、作業効率向上効果等により、2030年には11万t/年(制御機器使用電力の32%)のCO<sub>2</sub>削減を、また、新規市場創出効果として、計測分析機器とソフト開発で1,400億円を目指す。

#### [テーマの開発目標]

研究開発項目「複合計測分析システムの開発」

##### 【基本計画最終目標(2019年度)】

- ・電子顕微鏡観察や顕微分光分析、顕微質量分析等、複数の機器において同一試料の観察位置を3μm以下の精度で合わせこむ技術を開発する。
- ・各種計測分析機器データフォーマットの統一を図り、ビューア(各種観測データを表示できるソフトウェア)を開発する。

本事業で開発するCPS型複合計測分析システムは有機部材、無機部材の製品開発に活用される。有機部材向けの複合計測分析システムは、タイヤ材料の研究開発に不可欠な複合階層構造解析の目的に活用され、マクロスケールからマイクロ(ナノ)スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。(液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、核磁気共鳴装置)。無機部材向けの複合計測分析システムは、磁石材料の研究開発に不可欠な粒界構造解析の目的に活用され、主としてマイクロ(ナノ)スケールの空間識別能力を有する。具体的には次の計測分析装置群で構成される。(走査型電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、ラマン分光分析装置、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光X線分析装置、電子線後方散乱回折装置)。この2種類をCPS型複合計測分析システムのモデルと位置づけ、次の研究開発課題毎に、下記の最終目標(2019年度)を設定する。

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－目標①)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。

(課題1－目標①に対する根拠)

必要とされる情報を網羅した共通データフォーマットを開発することで、各分析機器データフォーマットとの統一化を図ることが可能となり、複数の計測手法による統合解析に繋がる。

(課題1－目標②)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。データコンバータを開発する計測分析装置は下記を網羅することとする。

【(株)島津製作所】

液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計

【日本電子(株)】

走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、電子線プローブマイクロアナ

ライザ、核磁気共鳴装置、蛍光X線分析装置、電子線後方散乱回折装置

【(株)日立ハイテク】

走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光X線分析装置

【(株)堀場製作所】

ラマン分光分析装置、蛍光X線装置

(課題1－目標②に対する根拠)

研究開発に使用する異なる計測分析機器の測定データを、共通データフォーマットに変換するためのデータコンバータは必要である。

(課題1－目標③)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として、開発したデータコンバータで変換された測定データのデータインテグリティ(データの完全性:以下DI)に関し、パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されていることを確認する。これにより秘密性・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。

(課題1－目標③に対する根拠)

共通データフォーマットに変換されたデータは、そのままでは容易に読み出し書き出しが可能のため、データ秘密性・安全性を確保することは重要である。

(課題1－目標④)CPS 型計測分析の高度化を目指して、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想定利用フローと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。合わせて X 線画像検出器の標準評価プロトコルを確立する。

(課題1－目標④の根拠)

ラボベースでの計測分析データの共通化を進めた後に、より高度な最先端機器を所有し外部解放している大型施設での測定データとの連携、共通化が行われるためには必要である。

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－目標①)各種分析装置間に適用する試料ホルダを開発する。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。

(目標2－目標①の根拠)

材料開発を主としたユーザは、観察装置、分析装置、計測装置を横断的に活用してそれらのデ

ータをもって総合的な判断を下している。そのために必要な、同等な試料で、試料観察位置情報を同等にすることを可能にする。

(課題2-目標②)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。

(課題2-目標②の根拠)

開発された新材料の計測では計測中の試料状態を把握し、その情報を計測データと同時に取得することで、CPS型複合計測分析の精度を高めることが期待される。計測装置で分析している際に温度、湿度、ビーム照射量などが把握できれば、材料特性の評価に効果があることが判明している。

(課題2-目標③)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し、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 $3\mu\text{m}$ 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。

(課題2-目標③の根拠)

材料開発を主としたユーザは、観察装置、分析装置、計測装置を横断的に活用してそれらのデータをもって総合的な判断を下している。そのために必要な、同等な試料で、試料観察位置情報を同等にすることを可能にする。

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

(課題3-1目標)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(フィッシュボーンダイアグラム:以下FBD)の基本骨格をまとめる。

(課題3-1目標の根拠)

ビッグデータ解析に基づく材料特性評価の確度を高めるためには、解析に用いる定量値の信頼性の数値化が重要である。定量値の信頼性を数値として取り扱いたい場合、計測手法毎に主たる不確かさ因子を同定し、測定値に紐づけることは有効な手段である。

課題3-2: 関連解析に向けた統合ビューア作成技術の開発

(課題3-2目標①)複合階層構造解析用(マクロ-マイクロ分析結果の関連解析用)の統合ビューアと、粒界構造解析用(マイクロ-マイクロ分析結果の関連解析用)統合ビューアの2種類を試作し統合ビューア技術を開発する。

(課題3-2目標①の根拠)

複合計測分析システムを構成する個々の計測分析装置の測定結果を共通的にハンドリングし、関連解析に向けて解析結果を視覚化するための統合ビューアは必要である。

(課題3-2目標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。

(課題3-2目標②の根拠)

統合ビューアで活用される画像データに対して、計測・分析条件の違いなどを補償して比較検討が可能補償ツールは必要である。そのためにも計測・分析方法等のフローを可視化するツールも必要である。

課題3-3 関連解析に向けたAI活用技術の開発とモデル実証による評価

(課題3-3目標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。

(課題3-3目標①の根拠)

材料開発のための相関解析に向けたAI活用技術のためには、構造化ライブラリ、製品性能の予測が可能となる評価項目の候補を決定することは必要である。

(課題3-3目標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。

(課題3-3目標②の根拠)

材料開発のための相関解析に向けたAI活用技術のためには、材料に関する特徴量抽出とこれに基づく解析アルゴリズムは必要である。

(課題3-3目標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。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。

(課題3-3目標③の根拠)

開発した統合ビューアを活用し、複合計測分析システムモデルの評価を行い、モデル部素材の構造と物性の相関を解明できるか検証することで、実際の材質製品開発に貢献できることを導き出せる。

## 2. 事業の計画内容

### 2.1 研究開発の内容及び全体スケジュールと予算

#### 2.1.1 研究開発の内容

##### 2.1.1.1 研究開発内容の概要

新しい機能性部素材の発見や更なる高性能化のためには、複数の素材を最適に組み合わせ、ナノメートルからマクロレベルで制御することが必要であり、様々な計測分析機器を駆使して、組成・構造・形状等、異なる計測分析機器から得られる多数のデータを複合的に解析し、高性能を実現する条件を導き出す必要がある。

これら研究開発には、超精密な計測分析技術が求められるだけでなく、部素材のマイクロレベルの局所領域における種々の計測分析結果を総合的に解析し、開発に活かす必要がある。しかし、部素材の組成やナノメートルスケールから製品レベルまでの構造が複雑化することで、構造と機能との相関解析が困難となる状況が増加している。このため、部素材のマイクロレベルの局所領域における各種計測データを取得し、それらと部素材の機能とを詳細に比較検討するニーズが高まっている。

本研究開発では、AI等による各種計測データの統合的な解析を行うための環境作りとして、日本メーカーの強みである各種計測分析機器(電子顕微鏡、質量分析装置、X線分析装置等)の観測位置のトレーサビリティ確保等のシステム開発、データフォーマットの統一、ビューア(各種観測データを表示できるソフトウェア)開発を行う。さらに、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ため、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複合計測分析システムを開発する。このため、研究体制にユーザ企業を組み入れ、実効性のある複合計測分析システムの開発と早期の実用化を図る。また、必要に応じて、周辺技術の調査研究を実施する。

