

研究開発事業に係る技術評価書（事前評価）

事業名	機能性化学品の連続精密生産の開発 （「先端計算科学等を活用した新規機能性材料合成・製造プロセス開発事業」の新規テーマ） ※NEDO 事業名：「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」に「合成プロセス設計技術の開発」を追加	
担当部署	経済産業省製造産業局 素材産業課 （国研）新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO） 材料・ナノテクノロジー部	
事業期間	2022 年度～2025 年度（4 年間）	
概算要求額	2022 年度 1,585（百万円）	
会計区分	<input type="checkbox"/> 一般会計 / <input checked="" type="checkbox"/> エネルギー対策特別会計	
実施形態	経産省（交付金）→ NEDO（委託）→ 事業者	
類型	<input type="checkbox"/> 複数課題プログラム / <input checked="" type="checkbox"/> 研究開発プロジェクト / <input type="checkbox"/> 研究資金制度	
事業目的	電子材料や医薬品中間体等の機能性化学品を、連続精密生産する技術の社会実装を加速するため、計算科学等を活用し高効率な合成プロセスを迅速に設計できる技術を開発する。	
事業内容 （アキティティ）	<p>（1）合成経路探索技術の開発 合成経路の検討に要する時間を大幅に短縮するため、データ駆動型人工知能(AI)を用いて、可能性のある合成経路候補を複数創出する。そして、コンピューター上のシミュレーションにより反応の進みやすさを評価し、絞り込みを行う。（想定目標例：30 以上の標的反応（基幹 5 反応）を含む標的化合物について、合成経路探索を行う。）</p> <p>（2）触媒最適化・副生成物高度循環プロセス設計技術の開発 生産性向上・資源効率化のため、固体触媒を設計し反応条件（温度、溶媒、流速等）を導出し以下の（3）以降に適用するとともに、余剰化合物の循環利用技術等を開発する。（想定目標例：副生成物を現行と同等以上の収率で原料等に戻すプロセスを開発する。）</p> <p>（3）合成経路候補の高速検証技術及び生産装置設計への適用技術の開発 合成経路候補の検証及び連続精密生産装置の設計のため、合成実験による高速検証技術、データ統合技術等の開発を行う。例えば、超小規模の合成実験により（1）の結果の妥当性を検証し、得られたデータを装置設計に適用するためのインターフェースを開発する。（想定目標例：標的化合物についての反応プロセスを 2 週間程度で開発できる手法を開発する。）</p> <p>（4）プロセスシミュレーションと実験データの連携による生産装置設計技術の開発 （1）～（3）の技術を活用しつつ連続精密生産装置の設計を迅速化・高度化するため、プロセスシミュレータ技術、機械学習の活用等による装置設計用データの精緻化及び連続精密生産装置設計の最適化指針を開発する。（想定目標例：既存の構築手法に比べてコストを削減するため、開発時間を 1/10 に短縮できるプロセス設計技術を開発する。）</p>	
研究開発目標（アウトプット目標）の指標		研究開発目標（アウトプット目標）
2023 年度 （中間目標）	連続精密生産できる合成経路数	2 種以上
2025 年度 （最終目標）	連続精密生産できる合成経路数	10 種以上
研究開発成果（アウトプット）の受け手		

機能性化学品(電子材料、染料・顔料、医薬品中間体等)製造関連企業

アウトカム指標		アウトカム目標
2028 年度	CO ₂ 削減量	491 万 t/年
2028 年度	廃棄物削減量	144 万 t/年
2028 年度	獲得市場規模	3.6 兆円

外部有識者の所見【技術評価】

本事業は機能性化学品の開発から生産までのビジネスを変革するものであり、産業 DX の展開の観点で意義が大きい。一方で、本事業に高い実効性を持たせるためにも、ターゲットとする機能性化学品や製造プロセス、課題解決の主軸とする技術をそれぞれ明確化して頂きたい。その上で、アウトプット目標として生産収率向上効果やコスト削減効果などを掲げて頂くことが望ましい。また、反応プロセスとデータ科学の両面を理解し、構築したシステムを取り扱うことができる IT 人材の層の薄さが懸念事項であるため、異分野からの登用を含めて、人材育成にも最大限注力して頂きたい。[第 66 回 NEDO 研究評価委員会]

上記所見を踏まえた対処方針

本追加テーマにおいては、機能性化学品の合成反応の多くを占める基幹 5 反応を対象とした連続精密生産プロセスの設計に必要な基盤技術を確立し、当該連続精密生産プロセスの社会実装を加速化することを目指している。既存事業との接続であるプロセスシミュレーションを踏まえた装置設計が主軸と考えるが、各要素はそれぞれ関連を有するものであり一体として進めることが必要である。追加テーマも、既存事業と同様、特定の化学品や特定の製造プロセスのみを対象とするものではないが、実際の研究実施においては、モデル化合物を複数設定し、生産収率向上等のアウトプット目標を示し、ターゲットに適応した技術を確立することを目指したい。

また、ご指摘のとおり人材の育成も重要であり、本事業の実施において、例えば化学メーカー、装置メーカー、IT ベンダや大学、研究機関等が一体となって技術開発に取り組むことで、知識、技術を補いあいながら、またデータ・情報の共有を図り互いの人材のレベル向上に繋がるよう努めたい。

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)



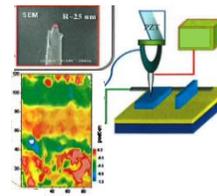
シミュレーション設計

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