

2022年6月30日

各位

NEDO (国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構)  
国立研究開発法人産業技術総合研究所  
先端素材高速開発技術研究組合  
日本ゼオン株式会社

## 複数の AI を活用し、複雑な材料データからさまざまな機能を予測する技術を開発 — 配合条件の選定から成形加工・評価までの材料開発を大幅に加速 —

NEDO の「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」において、産業技術総合研究所、先端素材高速開発技術研究組合、日本ゼオン株式会社は、複数の人工知能 (AI) を用いることで複雑な構造を持つ材料のデータを処理し、高速・高精度にさまざまな機能を予測する技術を開発しました。

今回開発したマルチモーダル AI 技術は、母材・添加剤・充填剤といったさまざまな配合を持つ材料 (複雑材料系) に対して、深層学習 (ディープラーニング) を適用する新しい技術です。画像や分光スペクトルといった異なる複数のデータを計測・統合することで、従来の AI 技術を適用できなかった複雑材料系も、2 万分の 1 以下の所要時間で異なる複数の特性の高精度な予測が可能になります。これは、膨大な条件から選定・成形加工・評価を行う材料開発における大幅な高度化・高速化につながります。

### 1. 概要

材料開発のさらなる高度化・高速化に向けて、現在、機械学習や深層学習 (ディープラーニング) ※1 などの人工知能 (AI) 技術を活用したデータ駆動型の材料開発が盛んに行われています。これまでは、単純な化学構造を持つ低分子材料や無機材料に対して、元素や化学結合を元にした AI 技術 ※2 によって、材料が持つ機能が予測されてきました。しかし、多くの材料系は多数の成分を含む複雑材料系であるため、比較的単純な元素や化学結合だけでは機能を予測することが困難でした。また、物理・化学構造が複雑に変化し、求められる機能も多面的になるため、材料の特徴を捉えた画像などの単独の計測データを用いた従来の AI 技術では、予測できる特徴が限定的で、狭い範囲しか適用できませんでした (図 1)。

このような背景のもと、NEDO (国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構) は「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト ※3」(2016 年度～2022 年度) で、機能性材料開発の高速化を目指し、データ駆動を活用した研究を進めています。本事業で国立研究開発法人産業技術総合研究所 (産総研) は、先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)、日本ゼオン株式会社 (日本ゼオン) と共同で、より汎用 (はんよう) 性の高い、複雑な構造を持つ材料へ適用できる革新的なマルチモーダル AI ※4 技術を開発しました。これは図 1 に示すデータ駆動型の技術開発において、多面的な機能を持つ複雑材料を扱える右上の領域に位置する技術です。

マルチモーダル AI 技術では、画像や分光スペクトルといった異なる種類のデータを計測・統合し、物理・化学構造の情報を広く AI に取り込むことができます (図 2)。これによって、母材、添加剤、充填剤をさまざまな配合で持つために従来の AI 技術を適用できなかった複雑材料系について、その特性予測に国内外で初めて成功しました。マルチモーダル AI 技術では、母材 5 種、添加剤 2 種、充填剤 3 種の組成のケースにおいては、1 日で約 10 万条件分の複数の計測データの生成と特性の予測結果の出力が可能になります。開発した AI 技術を用いることで、実際に実験に要する時間と比較して 2 万分の 1 以下の時間で特性予測が可能になり、膨大な配合条件などから選定・成形加工・評価を行う材料開発において大幅な期間短縮につながります。