上記開発を達成するために、以下の3つの技術課題の解決を目指す。

- 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(以下、研究課題1)  
CPS 型複合計測分析システムを構成する個別計測分析装置の測定結果に、装置の動作状態、試料の処理など固有の情報を付与し、遡及性、信頼性、再現性を確保してデータの品質保証が可能な共通データフォーマットを開発・策定する。併せて個々の計測分析装置によるデータを共通データフォーマットに変換するコンバータの開発を行う。更に、サイバー空間に集約されたデータの秘密性・安全性を確保できるデータ収集・管理技術の仕様を作成する。
- 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(以下、研究課題2)  
CPS 型複合計測分析において同一試料の同一部位を測定可能とするため、各種複数計測分析装置に共通的に利用できる試料ホルダの開発と精密位置合わせ技術の開発を行う。同時に、共通 試料ホルダを活用した、複合計測分析遂行中の試料環境のセンシング技術の仕様を作成する。
- 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(以下、研究課題3)  
CPS 型複合計測分析システムの測定結果の信頼性を向上するため、計測手法毎に主たる不確かさ因子を検討する。次に信頼性の検討結果を踏まえて、マクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした複合階層構造解析用の統合ビューアと、マイクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした粒界構造解析用の統合ビューアの研究開発を試行する。合わせて、それぞれを、タイヤ材料、および磁石材料の性能向上を目指す2つの開発事例に適用させ、AI等の技術の活用や統合ビューア用のデータ解析/管理用ソフトウェアツール群の整備を試行することで製品開発サイクルの効率化を表現する複合解析システムを試作開発し、また それらをモデル事例として評価する。

## 2.1.1.2 研究開発内容の詳細

2.1.1.2.1 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  
担当:(株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、九州工業大学、理化学研究所

本事業では、CPS 型複合計測分析に不可欠な、測定結果の遡及性、信頼性、再現性など測定結果の品質を保証する情報付与が可能な共通データフォーマットを最適化し、個々の計測分析装置によるデータを共通データフォーマットに変換するコンバータの開発を行う。更に、サイバー空間に集約されたデータの秘密性・安全性を確保できるデータ収集・管理技術の仕様を作成し、CPS 型複合計測分析用のデータプラットフォームを構築する。

### 2.1.1.2.1.1) CPS 型複合計測分析用機種対応データコンバータの開発(研究課題 1-1)

担当:(株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、九州工業大学、理化学研究所

#### ①共通データフォーマットの作成

NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム(2016-2017 年度)「ビッグデータ適応型の革新的検査評価技術の研究開発」(以下先導プログラム)において 開発した共通データフォーマットを基に、計測分析機器メーカー(4社)と九州工大が連携しながら、改良型の共通データフォーマットを構築し、その最適化を行う。開発する共通データフォーマットは、前述の先導プログラムで検討した XML 対応を基礎として、データ品質を保証する4つの観点(データの唯一性、再現可能性、遡及性、未改変保証)をデータに付与した XMAIL 形式をさらに発展させて、同プログラムで検討したナノ粒子解析分野以外の応用分野および使用される計測分析機器群にも対応したものとする。

#### ② CPS 型計測分析を実現するための各機種データコンバータの作成

前項目で規定した共通データフォーマットに則し、素材・部材メーカー(2社)において、研究開発に使用する異なる計測分析機器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。開発では、各社の各計測分析機器からのデータ変換を容易にする変換ライブラリの作成を行い、新たな計測分析機器を共通データフォーマットに対応させることを容易にする開発環境の整備を進める。

### ③ CPS 型計測分析の高度化のための調査研究

CPS 型複合計測分析を推進し高度化するため、より高度な最先端機器を所有し外部開放している理化学研究所の放射光施設での測定データと計測分析機器の測定データを連携させるための調査研究を行う。Spring-8 の次世代高速画像検出器を計測分析機器に将来搭載した場合を念頭に、本事業の新データフォーマットが次世代高速画像検出器に対応できるようにするための調査研究を行う。

計測分析機器メーカー(4社)と九州工大は、連携して改良型の共通データフォーマットを構築して、その最適化を行う。

計測分析機器メーカー(4社)は、下記分析機器のデータコンバータを開発する。

#### 【株式会社島津製作所】

液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計

#### 【日本電子株式会社】

走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分光装置、電子線プローブマイクロナライザ、核磁気共鳴装置、蛍光 X 線分析装置、電子線後方散乱回折装置

#### 【株式会社日立ハイテク】

走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光 X 線分析装置

#### 【株式会社堀場製作所】

ラマン分光分析装置、蛍光 X 線分析装置

住友ゴム工業と TDK は、データコンバータ作成のために、これまでに取得した実データの提供及び必要なデータを新たに取得するとともに、データに付加すべき情報の選定及び検証を行う。

理化学研究所は、放射光施設での測定データと計測分析機器の測定データを連携させるための調査研究と次世代検出器を計測分析機器に将来搭載した場合を念頭に、本事業で作成する共通データフォーマットが次世代検出器に対応できるようにするための調査研究を行う。合わせて X 線画像検出器の標準評価プロトコルの実験を含めた検討を行う。

#### <2018 年度の実施内容>

- ・ 先導プログラム成果を活用して共通データフォーマット改良仕様を検討し作成する。
- ・ 上記の共通データフォーマットを基に対象装置(液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、ガスクロマトグラフ質量分析計、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、ラマン分光分析装置)のデータコンバータの試作。
- ・ 放射光施設での測定データと計測分析機器の測定データを連携させるための調査研究次世代検出器を計測分析機器に将来搭載した場合を念頭に、本事業の新データフォーマットが次世代検出器に対応できるようにするための調査研究、および X 線画像検出器の標準評価プロトコルの実験を含めた検討。

#### <2019 年度の実施内容>

- ・ 対象各装置におけるデータコンバータを開発

以下装置のコンバータを試作する。

液体クロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計、電子線プローブマイクロアナライザ、核磁気共鳴装置、原子間力プローブ顕微鏡、蛍光 X 線分析装置、電子線後方散乱回折装置

- ・ 開発したデータコンバータの課題抽出

統合ビューアと共に試用することで、各種装置で不足する情報を追加する。また、外部ファイルのリンクに必要な技術課題を洗い出す。

#### 2.1.1.2.1.2) 秘密性・安全性を確保したデータ収集・管理技術の開発(研究課題 1-2)

担当: (株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、九州工業大学

研究課題 1-1 で作成する共通データフォーマットに従い変換されたデータは、そのままでは容易に読み出し書き換えが可能のため、秘密性・安全性の確保が必須となる。本プロジェクトでは、計測分析データの改ざんや差し替えなどからデータインテグリティ(Data Integrity: データの完全性:以下 DI と略す)を確保するために、データの変更履歴の記録やデータの必要な項目に鍵をかけることが可能な技術についても検討を行い、共通データフォーマットおよびコンバータの開発に反映する。

計測分析機器メーカー(4社)と九州工大は、連携して DI を確保したデータの秘密性および安全性のためのデータ収集技術、データ管理技術の調査を行い、共通データフォーマットおよびコンバータの仕様を作成する。

住友ゴム工業と TDK は、それぞれタイヤ材料開発と磁石材料開発におけるデータの秘密性および安全性に関してユーザの立場からの仕様提案を行う。

#### <2018 年度の実施内容>

- ・ データの秘密性・安全性に関してユーザの立場から住友ゴム工業と TDK の提言を受け、DI を確保したデータ収集管理方法を検討し、仕様を作成する。  
なお、本課題は、2018 年度末で終了した。

#### 2.1.1.2.2 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

担当: (株)島津製作所、日本電子(株)、(株)堀場製作所、(株)日立ハイテク、九州工業大学、産業技術総合研究所

CPS 型複合計測分析による統合解析に向けて、構成要素である各種計測分析装置が付与する個別情報の“同等性”の確保を目指した研究開発を行う。この場合の同等性とは、各装置間で、同一位置を観察すること、計測、観察環境が同じであること、または対象とする試料を均質化して計測することである。

そこで本課題では、試料ホルダ、試料状態モニタの共通化技術の仕様検討、測定位置精密位置合わせ技術と試料前処理技術の開発を行う。一つは、測定位置を物理的に揃える(同一試料の同一部位を測定可能とする)ことで同等性を保証するための、各種計測分析装置に共通的な試料ホルダの開発と精密位置合わせ技術の開発である。他の一つは、空間的に一様・均質な試料を準備することでナノ構造を有する原材料に対する特性評価(キャラクタリゼーション)の同等性を保証するための、試料前処理技術の開発である。合わせて、CPS 型複合計測分析を遂行中の試料環境のモニタリングを行うためのセンシング技術の仕様を作成する。3つのサブ研究課題 2-1、2-2 および 2-3 に分けて遂行する。

