

マテリアルズ・インフォマティクスを活用 材料開発の新たな効率化技術を確立 特性向上や製品開発の迅速化を実現

アキレス株式会社(本社:東京都新宿区、社長:日景一郎)は、山形大学との共同研究により、マテリアルズ・インフォマティクス(Materials Informatics: 以下、MI)を活用した、材料開発の新たな効率化技術^{※1}を確立しました。

近年、AI 技術を活用したデータドリブン型の研究開発が注目を集めています。当社では、これまで蓄積してきた実験データを最大限に活用し、効率的かつ効果的な研究を推進する方法を模索してきました。その一環として、山形大学理学部の鈴木郁美教授、原一夫教授と MI を活用した共同研究を行い、高分子材料分野における新たなデータ解析技術を開発しました。MI は機械学習などの AI 技術やデータサイエンスを用いて新規材料の探索や材料特性の予測を行い、材料開発の効率化や特性向上を迅速化するアプローチです。

今回、当社が確立した技術は、MI によるデータ解析で新規材料の開発や既存材料の性能改善にかかる時間とコストを削減し、研究開発の効率性を飛躍的に向上させるとともに、製品開発の迅速化にもつながるものとなります。本技術は以下の二つの予測モデルを中核としています。

1. 物性予測モデル

ガウス過程回帰^{※2}と呼ばれる手法を用いて、実験結果の物性を高精度で予測することを可能にしました。これにより求める特性を持った材料の探索を迅速に行えるようになります。

2. 成功/失敗予測モデル

ランダムフォレスト^{※2}と呼ばれる手法を用いて、実験結果を分類することで、成功する確率を事前に予測することを可能にしました。これにより成功率の高い実験を優先し、無駄な実験を削減できるようになります。過去の成功したデータだけでなく、失敗したデータも加えたことで予測の精度が向上。長年の研究の積み重ねを最大限に活かしています。

共同研究では、ポリウレタンフォームの実験データを用いて本技術の有効性の検証も行いました。その結果、本技術を用いて材料の物性を高精度に予測し、効率良く実験を進めることで、従来の開発方法では1年以上かけても得られなかった物性が3カ月ほどで得られるようになりました。MIを活用した材料開発技術は金属や無機材料の分野で先行事例があるものの、高分子系有機材料の分野ではまだ少なく、本技術は成功/失敗予測モデルを組み込んだものとして先駆的な取り組みとなります^{※3}。また、本技術は過去の実験データや知見を学習することにより、研究のスキルや熟練度に依存しない設計となっており、経験豊富な研究者に限らず高い成果を得ることが可能です。

※1 「分類機能を備えた物性予測方法」としてタイムスタンプ保管済み。

※2 「ガウス過程回帰」「ランダムフォレスト」はともに AI の機械学習に広く使われるアルゴリズム。

※3 当社調べ。

当社は本技術を活かして研究リソースを効果的に配分し、開発業務の効率化を行っていくほか、工場における加工条件の最適化などにも応用を図り、お客さまや社会のニーズにより早くお応えする製品づくりを進めてまいります。

技術の概要

技術名	分類機能を備えた物性予測方法
特長	■マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の活用で材料開発を効率化 MI によるデータ解析で新規材料の開発や既存材料の性能改善にかかる時間とコストを削減。研究開発の効率性を飛躍的に向上させるとともに、製品開発の迅速化を実現します。従来の手法より高精度に材料の物性予測が可能であることを確認しています。
	■経験豊富な研究者に限らず高い成果を得ることが可能 過去の実験データや知見を学習することにより、研究のスキルや熟練度に依存しない設計となっており、知識や経験に関わりなく使用できます。
活用	本技術は社内限定ツールとして高分子系有機材料の開発に使用。工場における加工条件の最適化などにも応用を進めていきます。上記技術名でタイムスタンプ保管済み。

本件に関するお問い合わせ先	媒体からのお問い合わせ先
研究開発本部 第三グループ AI チーム 副部長 原澤 純一 TEL:0284-73-9317	広報部 広報課 渡利 愛美 TEL:03-5338-8228