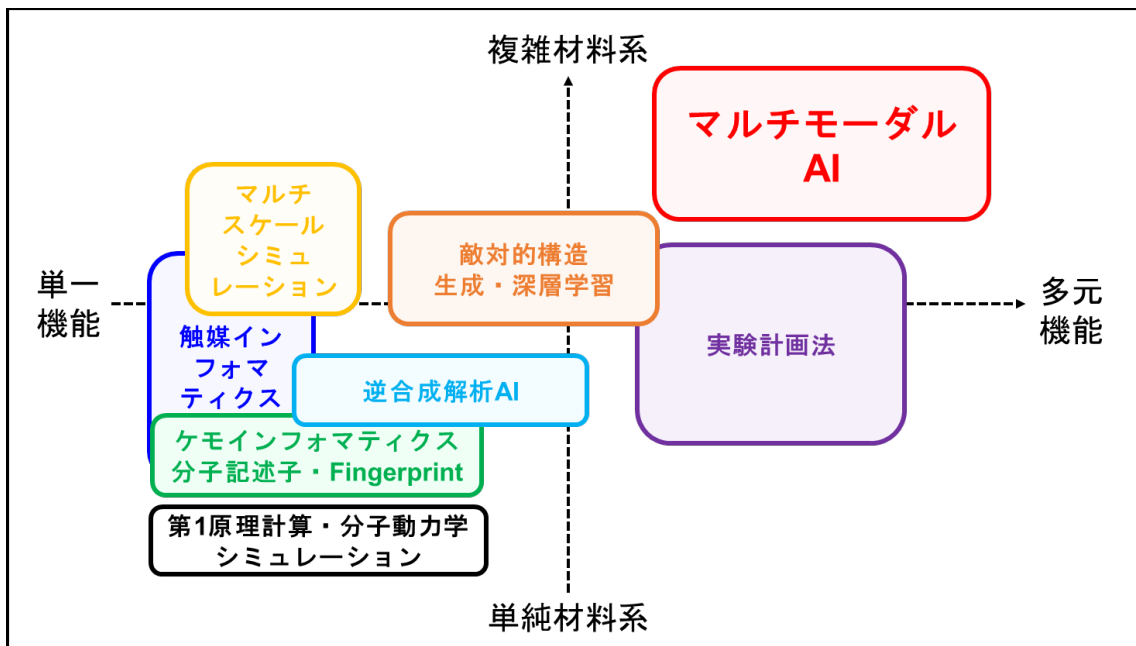


図1 データ駆動型の技術開発の位置づけ

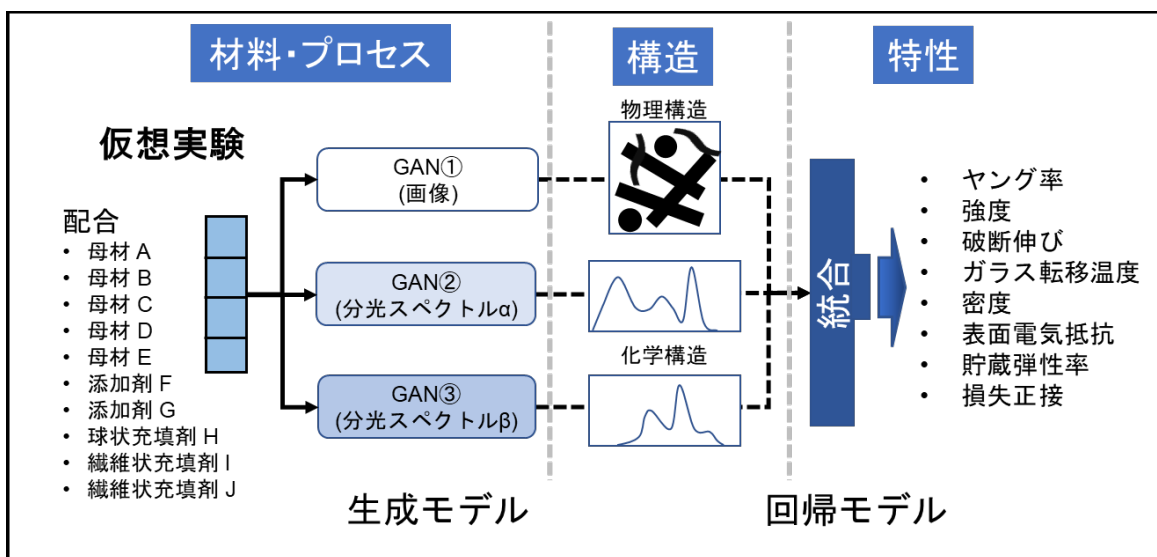


図2 開発した汎用仮想実験 AI の概要

2. 今回の成果

【1】AI による複数の計測データの生成

今回開発した技術では、複数の異なる計測データへ敵対的生成ネットワーク (GAN) ※5 を適用しました (図 2)。GAN は AI 技術の一種で、複雑なデータを持つ特徴を学習し、疑似データとして画像などのデータを生成することができます。今回は GAN を拡張させ、対応する配合における材料の物理・化学構造を反映した画像 (図 3-1) や分光スペクトル (図 3-2) といった複数の計測データの生成を実現しました。