#### 2.1.1.2.2.1) 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(研究課題 2-1)

担当: ㈱島津製作所、日本電子㈱、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所、九州工業大学

#### ①試料ホルダ共通化技術

材料開発の加速化を実現するには、ユーザが各分析装置で得られた同一試料のデータを用いて、複合階層構造解析(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析)や粒界構造解析(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析)を行うことが必要である。しかし、多くの分析装置メーカーでは計測装置に適応した独自の試料ホルダを作製していることから、メーカーや手法が違う装置では、測定試料を測定装置の試料ホルダに取り付け直す必要があった。ユーザ側では試料取り付けの際に測定試料の損傷、紛失が発生する問題が発生している。また、各分析装置の測定者(担当者)が違うケースも多く、試料情報が正しく伝わらない、試料を取り違えるなどの問題も発生している。これら問題を解決するために、異なる計測装置で利用できる共通試料ホルダの試作を行い共通試料ホルダの規格化(標準化)を目指す。また、装置間、ユーザの部署間で試料が移動しても、試料の識別を間違いないよう、共通試料ホルダに試料の同一性(UUID)を保証する識別マーカを付与する。識別マーカは、CPS 型複合計測分析に対応可能な仕様をユーザと検討し決定する。さらに、大気暴露すると試料特性が変化する材料(例: Li イオン電池関連材料など)を装置間で運搬する雰囲気遮断可能なキャリーケースも試作する。

#### ②試料状態モニタ技術

開発された新材料の計測では計測中の試料状態を把握し、その情報を計測データと同時に取得することで、CPS 型複合計測分析の精度を高めることが期待される。これまで、生物試料などを生の状態に近い状態で観察するクライオ法では、試料温度をモニタし試料表面に付着する氷の有無を確認しながら観察している。また、電子顕微鏡などで X 線分析する際には、フェラデーカップを用いて照射する電子線量を把握している。計測装置のユーザにヒアリングした結果、計測装置で分析している際に温度、湿度、ビーム照射量などが把握できれば、材料特性の評価に効果があることが判明した。

そこで、研究課題 2-1①で開発する共通試料ホルダに搭載する試料近傍の温度、湿度およびビーム照射量が測定可能なアダプタの方式について仕様を作成する。

#### <2018 年度の実施内容>

担当: ㈱島津製作所、日本電子㈱、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所

- ・ 走査電子顕微鏡(日本電子㈱、㈱日立ハイテク)、電子線プローブマイクロアナライザ(日本電子㈱)、原子間力プローブ顕微鏡(㈱日立ハイテク)、顕微赤外分光光度計(㈱島津製作所)、ラマン分光分析装置(㈱堀場製作所)のステージ移動量、試料サイズを考慮した共通試料ホルダの仕様検討および試作品を作製する。
- ・ 上記の共通試料ホルダに試料の同一性を保証する識別マーカの方式を計測装置メーカーで検討する。
- ・ 試料環境(温度、湿度、ビーム照射量)の把握を可能とするアダプタの技術調査と仕様を検討する。

担当: 九州工業大学

- ・ 他の計測に利用する共通試料ホルダを先端部で共有し、計測によるダメージの軽減を視野に入れた、同一試料、同一視野計測が可能なクライオ電子顕微鏡用の共通試料ホルダ(50-100K の温度可変型)の設計とプロトタイプ開発を行う。

#### <2019 年度の実施内容>

担当: ㈱島津製作所、日本電子㈱、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所

- ・ 2018 年度で試作した共通試料ホルダの検証、課題抽出、および試作品を改良する。また、雰囲気遮断ホルダの方式について計測装置メーカーで検討し仕様を作成する。
- ・ 試料の同一性を保証する識別マーカの付与とその方式を検討し仕様を提案する。
- ・ 試料環境測定アダプタ(温度、湿度、ビーム照射量)の仕様を作成する。

担当:九州工業大学

- ・ 2018年度で試作したクライオ電子顕微鏡用の共通試料ホルダ(50-100Kの温度可変型)の改良と評価(試料ステージのドリフト量、振動量、達成温度および達成温度の安定性、共通試料ホルダ上でホルダ座標系が指定されたグリッドの観察とその相対位置の決定等)を行う。

#### 2.1.1.2.2.2) 測定位置精密位置合わせ技術の開発(研究課題 2-2)

担当:㈱島津製作所、日本電子(株)、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所、九州工業大学

複合階層構造解析(マクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)や粒界構造解析(マイクロ-マイクロ分析結果の相関解析用)では、試料の特性を正確に把握するために異なる計測装置で同一試料の同一箇所を測定することが必要である。しかし、現在は異なる装置間でのアライメント手法などの手順が規格化されていない。そこで、本事業では、各計測装置のステージ座標補正を行うためのアライメントマーカを共通試料ホルダに付与する。サブミクロンでの位置再現精度を実現するために、アライメントマーカの形状、位置を検討する。ユーザ企業からは、複合階層構造解析で走査電子顕微鏡、原子間力プローブ顕微鏡と顕微赤外分光光度計での相関解析が望まれている。粒界構造解析では、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、電子線プローブマイクロアナライザ、原子間力プローブ顕微鏡での相関解析のニーズが高い。本課題では、共通試料ホルダに位置精度を向上するためのマーカを付与し、異なる装置間で座標校正を行い、同一箇所の測定を再現させる。

先導プログラムで、調査研究で共通試料ホルダにマーカを付与して検証実験を行ったところ、最大で 50  $\mu\text{m}$  程度の位置再現性であることが判明している。これは、マーカの大きさや手順が規格化されていないことが要因と推測される。そこで、本課題では、各計測装置メーカーが位置再現性の向上を実現するマーカの仕様と蛍光顕微鏡像と電子顕微鏡像を用いた自動アライメント手法を開発する。さらに、透過電子顕微鏡との相関解析を実現するために、ファインアライメントに必要なマーカの検討を行い、ユーザが容易に位置再現できるよう自動で実施可能なアライメント手法(アルゴリズム)を開発し標準化を目指す。

九州工業大学は、ナノ粒子を分散した試料分散基材を作成し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡を用いて、同一視野を精度良く(3  $\mu\text{m}$  以下)決定するためのアルゴリズムを提案する。加えて、同試料分散機材を利用して、同一試料性を保証するためのフィンガープリント技術を提案する。

#### <2018年度の実施内容>

担当:㈱島津製作所、日本電子(株)、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所

- ・ 走査電子顕微鏡(日本電子(株)、㈱日立ハイテク)、電子線プローブマイクロアナライザ(日本電子(株))、原子間力プローブ顕微鏡(㈱日立ハイテク)、顕微赤外分光光度計(㈱島津製作所)、ラマン分光分析装置(㈱堀場製作所)および課題 2-1①で試作する共通試料ホルダを用いて、位置再現性を向上させるための課題を抽出し改善法を計測装置メーカーで検討する。

担当:九州工業大学

- ・ ナノ粒子を分散した試料分散基材を開発し、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡を用いて観察し、同一視野計測のための基材の基礎データを収集する。
- ・ マーカ配置(各種顕微鏡による観察)によるフィンガープリント技術の調査研究を行う。

#### <2019年度の実施内容>

担当:㈱島津製作所、日本電子(株)、㈱日立ハイテク、㈱堀場製作所

2018年度に作製した共通試料ホルダでは、試料の向き(上下)の確認を目視で行えないため、上下を判断可能なマーカを付与する。また、位置再現性を向上させるアライメントマークの形

状、個数を最適化し、アライメント精度を向上する手法(アルゴリズム)の仕様を作成する。

担当:九州工業大学

- ・ 分散したナノ粒子をマーカとして、蛍光顕微鏡、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡の画像間のマーカ相関から共通座標位置を求め、3000nm以下の精度を目指す。
- ・ マーカ配置によるフィンガープリント技術により、同一試料保証のためのツールのプロトタイプを作成し、検証する。

2.1.1.2.2.3) 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(研究課題 2-3)

担当:産業技術総合研究所

サイバー空間に集約された計測分析装置の測定結果をもとに統合解析を実施するためには、各種計測法にて利用される評価対象試料そのものの同一性が極めて重要であり、そのための試料調製法開発が課題となっている。複数の機器において同一試料の特性を評価することを想定すると、各種顕微計測における同一視野の確保と保証(課題 2-2 で実施)に加えて、①ナノ材料等の均質分散液調製、②分散液の均質展開が、対象とする試料の代表性を確保する観点から重要となる。このため次の個別課題を実施する。

①ナノ材料の液体中への均質分散法・評価法の確立

ナノ材料等の原材料を液中に分散する際、安定かつ均一な分散液を作製することは非常に困難である。ナノ材料間の相互作用の観点から凝集を防ぐために分散媒環境(pH 等)の最適化は欠かすことができない。さらに後段の顕微鏡用試料の調製(課題 2-3②)においては分散液の均質性の確保だけでなく、分散液調製後の試料の安定性も重要である。

