

事業区分	経常研究 (基盤)	研究期間	令和6年度 ~ 令和8年	評価区分	事前評価
研究テーマ名 (副題)	データ駆動科学を活用した化学反応プロセスの研究 (シミュレーションとマテリアルズインフォマティクスを融合した次世代材料設計技術の開発)				
主管の機関 科 (研究室) 名	研究代表者名	工業技術センター 工業材料・環境科 重光 保博			

<県総合計画等での位置づけ>

長崎県総合計画 チェンジ&チャレンジ2025	柱2 力強い産業を育て、魅力あるしごとを生み出す 基本戦略2-1 新しい時代に対応した力強い産業を育てる 施策1 成長分野の新産業創出・育成
長崎県産業振興プラン2025	基本方針1 進化に挑戦する 施策の柱1-3 多様なイノベーションを創出する環境づくり 事業群1 産学官連携によるオープンイノベーションの推進

1 研究の概要

研究内容 (100文字)

物質化学分野において、シミュレーションと並ぶ先端技術であるデータ駆動科学の導入を図り、CO2リサイクル化学反応や光触媒反応等の効率的材料探索を行い、環境調和型化学工業の競争力強化につなげる。

研究項目	① データ駆動科学を実行する基盤環境の開発 ② データ駆動科学の材料化学への応用 ③ データ駆動科学の化学プロセスへの展開と市場開拓
------	--

2 研究の必要性

1) 社会的・経済的背景及びニーズ

シミュレーション技術は材料設計・創薬・半導体・乗用車といった製造業全般にわたって着実に浸透し、将来のものづくりに必要不可欠な技術となっている。長崎県は、その地理・産業構造特性に沿った海洋関連工学や再生可能エネルギー分野の産業振興を目指しており、材料物性解析・構造物解析・流体解析等の諸分野で最先端のシミュレーション技術の活躍が期待されている。県内のシミュレーション関連企業は、県内市場の確保に加えて県外市場の獲得を目指して、従来の技術では解析困難な複雑事象を扱うことができる最先端のシミュレーション技術を必要としている。このような状況下で、工業技術センターは、高度なシミュレーションの開発・導入・普及支援に対して、先導的役割を果たすことが求められる。

本研究では、データ駆動科学技術を既存のシミュレーション技術と連携させ、物質化学・材料化学分野への展開を目指す。データ駆動科学の活用を通じて、計算負荷の飛躍的低減と予測信頼性向上が期待される。共同研究機関の解析技術・実験知見と組み合わせ、CO2リサイクルや光触媒といった環境調和型化学工業プロセスの改善を提言し、あわせてAI融合シミュレーション技術の開発普及を共同実施する。

2) 国、他県、市町、民間での実施の状況または実施の可能性

物質材料化学分野におけるデータ駆動科学とシミュレーションの体系的連携研究は、大学・国立研究所・大手化学企業での先行事例にとどまっており、長崎県内の中小企業での先進的取組は今後の課題となっている。技術・人材の両面でハードルが高い当該分野において、工業技術センターが産学官連携役を果たすことで効率的な研究推進を図る。材料シミュレーションに関しては、すでに学術論文・競争的資金獲得等のエビデンスを有している。

3 効率性 (研究項目と内容・方法)

研究項目	研究内容・方法	活動指標	R					単位
			6	7	8	9	10	
①	データ駆動科学を実行する基盤環境の開発実装	構築・実装	目標 実績	1 1				件数
②	データ駆動科学の材料化学への応用	研究活動	目標 実績	1 1				件数
③	データ駆動科学の化学プロセスへの展開と市場開拓	支援	目標 実績		3			件数

1) 参加研究機関等の役割分担

工業技術センター； シミュレーション構築・実装・実行、各参画機関との連携調整
 公設機関（長崎県産業技術センター、熊本県産業技術センター）； 実験（光触媒反応）・実験（CNF材料開発）
 県内企業・県外企業； 実験（光触媒反応）、実験（水処理プラント）、データ駆動解析技術
 学術機関（長崎大、北海道大、東大生研）； 実験（ケミカルリサイクル反応）、データ駆動解析技術

2) 予算

研究予算 (千円)	計 (千円)	人件費 (千円)	研究費 (千円)	財源			
				国庫	県債	その他	一財
全体予算	12,210	9,210	3,000				3,000
R6年度	4,070	3,070	1,000				1,000
R7年度	4,070	3,070	1,000				1,000
R8年度	4,070	3,070	1,000				1,000

※過去の年度は実績、当該年度は現計予算、次年度以降は案
 ※人件費は職員人件費の見積額

(研究開発の途中で見直した事項)

4 有効性

研究項目	成果指標	目標	実績	R					得られる成果の補足説明等
				6	7	8	9	10	
①	アルゴリズム考案・実装	2件			○		/	/	データサイエンス技術を化学分野へ展開するための環境構築
②	対外発表・競争的資金獲得・特許出願	9件				○	/	/	研究成果の客観的なエビデンス
③	県内企業への技術支援	2件				○	/	/	マテリアルズインフォマティクスの県内企業への技術移転