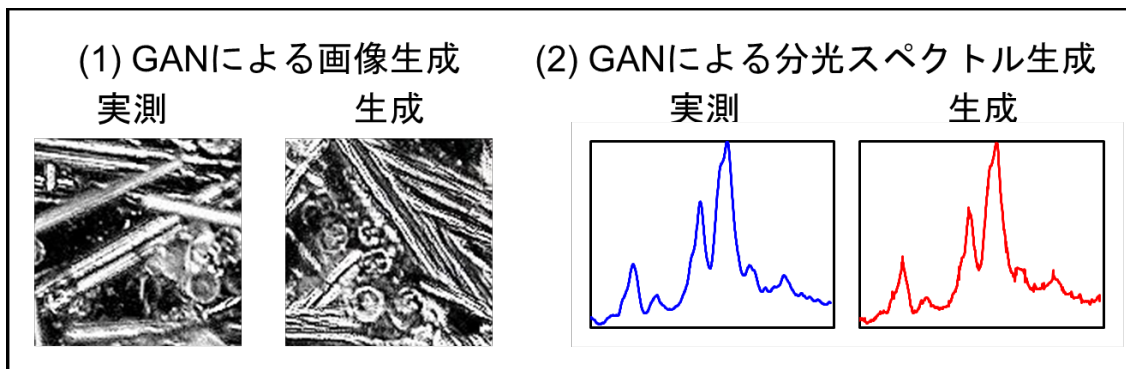


図3 GANを用いた画像や分光スペクトルの生成

## 【2】複数のAIモデルを束ねた統合AIによる特性の予測

生成した異なる計測データを統合し、AIに取り込んで特性の予測を行いました(図2)。従来のような単独の計測のみの計測データを用いたAIと比較して、複数のAIを用いたモデルでは予測精度が向上しました(図4)。単独の計測からなるAIでは、材料の物理構造や・化学構造の限られた情報しか得られないのに対し、複数のAIを用いる本技術では、多次元で幅広い情報を獲得し得る仕組みであるため、これまで困難であった複雑材料系へのAIの適用実現につながります。

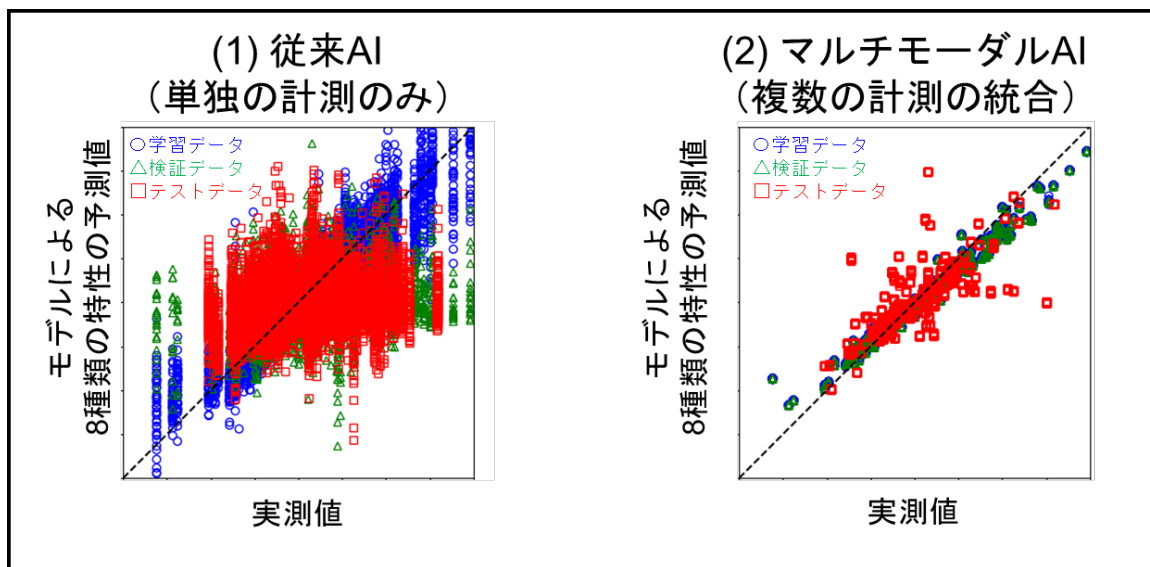


図4 複数のAIを用いた特性の予測結果

従来の単独と複数(マルチモーダル)のAI技術を用いて、任意の材料について、異なる8種類の特性を予測しました(図2と図5)。単独のAIでは、学習に用いたデータを元に予測しようとするものの、獲得できる材料情報が少ないためにテストデータ※6による予測が極めて低い精度を示しました。これに対しマルチモーダルAIでは、テストデータにおいても獲得できる材料情報が多いため、特性を高い精度で予測できることがわかり、従来のAI技術と比較して、より複雑・複合的な材料開発への適用を実現しました。