当課題ではこれらのナノ材料の液中分散に係る課題点を解決するため、ナノ材料の液中均質分散に係る要件の確定(影響因子の確定)、ナノ材料の分散状態の評価、ならびに分散液の安定性評価法確立に係る基盤研究を実施する。対象として住友ゴム工業や TDK が使用し世界的にも使用実績の高いシリカやカーボンブラック等を中心に開発を展開する。

ナノ材料の長期間における安定な液中分散性の保持の制御では、分散剤を用いたナノ材料の液中分散を実施する。さらにナノ材料分散における分散手法の差異(超音波・高圧ホモジナイザ等)、分散剤(イオン性・非イオン性界面活性剤・高分子分散剤等)の影響などのナノ材料分散に関与する様々な影響因子群を抽出し、分散されたナノ材料の粒子径を基本パラメータとした分散性評価を実施することで、ナノ材料の液中分散における重要な影響因子を抽出する。影響因子の包括的な抽出・評価は、今まで見落とされていた観点であり、当該評価結果は課題 1 の 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へ還元されることが期待される。

また、ナノ材料分散液の分散安定性および均質性は、分散液作製から顕微鏡用試料作製に要する 時間や試料採取方法を制限する要素であるとともに、観察に用いる試料の同一性を保証する観点から重要な特性である。このため、ナノ材料分散液の分散安定性および均質性評価に係る基盤技術およびその評価手法を検討する。

<2018 年度の実施内容>

シリカ・カーボンブラックを中心としたナノ材料を対象とし、ナノ材料分散に関与する様々な影響因子を抽出する。さらに調製されたナノ材料分散液を対象とした分散性・均質性の評価手法を検討する。なお本課題に対しては 2019 年度は実施しない。

②顕微鏡用試料の均質試料調製法とその評価法の開発

ナノスケールの空間分解能を有する顕微鏡法は、ナノ材料の構造を識別することによって、一次粒子のサイズと形状や二次粒子の形態など、多様な情報を引き出すことができる。顕微鏡法の能力を最大限に活かすためには顕微鏡法に最適な試料の調製法が重要である。調製試料にナノ材料の著しい凝集があった場合、粒子境界の識別の妨げや、粒子サイズ測定への影響、

積層下部粒子の数え落としなどの障害が発生する。

そこで本課題では、ナノ材料の顕微鏡用基板上展開した試料の品質を左右する要因を抽出し、顕微鏡用試料の調製に際するナノ材料等の均質展開法の開発および均質性を評価する手法の検討を行う。

ナノ材料の顕微鏡用試料作製では、ナノ材料を溶媒に分散し、その分散液を基板上に滴下・乾燥させる方法が一般的に用いられている。乾燥時におけるナノ粒子の凝集抑制が課題である。滴下乾燥による試料展開法では溶媒乾燥に伴って液滴周上にナノ材料が堆積し、顕微鏡観察による個々の粒子の識別を困難にしている。また、他の問題として、分散剤等が乾燥してできた凝集体等の夾雑物が存在すると、測定対象のナノ材料の識別を妨げる場合がある。高品質な顕微鏡用試料とは、顕微鏡計測においてナノ粒子の判別の妨げが少ないものである。そのため、要因の検討では、分散溶媒、滴下基板 表面の状態等による影響を評価する。研究課題 2-3①とも連携し制御された試料を用いるなどにより要素の明確化を図る。

ナノ材料等を顕微鏡基板上で凝集する箇所を抑制すること、つまり試料展開の均質性を向上させることによって、顕微鏡のナノスケール計測性能を活かして、ナノ材料の一次粒子や二次粒子形状の識別性の向上につなげることができる。そこで凍結乾燥法等を用いたナノ材料の均質な展開法を開発する。そして研究課題 2-3①から得られる試料等を用いて均質展開法の確立を図る。ナノ材料の均質展開性を評価する手法を併行して開発し、試料の品質を定量的に提示する。上述に係る各年の実施計画を下記に示す。

#### <2018 年度の実施内容>

・ ナノ材料の電子顕微鏡用基板上への表面展開法について、従来法の課題を整理し、試料品質を左右する要因を確定する。原子間力プローブ顕微鏡用には表面展開試料品質の簡易評価法を確立する。滴下法ナノ粒子展開における試料の品質を左右する要因について、粒子密度の高さを重視しながら確定する。

なお本課題は、2019 年度は実施しない。

#### 2. 1. 1. 2. 3 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

担当:(株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、九州工業大学、名古屋大学、産業技術総合研究所

CPS 型複合計測分析システムを構成する個別計測分析装置毎の測定結果の信頼性向上を目指して、計測手法毎に主たる不確かさ因子を検討する。この信頼性の検討結果を踏まえて、マクロ-マイクロ分析の相関解析を基にした複合階層構造解析用の統合ビューアと、マイクロ-マイクロの相関解析を基にした粒界構造解析用の統合ビューアの研究開発を試行する。合わせて、統合ビューアの開発基盤をなすソフトウェア解析ツール群の整備を試行するとともに、AI 技術を適用し、タイヤ材料の性能向上技術、磁石材料の性能向上技術の 2 つのモデル事例において、製品開発サイクルの効率化の検証を試みる。3つのサブ研究課題 3-1、3-2 および 3-3 に分けて遂行する。

##### 2.1.1.2.3.1) 測定データの信頼性向上技術の開発(研究課題 3-1)

担当:産業技術総合研究所

ビッグデータ解析に基づく材料特性評価の確度を高めるには、解析に用いる定量値の信頼性の数値化、すなわち同定量値がどれだけ不確実性をもつ値なのかの評価されていることが極めて重要である。定量値の信頼性を数値として取り扱いたい場合、計測手法毎に主たる不確かさ因子を同定し、測定値に紐づけをすることが極めて有効な手段となる。

本研究課題では先導プログラムにおいて試行した、複合計測分析システムを構成する個別計測法ごと確かさ因子の FBD によるとりまとめ法を踏襲し、参画企業より要望のあったガスクロ

マトグラフ法、熱分解ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ、X線蛍光分析装置、走査電子顕微鏡および走査電子顕微鏡/エネルギー分散型X線分析装置に関して、標準液等を用いてFish-bone図(フィッシュボーンダイアグラム:以下FBD)の基本骨格をまとめる。各測定法における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することで、実データに基づく相関解析(研究課題3-3)において精度向上に貢献する。

#### <2018年度の実施内容>

- ・ 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、蛍光X線分析装置に関して、標準液ないし純金属ベースでの試験により、不確かさ要因の関係整理を行い、FBDの基本骨格をまとめる。
- ・ 走査電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置の測定による結晶粒(グレイン)境界判定に関して、モデル試料等を用いて、判定に影響を及ぼす要因を抽出し、FBDの基本骨格をまとめる。  
なお本課題に対しては、2019年度は実施しない。

#### 2.1.1.2.3.2) 相関解析に向けた統合ビューア作製技術の開発(研究課題3-2)

担当: (株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、九州工業大学

研究課題1で作製された共通データフォーマットとデータコンバータをもとに、CPS型複合計測分析システムを構成する個々の計測分析装置の測定結果を共通的にハンドリングし、相関解析に向けて解析結果を視覚化する統合ビューアの研究開発を行う。研究課題3-3で遂行するモデル実証への展開を想定し、①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)統合ビューア、②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)統合ビューアの2種類を試作し、統合ビューア技術を開発する。

統合ビューアの機能は、異なる装置で測定されたデータの連携と一覽性の観点から評価する。研究開発に際しては、ナノ材料のサイズ分布用統合ビューアを先導プログラムで試作した経験と知見を活用する。

複合階層構造解析用統合ビューアは、タイヤ材料の研究開発に活用される以下の個別計測分析装置の出力結果を統合解析する用途に用いる。

液体クロマトグラフ、ガスクロマトグラフ、液体クロマトグラフ質量分析計、  
ガスクロマトグラフ質量分析計、赤外分光光度計、走査電子顕微鏡、  
透過電子顕微鏡、核磁気共鳴装置

粒界構造解析用統合ビューアは、磁石材料の研究開発に活用される以下の個別計測分析装置の出力結果を統合解析する用途に用いる。

走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型X線分析装置、  
電子線プローブマイクロアナライザ、ラマン分光分析装置、  
原子間力プローブ顕微鏡、蛍光X線分析装置、電子線後方散乱回折装置