1) 従来技術・先行技術と比較した新規性、優位性

データ駆動解析は、画像処理・機械制御・医用工学・金融工学等、広範な産業に急速に浸透している。しかし、物質化学・材料化学分野への展開（マテリアルズインフォマティクス）は、体系的な取り組みに乏しく、その活用は発展途上である。この理由として、機械学習のインプットとなる実験データの大量蓄積が困難なことが主因のひとつとなっている。
 本研究では、いままで取り組んできたシミュレーション技術を活用したデータ収集を行い、連携機関から提供される実験データの効率的補完を行う。
 物質材料化学分野におけるデータ駆動科学とシミュレーションの体系的連携研究は、大学や国立研究所での先行事例はあるものの、九州地区の公設試では前例がなく、独自性が高いと考える。

2) 成果の普及

■ 研究成果の社会・経済・県民等への還元シナリオ

共同研究企業に対しては、直接的な技術交流を通じた商用化を目指す。

既に導入済みの対象企業に対しては、その効率的活用法を講習会を通じて支援していく。

データ駆動科学を使った材料開発・化学プラント制御に興味を示す新規参入企業に対しては、研究会を通じた広報活動をこころなう。

■ 研究成果による社会・経済・県民等への波及効果（経済効果、県民の生活・環境の質の向上、行政施策への貢献等）の見込み

経済的還元： データ駆動科学の潜在性は、重厚長大産業から頭脳集約型産業への根本的変貌である。県内関連企業への普及支援を通じて、県内解析ニーズの確保・県外解析ニーズへの積極的進出に貢献する。また、関連ソフトウェア技術を商用化することにより、ビジネス展開の可能性を探る。

社会的還元： デジタル化社会の中核技術であるデータ駆動科学の導入促進は、モノづくり産業にとどまらず、学術活動や教育活動にわたる広範な社会的インパクトが期待できる。

(研究開発の途中で見直した事項)

研究評価の概要

種類	自己評価	研究評価委員会
事前	<p>(令和5年度) 評価結果 (総合評価段階: A)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 S <p>本県は、その地理的特異性を生かした海洋関連工学・再生可能エネルギー分野の振興を図っているが、SDGs関連製造業は機械工学と材料工学が複雑に融合した総合技術である。AIと融合したシミュレーション解析は重要な役割を果たすと期待されるが、SDGs関連分野への展開、特に材料設計・化学工学プロセスへの展開は不十分な現状にあり、取組強化が必要と考える。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・効率性 A <p>データ駆動科学・計算科学・材料プロセス技術について、産学官から各専門家が参加する。技術強化・県内企業支援の両面に対応できる研究開発チームを構築しており、効率的な取組が期待できる。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・有効性 A <p>AIと融合したシミュレーション技術を開発・導入することで、従来は困難であった複雑事象の解析を可能とする。本研究の先駆的成果事例を講習会・セミナー等を通じて紹介し、当該技術の県内企業への普及・技術力向上を図る。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・総合評価 A <p>従来のシミュレーション技術では解析困難な複雑事象に対して、AIと融合したシミュレーション技術による解析を実現する。新たな解析ニーズの掘り起こしを通じて、県内解析企業の県内市場確保・県外市場獲得に貢献することを目指す。日進月歩で進歩しているシミュレーション技術、特にAIとの融合技術において、技術競争力維持の観点からも必要性は高いと考える。</p>	<p>(令和5年度) 評価結果 (総合評価段階: S)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 S <p>本提案による材料・機能開発は、研究の効率化や新規発見にもつながることが期待され、SDGs関連製造業での技術ニーズも高いことから、必要性は非常に高い。また、国策として推進されているデータサイエンス科学は今後本県においても必要となる技術であり公設試が取り組む意義も高い。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・効率性 A <p>各分野の専門家が参加する研究体制を構築しており、それぞれの役割、研究推進方法も明確であり、効率的な研究の推進につながることが期待される。ただし、研究内容が多く、総花的であるので必要に応じてテーマの絞り込みの検討なども必要になると考えられる。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・有効性 S <p>県内企業にAIベースのシミュレーション技術を導入することができ、技術力の向上に寄与するものである。カーボンニュートラル関連技術のみならず他への展開も期待される研究である。本基盤研究をもとに本県における普及が推進されることを期待する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・総合評価 S <p>AIと融合したシミュレーション技術は学術性が高く、将来性のある価値の高い研究であり、カーボンニュートラルなどの産業の技術力向上にも役立つと期待される。また、企業との協業体制も構築されており研究成果の実用化につながることが期待され、積極的に推進していただきたい。</p> <p>対応 研究効率性を改善するため、データ駆動科学が有効と判断されるサブテーマを早期に選び出し、優先的なメリハリを付けて研究を推進する。</p>
途中	<p>(令和 年度) 評価結果 (総合評価段階:)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 ・効率性 ・有効性 ・総合評価 	<p>(令和 年度) 評価結果 (総合評価段階:)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 ・効率性 ・有効性 ・総合評価 <p>対応</p>
事後	<p>(令和 年度) 評価結果 (総合評価段階:)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 ・効率性 ・有効性 ・総合評価 	<p>(令和 年度) 評価結果 (総合評価段階:)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・必要性 ・効率性 ・有効性 ・総合評価 <p>対応</p>