構築したAIモデルを用いると、非常に多様な条件における特性の変化を調べることができ、異なる成分の配合における特性をAIにより出力し、可視化しました(図6)。例えば成分Bに注目すると、添加量の増加に伴って特性Xの予測値は低下するのに対し特性Yの予測値は向上し、その寄与が大きいことがわかります。本技術は、多数の成分の配合条件などを組み合わせて特性を制御する際に、特性の変化を確認できるだけではなく、相反する特性がある場合には、両者の最適組成を制御したり、要求される特性の上限と下限を見極めたり、製造コストなどを考慮しながら配合やプロセスを調整する上でも有効です。マルチモーダルAIによる特性予測は、実際の材料の成形加工や評価と比較して、極めて高速に実行することができます。本技術は1日あたり、異なる配合条件などに対して約10万件の予測が可能です。この速さは実験に要する時間の2万分の1以下に相当します。なお、本研究におけるAIの計算は産総研AI橋渡しクラウド(ABC1)※7を使用して行いました。

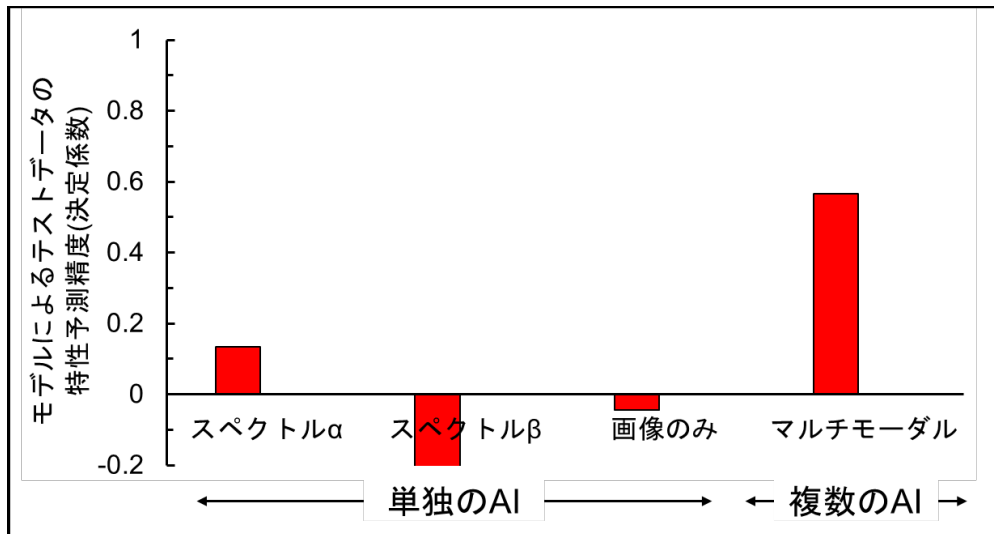


図5 複数のAIを用いた特性の予測精度の向上

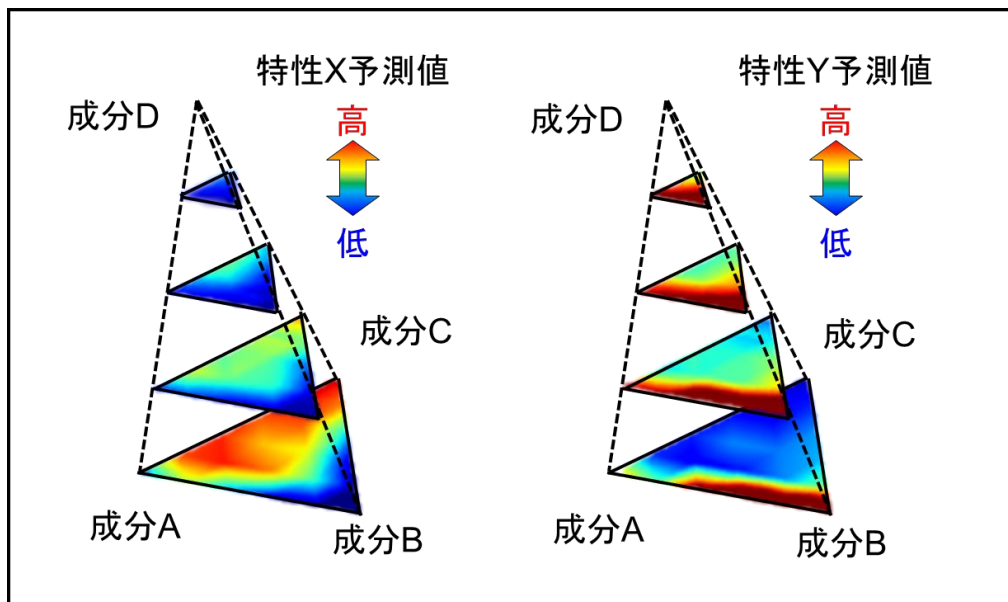


図6 予測特性の推移の可視化

### 3. 今後の予定

開発した新規マルチモーダル AI技術を元に、幅広い材料系へと適用可能な技術開発に取り組み、高分子複合材料、繊維強化プラスチック※8、ファインセラミックス※9、マルチ材料※10といった複雑材料系のマテリアルズ・インフォマティクス※11 およびプロセス・インフォマティクス※12を推進します。本技術をさらに発展させて、複雑な材料系や製造工程の高速・効果的な探索、各組織での専門技術の継承や創出を通じ、日本の産業競争力強化へとつなげていきます。

#### 【注釈】

※1 深層学習(ディープラーニング)

コンピューターに大量のデータを与えて複雑な特徴を認識させる技術で、人工知能分野に広く用いられています。その中で人間の神経回路(ニューロン)を模したシステムであるニューラルネットワークを多層にした手法をディープラーニングと呼んでいます。入力と出力の複雑な関係を結び付け、分類や予測したい問題に広く適用することができます。

※2 元素や化学結合を元にした AI 技術

例えば、低分子化合物や創薬の分野では、元素や化学結合から材料の特性や生理活性を予測する技術は、ケモインフォマティクスと呼ばれています。元素や化学結合を表した文字列、フィンガープリントや分子記述子と呼ばれるデータなどを用いた機械学習が行われてきました。