この研究開発において、計測分析機器メーカー4社(島津製作所、日本電子、日立ハイテク、堀場製作所)は協力して統合ビューアの仕様策定や機能評価を行うとともに、島津製作所が複合階層構造解析用統合ビューアの、日立ハイテクが粒界構造解析用統合ビューアのとりまとめ責任を果たす。

住友ゴム工業は、ゴムに配合される各種ポリマーカーボンブラックやシリカなどの材料提供および各種測定を行い、相関解析に向けた特徴量抽出の議論・提案を行う。また、特徴量をもとに、物性との回帰解析などを行い、タイヤ用ゴム材料のマクロ-マイクロ統合ビューアの実証検証・有用性の確認を行う。

TDKは、磁石材料の材料提供および各種測定を行い、相関解析に向けた特徴量抽出の議

論・提案を行う。また、特徴量をもとに物性との回帰解析などを行い、磁石材料のマイクロ-マイクロ統合ビューアの実証検証・有用性の確認を行う。

九州工業大学は、統合ビューアで活用される画像を中心とするデータ群に対して、計測・分析条件の違い等を補償して比較検討が可能なデータを提供するデータ補償ツールを試作する。また計測・分析方法の可視化や試料作成フローの追加修正が可能な可視化ツールを作成する。

#### <2018年度の実施内容>

- ・ 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)の統合ビューアと、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)統合ビューアの仕様策定とフレームワークやコンポーネントの基本設計を行う。
- ・ 統合ビューアでの活用をめざし、①画像を中心としてモデルデータを取得し、計測・分析条件の違い等を補償するためのアルゴリズムを提案する。②共通フォーマットの仕様策定を効率化するため、フォーマットのプロトコル部分に記述されている計測・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の仕様を検討する。
- ・ ゴムに配合される各種ポリマーカーボンブラックやシリカなどの材料提供と各種測定、および磁石材料の提供および各種測定を行い、相関解析に向けた特徴量抽出の議論・提案を行う

#### <2019年度の実施内容>

- ・ 2018年度にモデル設計した2種類の統合ビューアを試作して課題抽出を行い、統合ビューア表示に必要なソフトウェアの改良を行う。
- ・ 統合ビューアでの活用をめざし、①計測機器(透過電子顕微鏡)の画像データを補償するためのツールの試作を行い、モデルデータに対して試行する。②データマイニングに適した、計測・分析における試料・計測・分析作成フローを可視化するツールを作成する。
- ・ 特徴量をもとに物性との回帰解析などを行い、タイヤ用ゴム材料のマクロ-マイクロ統合ビューアおよび磁石材料用のマイクロ-マイクロ統合ビューアの試作開発に向けてフィードバックする。

#### 2.1.1.2.3.2) 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(研究課題3-3)

担当:(株)島津製作所、日本電子(株)、(株)日立ハイテク、(株)堀場製作所、住友ゴム工業(株)、TDK(株)、名古屋大学、産業技術総合研究所

本課題では、AI活用に必要なデータの収集・蓄積(データベース化)とデータ解析に向けた支援技術の開発を行う第1段階までを推進する。

第1段階のデータの収集・蓄積(データベース化)では、タイヤ材料開発に特徴的なマクロ-マイクロ構造の相関および磁石材料開発に特徴的なマイクロ-マイクロ構造の相関に着目して遂行する。このため、名古屋大学は住友ゴム工業と連携し、マトリックス(ゴム材料)の分子量分布、フィルターの分散状態やパーコレーション構造、フィルターの空間的分布や配向、有機材料の結晶化度、異種成分間界面の状態などに着目して複合計測分析を実施し、マクロ-マイクロ構造パラメータの抽出・ライブラリ化を行う。またTDKとの連携のもとに、磁石の結晶相、磁性粒子の界面構造などの粒界や欠陥などに着目した複合計測分析を実施し、マイクロ-マイクロ構造パラメータの抽出・ライブラリ化を行う。

データ解析に向けた支援技術の開発では、相関解析に向けた特徴量抽出・評価を試行する。産総研は住友ゴム工業との連携のもとに、タイヤ材料に使用されるポリマ、添加剤(組合せ)のグリップ性能向上に資する特徴量抽出・評価とともに、原料フィルターの走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡観察画像から形態や分散状態の差異を特徴付け、ゴム特性との関係性を明らかにする。ここで、ゴム系材料の特徴量抽出・評価のためには、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開発の拡張が必要となった為、拡張分を含めたゴム系材料の開発を早稲田大学に再委託する。またTDKとの連携のもとに、主として走査電子顕微鏡画像情報(結晶粒組織のサイズや異方性など)を対象として、材料組織情報に変換するための自動セグメンテーション技術の開発を実施し、組成や結晶方位など抽出した特徴量と磁石特

性に対する関係評価を行う。特徴量抽出に必要な解析パッケージは、統合ビューアから出力された測定倍率などの情報をテキストとして読み込み、着目した試料に関する特徴量をテキスト等として出力、協調動作が可能なものとする。

このため、計測分析機器メーカー(4社)は、ユーザ企業がビッグデータ・AI を活用するために必要な構造パラメータと特徴量抽出に必要な解析パッケージを共有し、課題1の共通データフォーマット(コンバータ)の開発、課題3-2の統合ビューアの開発にフィードバックする。また複合的なデータを対象とした主成分分析およびクラスター解析による組成分析、ディープラーニングによる境界解析を行う解析技術を他のコンポーネントと連携可能なソフトウェアとして開発する。

計測分析機器メーカー(4社)は、住友ゴム工業と TDK の AI 活用に向けて、構造ライブラリ、統合ビューア、特徴量抽出のための解析パッケージ、関連ソフトウェアパッケージ等が協調動作できるソフトウェア環境(アプリケーションフィールド)の構築を行う。ゴム材料開発に向けたソフトウェア環境構築は島津製作所が、磁石材料開発に向けたソフトウェア環境構築は日立ハイテックが、それぞれ主担当となる。

住友ゴム工業は、複合階層構造解析用(マクロ-ミクロの相関解析用)統合ビューアをもとに、これまで人の手を介した解析では発見できなかった新たな相関関係や、そこから導かれる知見(因果関係)の新たな発掘を目指し、得られた知見をタイヤ製品開発にフィードバックする。

TDK は、粒界構造解析用(ミクロ-ミクロの相関解析用)統合ビューアをもとに、測定試料の総合的な評価技術(寿命、欠陥、最適製造法など)および製品開発の効率化の観点から検証する。

#### <2018年度の実施内容>

- ・ ①ゴム材料をサンプルとしたマトリックス(ゴム材料)の分子量分布、フィラーの分散状態やパーコレーション構造等の評価、②磁石材料(モデルサンプル)を対象とした粒界や欠陥などミクロ-ミクロ相関に着目した観察や分析評価を実施し、試料と同時に提供された分析情報を併せて構造データとする。
- ・ タイヤ材料、磁石材料に対して既存の計測・評価の問題点を把握し、効率化を目的とした作業仮説を作成する。磁石材料を中心に、結晶相、磁性粒子の界面構造情報の取得と整理を進め、仮説実証に必要な特徴量抽出と解析アルゴリズムの検討を行う。
- ・ タイヤ材料、磁石材料の過去データをもとにビッグデータ・AI 活用のプラットフォームを構築するために必要な項目を共有し、課題3-1および課題3-2にフィードバックする。
- ・ AI 解析データの収集に向けて各種ゴム材料を提供し、構造のパラメータ化、ライブラリ化を行う
- ・ AI 解析データの収集に向けて磁気特性の異なる磁石モデルサンプルを提供し、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、電子線後方散乱回折装置の画像データを取得・収集する。

#### <2019年度の実施内容>

- ・ ①ゲル浸透クロマトグラフィーデータを用いたタイヤ材料(ポリスチレン、ポリブタジエン)の分子量分布推定の精度と不確かさを定量化する手法を、ベイズ推定手法を用いて開発する。タイヤ材料のフィラーとマトリックスに関する構造データを継続して取得・拡充し、摩擦摩耗特性などの特性データを取得して、得られた構造データと特性データ間の相関を構造方程式モデリングを使って解析する。②磁石材料を対象としたラマン分光分析装置、走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡等を使ったマイクロ構造に関する分析データを取得・拡充し、保磁力特性情報等との相関について、構造方程式モデリングを使った解析を実施する。
- ・ タイヤ材料特性では、深層学習によるフィラーの粒子形態自動識別や、マトリックス組織中の分散性 などの構造的影響評価技術開発を行い、磁石材料特性では、深層学習による粒界自動検出とそれに基づく三重点など固有の解析・処理に必要な解析パッケージモデルを作成する。
- ・ 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課題3-2にフィードバックする。

