

計算科学等による先端的な機能性材料の技術開発事業

令和3年度予算額 24.8億円（24.8億円）

事業の内容

事業目的・概要

- 従来の機能性材料※の開発は、過去、蓄積してきた多くの材料の構造や物性、触媒を含む反応経路などの実験・評価データを踏まえ、“経験と勘”に基づく仮説を立てて、それを繰り返し実験によって検証しながら、時間をかけて進められてきました。

※断熱材や触媒等の優れた化学的機能・電氣的機能等を有する材料

- 本事業では、高度な人工知能(AI)等の計算科学、高速試作・革新的なプロセス技術及び先端計測評価技術を駆使した革新的な材料開発システムの構築とともに、公知の論文や特許等の材料データをAIが学習可能な状態とする技術開発により、これまでの材料開発プロセスを刷新します。
- 高い省エネ性能をもつ機能性材料の開発期間を劇的に短縮（試作回数・開発期間を1/20以下）することにより、省エネルギーの実現を目指します。
- 令和3年度はAIを活用した材料開発につながる多数のデータを自動的に処理、加工、解析、管理を行うデータ基盤システムの整備とともにデータを蓄積するデータベースの詳細設計等を行います。

成果目標

- 平成28年度から令和3年度までの6年間の事業であり、令和12年度において革新的な機能性材料の導入による省エネ(原油約138万kL/年削減)を目指します。

条件（対象者、対象行為、補助率等）



事業イメージ

- 産学官連携による集中研究体制で進めることにより、本事業の研究開発期間の大幅な短縮を図ります。

計算科学 (AI等)



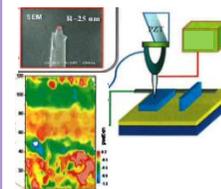
シミュレーション設計

プロセス技術



高速試作

先端計測技術



先端ナノ計測

材料データ構造化技術



テキストマイニング
画像認識ソフトウェア
データベース構築 等

材料データをAIが
学習可能な状態
とする技術開発

システムの確立
設計・プロセス技術・評価技術等の連携

大量の材料データ

AIを活用した材料開発
組成・構造 ⇄ 機能

開発期間を劇的に短縮



革新的機能性材料の創製