- ・ AI 解析に向けてゴムの特性データを取得し、各特性データの組み合わせ解析を実施する。
- ・ 磁石材料評価に向けて 2018 年度実施サンプルを用いて走査電子顕微鏡、透過電子顕微鏡、エネルギー分散型 X 線分析装置、電子線プローブマイクロアナライザ、電子線後方散乱回折装置の画像データの数量をふやし、関連機関と共有する。

## 2. 1. 2 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"> <li>実データ/付加情報の提供 (住友ゴム、TDK)</li> </ul>                      | <ul style="list-style-type: none"> <li>ユーザー視点でのコンバータ作成協力</li> <li>実データの提供および必要なデータの新たな取得</li> <li>データに付与すべき情報の選定および検証</li> </ul>    |  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>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)</li> </ul>         | <ul style="list-style-type: none"> <li>共通フォーマット仕様の作成</li> </ul>   |  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>データコンバータ開発 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場)</li> </ul>               | <ul style="list-style-type: none"> <li>データコンバータ要素開発</li> </ul>  | <ul style="list-style-type: none"> <li>データコンバータの開発と課題抽出</li> </ul> |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>CPS 型計測分析高度化のための調査研究 (理研)</li> </ul>                    | <ul style="list-style-type: none"> <li>放射光施設と計測分析器のデータ連携に関する調査研究</li> <li>次世代検出器対応に関する調査研究</li> <li>X線画像検出器の標準評価プロトコルの検討</li> </ul> |  |
| 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"> <li>秘密性/安全性の提案 (住友ゴム、TDK)</li> </ul>                        | <ul style="list-style-type: none"> <li>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</li> </ul>   |  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>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)</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>DI を確保したデータ収集/管理方法の仕様作成</li> </ul>   |  |

### 課題 2 CPS 型複合計測分析用の試料保持、試料前処理技術の開発

| (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作製技術の開発  |  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>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)</li> </ul>                 | <ul style="list-style-type: none"> <li>仕様検討および試作</li> </ul>                          | <ul style="list-style-type: none"> <li>実証、課題抽出、改良版の試作品</li> </ul>       |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>試料ホルダー共通化技術 (クライオ電顕) (九工大)</li> </ul>                      | <ul style="list-style-type: none"> <li>製品設計およびプロトタイプ</li> </ul>                      | <ul style="list-style-type: none"> <li>改良、ドリフト補正検討、同一視野精度の向上</li> </ul> |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>試料状態モニター技術 (島津、日本電子、日立ハイテク、堀場)</li> </ul>                  | <ul style="list-style-type: none"> <li>技術調査、仕様検討</li> </ul>                          | <ul style="list-style-type: none"> <li>試料環境測定アダプタの仕様決定</li> </ul>       |
| 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"> <li>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)</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>先導研課題の抽出と改善法の検討</li> </ul>                    |   |
| 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"> <li>ナノ材料の液体中への均質分散法・評価法の確立 (産総研)</li> </ul>                    | <ul style="list-style-type: none"> <li>影響因子の抽出</li> <li>分散性、均質性の評価手法検討</li> </ul>    |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>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)</li> </ul>                   | <ul style="list-style-type: none"> <li>SEM:課題整理、要員の確定</li> <li>AFM:滴下法の評価</li> </ul> |   |

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<br>(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<br>(九工大)                         | ・ データ補償ツール仕様検討と試作<br>・ 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<br>(島津、日本電子、日立ハイテック、堀場) | ・ ミクロ-マクロ系、ミクロ-ミクロ系の統合ビューア仕様検討とコンボ-ネット試作開発      |  |
| ・ 有機/無機データの取得と統合ビューアの検証<br>(住友ゴム、TDK)          | ・ タイヤ、磁石材料の提供と各種測定<br>・ 特徴量抽出の議論・提案             | ・ AI 解析に向けたタイヤ、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<br>(名大)                          | ・ ミクロ-ミクロ、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<br>(島津、日本電子、日立ハイテック、堀場)      | ・ タイヤ材料、磁石材料の特性データ解析の基本検討<br>・ 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製・検証   |
| ・ 特徴量抽出とベイズモデリングによる最適化<br>(産総研)                | ・ 課題把握と作業仮説作成<br>・ 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)<br>・ フォーム形態、分散性の画像診断手法開発(タイヤ材料) |
| ・ データの相関解析と AI 解析による効率化検証<br>(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                                      |

2. 1. 3 研究開発予算

本事業は、当初5年間で計画を進めていた。政府予算の変更に伴い、2019年3月、減額(2019年度:187百万円減額, 2020年度:194百万円減額)、2019年10月、事業期間を5年から2年に短縮した。それに伴い、2019年3月に、本研究開発の目標を達成するための3つの技術課題の最終目標について変更した。2019年10月に、基本計画及び本研究開発の目標を達成するための3つの技術課題の最終目標を変更した。当初設定していた2020年度中間目標を、概ね最終目標とした。本事業の最終予算を、表2. 1. 3-1に示す。表2. 1. 3-1に本事業の予算を示す。

表2. 1. 3-1 本事業の予算(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    |



## 2.2 研究開発の実施体制

図2.2-1に事業全体の実施体制を示す。

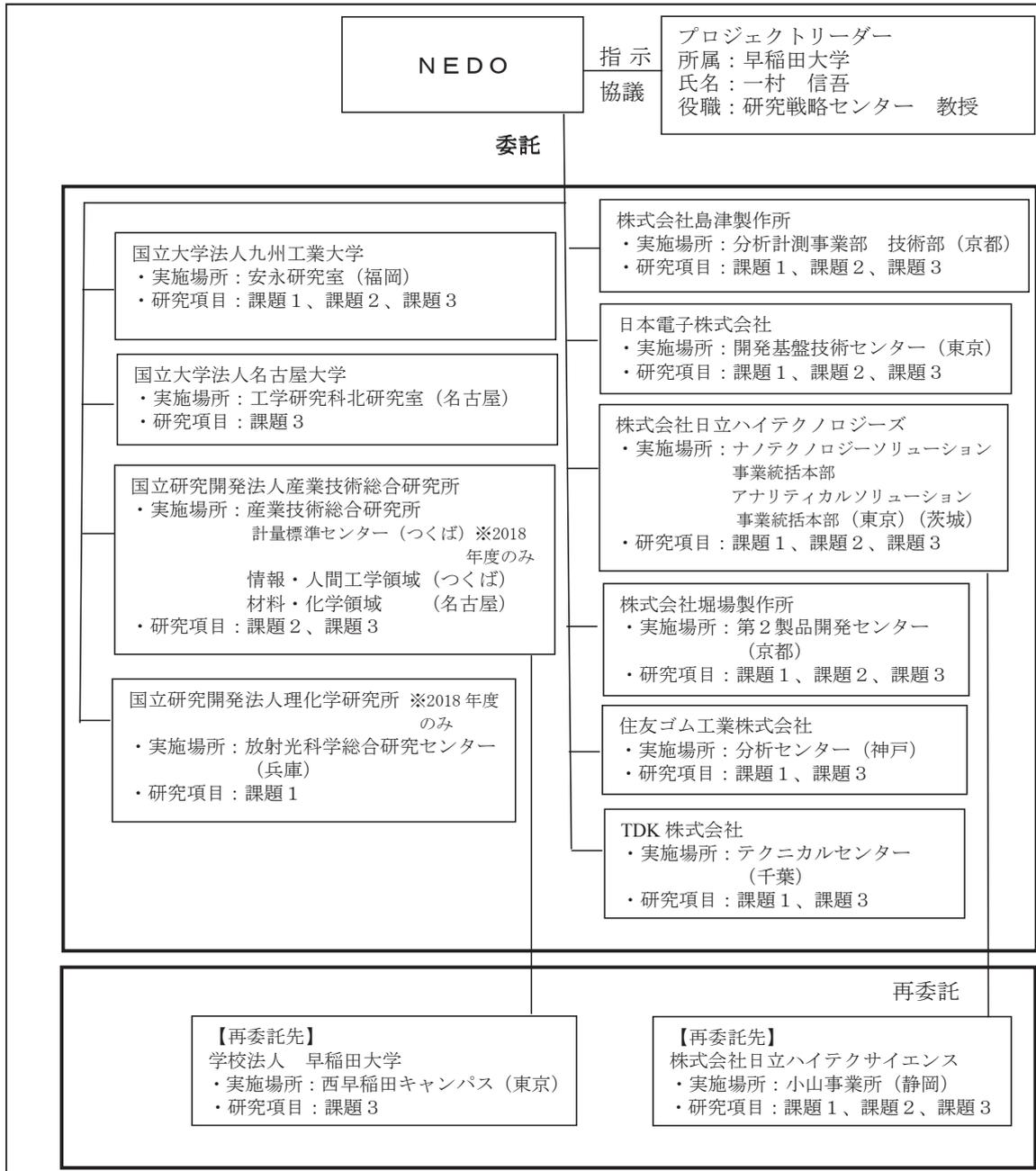


図2.2-1プロジェクト実施体制

### 2.3 研究開発の運営管理

NEDO は、研究開発全体の管理・執行に責任を負い、研究開発の進捗のほか、外部環境の変化等を適時に把握し、必要な処置を講じるものとする。運営管理は、効率的かつ効果的な方法を取り入れることとし、次に掲げる事項を実施する。

研究開発全体の管理・執行に責任を有するNEDOは、経済産業省及び研究開発実施者と密接な関係を維持しつつ、本事業の目的及び目標に照らして適切な運営管理を実施する。具体的には、必要に応じて、技術推進委員会等における外部有識者の意見を運営管理に反映させる他、随時、プロジェクトの進捗について報告を受けること等により進捗の確認及び管理を行うものとする。また、全体の最終目標の効率的かつ効果的な早期達成のため、(新たな課題の対応も含む)関連技術や市場の動向を随時把握し、最新の技術や知見を取り込むこととし、毎年度、実施方針に掲げられた研究開発プロジェクトの目標や研究開発の内容を評価し、必要に応じて変更するものとする。早期実用化が可能と認められた研究開発については、期間内であっても研究を完了させ、実用化へ向けた実質的な研究成果の確保と普及に努める。

具体的には、プロジェクト推進のために以下の会議を開催した。表2.3-2の外部有識者による委員会も開催した。

表2.3-1 会議等による運営管理の実績

| 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          |
| 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        | プロジェクト推進のための検討会議  | -           |
| 知財委員会           | 随時        | 実、P        | 知財に関する検討委員会       | 6回          |

実:実施者、P:PL、委:外部委員、N:NEDO

表2.3-2 研究推進委員会外部有識者委員

|     | 名前    | 所属   | 役職                       |
|-----|-------|--|--------------------------|
| 委員長 | 伊藤 聡  | 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 | 拠点長<br>(MI2I プロジェクトリーダー) |
| 委員  | 大塚浩二  | 京都大学 大学院工学研究科 材料化学専攻 有機材料化学講座 材料解析化学分野           | 教授                       |
| 委員  | 尾崎 公洋 | 国立研究開発法人産業技術総合研究所 中部センター 磁性粉末冶金研究センター            | 研究センター長                  |
| 委員  | 田中浩三  | 株式会社住化分析センター クライアントサービス本部長                       | 東京営業所長                   |
| 委員  | 藤田大介  | 物質材料研究機構 先端技術材料解析研究拠点                            | 拠点長                      |
| 委員  | 河原 成元 | 長岡技術科学大学 工学部 物質材料工学専攻 バイオ複合材料工学講座                | 教授                       |

### 2.4 研究開発の実用化に向けたマネジメントの妥当性

本研究開発の推進に際して、下記3つの開発課題を設定している。

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

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

研究課題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

この課題を遂行するに際して、大きく分けて3つのグループから研究開発ポテンシャルを集めた研究開発体制を構築している。即ち、A)計測分析機器を製造・販売する企業

グループ、B)計測分析機器を活用して新たな機能素材を開発・販売する企業グループ、C)大学、研究開発法人などのアカデミアグループである。

ただし、課題毎に主体的に責任を果たすグループが異なること、また共通プラットフォームの構築やビッグデータ解析のモデル実証などから推察されるように、課題毎に共通性・個別性の度合いは違う。このため開発する技術のオープンクローズ戦略は、上記課題1～3と、研究開発グループA)～C)の組合せによって異なる性格を有する。

大別すれば、課題1と課題2は研究成果のオープン化を基本方針として展開する。即ち、グループA)機関とグループC)機関が主体的に展開する課題1、課題2は、開発する共通データフォーマット構造、精密位置合わせ技術等の広範な利活用の推進を目指して、標準化展開を積極的に進める。標準化に際してはRAND/FRAND条件の設定など、広範な利活用の促進に向けた運用を行うことを目指す。このため研究開発過程で創出される知的財産（特許、ソフトウェア）も防衛的観点での取得にとどめ、成果の目途が確立した時点で、出願を進める。

これに対して課題3は、サブ課題毎にオープンクローズの方針を設定し、運用する。サブ課題は、以下になる。

- 1) 測定データの信頼性向上技術の開発
- 2) 相関解析に向けた統合ビューアー作製技術の開発
- 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

グループC)機関が主体的に開発するサブ課題1)は、信頼性向上のための測定結果の不確かさ評価技術の開発が中心であり、まさにオープン戦略に基づく広範な展開を図る。グループA)機関が主体的に開発するサブ課題2)は、統合ビューアーの作製に際して必要となる知識の階層化において、グループB)機関のこれまでの知見・ノウハウを活用することが想定される。従って知見・ノウハウに密接に関する成果物は、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な戦略での展開を基本とする。一方、並行した研究開発で創出される、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【グループA)機関とグループC)機関の担当分】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した上で、実施権の弾力的な運用でオープン化を推進する。

最後にグループB)機関が主体的に開発するサブ課題3)は、モデル実証・評価に際して担当機関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。このため、サブ課題3)で展開されるCPS型複合計測分析（モデルシステム）は、基本的に限られたメンバーだけのセミクローズな運用を基本として研究開発を推進する。そこで活用されるAI技術や開発されるソフトウェアなど【グループA)機関とグループC)機関の担当分】も、実証・評価対象のモデル系に密接に係わるインタフェース部分はクローズを原則として、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。

本研究開発のオープン戦略に基づく成果物を基にした国際標準化の推進では、まず計測分析装置の共通データフォーマット、精密位置合わせ技術が候補となる。このような国際標準化は、計測分析装置に係わる国際標準化を推進しているISO（国際標準化機構）のTC（専門委員会）が担っている。

TCにおいて、日本は、しっかりとリーダーシップを確保・発揮しており、本研究開発の共同研究体を構成する計測分析機器メーカー各社からは、上記のTCに数多くの委員、エキスパートを送り出している。従って本研究開発の課題1、課題2の研究成果

物を中心に、国際標準化の積極的な展開をはかることができるものと考えている。加えて、本研究開発に参画する産業技術総合研究所は、組織として国際標準化に取り組む姿勢を明示している国内最大の研究機関であり、様々な専門委員会で活躍する議長、エキスパートなどを多数擁している。従って本研究開発で展開された成果の国際標準化（オープン化）を、最も適した専門委員会において展開する上で、それら関連人材との横の連携（ネットワーク）を活用できる。

また課題1では、本研究開発に参画している計測分析機器メーカー（4社）のすべてがX線分析装置の製造・販売を行っていることから、検出器仕様記述の共通化は、関係する計測分析機器業界でのフォーラム規格にできる条件を具備したものといえ、この観点からも標準化、更には国際標準化への展開を見通すことが可能である。これらの国際標準化を先導するために、（一社）日本分析機器工業会と連携する。今後、本研究開発の課題1、課題2の成果物を中心とした標準化は、次期標準化プロジェクトで進めていく。

知財マネジメントに関しては、図2.4-1に示すように、複数の実施者が参加している開発項目のため、知財等合意書にて実施者間の運用ルールを規定するとともに、当該合意書に基づく知財運営委員会を立ち上げて、本プロジェクトの研究開発活動で出てきた知的財産の運用を行っている。



図2.4-1 本プロジェクトの知財マネジメント推進体制

また、展示会等を通して、事業と成果のPRを行い、本研究開発の重要性とその先進性をアピールしている。

### 3. 情勢変化への対応

(1) 2018年11月26日に開催された技術推進委員会で、表2.3-2の外部有識者の意見をマネジメントに反映し、追加予算（加速予算）の投入を行うことで、研

究開発を促進し、実用化・事業化の早期実現に繋げた。図2. 2-1のプロジェクト実施体制に変更した。以下に、追加予算の内容を記す。

国立研究開発法人産業技術総合研究所は、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）において、ゴム系材料、磁石材料の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になっていた。

検討の結果、ゴム系材料の複合階層構造解析（マクロ-ミクロ分析結果の相関解析）用技術開発において、当初想定していなかった計測器からの微弱な信号とノイズとの分離や、多量のデータから高速（短時間）に相関解析を行う為のAIソフト開発の拡張が必要となることが判明した。そのため、事業開始1年目から、ゴム材料に関して、拡張分を含めた追加実施を開始することにした。

具体的な体制の変更として、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開発の拡張が必要となり、この拡張分を含めたゴム系材料開発加速の為に、我が国でこの分野をリードする早稲田大学理工学術院を国立研究開発法人産業技術総合研究所の再委託先に加えた。事業終了まで、最終的な研究開発体制は、2.2研究開発の実施体制に示す通りであり、より高度な開発および加速が可能となった。

上記、早稲田大学を再委託先に加えることは、2018年11月26日に開催された、表2.3.2の外部有識者による研究推進委員会においても承認された。本件に関する予算加算額は、2百万円である。

(2)政府予算の変更に伴い、2回の研究開発計画の見直しを実施している。2019年3月、減額(2019年度:187百万円減額,2020年度:194百万円減額)、2019年10月、事業期間を5年から2年に短縮した。それに伴い、2019年3月に、本研究開発の目標を達成するための3つの技術課題の最終目標について変更した。2019年10月に、基本計画及び本研究開発の目標を達成するための3つの技術課題の最終目標を変更した。当初設定していた2020年度中間目標を、概ね最終目標とした。

(研究課題1最終目標変更前)

開発した共通データフォーマットに変換された測定データについて、前述のタイヤメーカーと磁石材料メーカーでの実際の研究開発をモデルとして検証を行う際に抽出した課題、問題点を検討し、共通データフォーマットについて改良、改善を加える。また、それらの多数のデータの収集・管理が可能なこと、データの秘密性・安全性が確保できていること、課題3で開発する複合解析システムで活用可能なことを確認する。

(研究課題1最終目標変更1回目)

開発した共通データフォーマットに変換された測定データについて、前述のタイヤメーカーと磁石材料メーカーでの実際の研究開発をモデルとして検証を行う際に抽出した課題、問題点を検討し、共通データフォーマットについて改良、改善を加える。また、それらの多数のデータの収集・管理が可能なこと、データの秘密性・安全性の確保に必要な仕様が作成できていること、課題3で開発する複合解析システムで活用可能なことを確認する。

(研究課題1最終目標変更2回目)

・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

・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。

・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として、開発したデータコンバータで変換された測定データのデータインテグリティ(データの完全性:以下 DI)に関し、パラメータの保存性とデータ改変履歴が確保されていることを確認する。これにより秘密性・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。

・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想定利用フローと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。合わせて X 線画像検出器の標準評価プロトコルを確立する。

(研究課題 2 最終目標変更前)

・計測装置メーカーは走査電子顕微鏡、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で使用する共通試料ホルダーの標準化・規格化を実施する。また、共通試料ホルダーにはファインアライメント用マーカを付与し、自動アライメント手法(アルゴリズム)の開発により数 10nm の位置再現性を実現した上で試料環境測定アダプタを搭載する。また、試料の同一性を保証する識別マーカについても標準化と規格化を実施する。上記以外の 3 種類以上の計測分析装置への共通試料ホルダーの適用可能性について検証・課題抽出を行う。

・産総研では、実試料への適用を通して試料前処理技術および評価技術のデータ蓄積と高度化を行い、CPS 型複合計測用の基盤技術として確立する。

(研究課題 2 最終目標 1 回目変更後)

計測装置メーカーは走査電子顕微鏡、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で使用する共通試料ホルダーの標準化・規格化を目指す。また、共通試料ホルダーにはファインアライメント用マーカを付与し、自動アライメント手法(アルゴリズム)の開発により数 10nm の位置再現性を可能にする使用を作成する。また、試料の同一性を保証する識別マーカについても標準化と規格化を目指す。上記以外の 3 種類以上の計測分析装置への共通試料ホルダーの適用可能性について検証・課題抽出を行う。

(研究課題 2 最終目標 2 回目変更後)

走査電子顕微鏡(日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズ)、電子線プローブマイクロアナライザ(日本電子(株))、顕微赤外分光光度計(株)島津製作所)、ラマン分光分析装置(株)堀場製作所)間に適用する試料ホルダーを開発する。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。さらに、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。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。九州工業大学は、水系試料の凍結試料を用いる事で大気等による試料劣化しない試料観察が可能な両社製のクライオ電子顕微鏡用の共通試料ホルダー(50-100K の温度可変型)を試作し、日本電子(株)、(株)日立ハイテクノロジーズと協力し、汎用化への提案を行う。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 $\mu$ 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。

(研究課題 3 最終目標変更前)

・各種計測分析法の不確かさ因子を評価し、実データに基づく相関解析における信頼性向上に貢献する。

・タイヤ材料開発、磁石材料開発において、AI 解析パッケージを用いた解析工程の高効率化と、データ空間拡大に伴う全体最適化性能向上(=実験回数の半減)を実現する。

・CPS 型複合計測分析システムによる測定データ群から、新たな相関関係の解明や知見(因果関係)の導出が可能な、タイヤ材料開発、磁石材料開発向け2種類のAI活用型CPS複合計測分析システムを開発する。

・ゴム物性データやプロセスデータなどを含めた複合解析データをAI解析し、従来の人が介在する解析法では限界であった埋もれた情報を抽出し、新たな物質創成に向けた有効性を検証する。さらに、従来の開発期間との比較し、期間短縮(半減)が図られていることを確認する。

・多種の計測分析装置で収集した磁石材料の統合解析データや解析システムを活用して、自動車(EV)用のモーターなど磁石利用製品の研究開発の高度化・効率化(半減)等の解決に有効であることを検証する。

(研究課題3最終目標1回目変更後)

・タイヤ材料開発、磁石材料開発において、AI解析パッケージを用いた解析工程の高効率化と、データ空間拡大に伴う全体最適化性能向上を実現する。

・CPS 型複合計測分析システムによる測定データ群から、新たな相関関係の解明や知見(因果関係)の導出が可能な、タイヤ材料開発、磁石材料開発向け2種類のAI活用型CPS複合計測分析システムを開発する。

・ゴム物性データやプロセスデータなどを含めた複合解析データをAIでモデル解析し、従来の人が介在する解析法では限界であった埋もれた情報を抽出し、新たな物質創成に向けた有効性を検証する。

・多種の計測分析装置で収集した磁石材料の統合解析データや解析システムを活用して、自動車(EV)用のモーターなど磁石利用製品の研究開発の高度化・効率化等の解決に有効であることを検証する。

(研究課題3最終目標2回目変更後)

・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る不確かさ因子を検討しFish-bone図(フィッシュボーンダイアグラム:以下FBD)の基本骨格をまとめる。

・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)の統合ビューアと、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)統合ビューアの2種類を試作し統合ビューア技術を開発する。

・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。

・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、構造化ライブラリーを試作開発する。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。

・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。

・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。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。

・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。

(基本計画アウトプット目標変更前)

本プロジェクトでは、ユーザーが求める機能（機械特性、電気特性等）を有する部素材の開発を支援するための複合計測分析システム（部素材のサブミクロン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。さらに部素材研究開発の高度化・効率化などの解決に有効であることを検証する。

(基本計画アウトプット変更後)

本プロジェクトでは、ユーザーが求める機能（機械特性、電気特性等）を有する部素材の開発を支援するための複合計測分析システム（部素材のサブミクロン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。

#### 4. 評価に関する事項

NEDOは、(1)事業の位置付け・必要性、(2)研究開発マネジメント、(3)研究開発成果、(4)実用化に向けての見通しおよび取り組みの4つの評価項目について、外部有識者による評価を行うこととしている。本プロジェクトは、2018年から2年間の事業であることから、事後評価を2020年度に実施することにした。2017年度に実施した事前評価の結果は、添付資料2を参照。