## ※3 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

事業期間:2016年度~2022年度

事業ページ:[https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP\\_100119.html](https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html)

## ※4 マルチモーダル AI

人間が五感という異なる感覚器で外部から入ってくる複数の情報を処理して高度な判断を行うように、複数のデータを組み合わせることで入力と出力の複雑な関係を結び付け、分類や予測したい問題に適用する人工知能技術のことです。

## ※5 敵対的生成ネットワーク(GAN)

GANはGenerative Adversarial Networksの略です。ニューラルネットワークを用いて、入力されたデータや画像から新しい疑似データを生成するモデルをGANと呼んでいます。例えば、人の顔の持つ特徴を抽出して学習することで、実在しない人物の写真を生成することができます。二つのニューラルネットワークを互いに競わせて入力データの学習を進めていくことから敵対的ネットワークと呼ばれています。

## ※6 学習データ、検証データ、テストデータ

AIを賢くするためにモデルに与えるデータは学習データ、学習データと異なるデータを与えた際の挙動を見てモデルの調整に使うデータは検証データ、学習・検証データに用いていない条件でモデルの性能を確かめるために使われるデータはテストデータと呼ばれています。ここではテストデータとして学習・検証データで全く用いていない材料の配合のデータを使い、構築したモデルの性能を調べています。

## ※7 産総研 AI 橋渡しクラウド(ABCI)

ABCIはAI Bridging Cloud Infrastructureの略称です。人工知能技術開発に必要となる計算資源として、世界最大級の人工知能クラウドプラットフォームです。産総研が2018年8月に運用を開始しました。

## ※8 繊維強化プラスチック

ガラス繊維や炭素繊維を複合化して補強させたプラスチックを指します。エポキシなどの熱硬化性樹脂やポリプロピレンなどの熱可塑性樹脂と組み合わせると金属代替に向けた軽量で力学特性の優れた材料として自動車、建築、航空産業などで利用されています。

## ※9 ファインセラミックス

セラミックスのうち、材料の純度と精度を高め、欠陥制御、粒界構造制御などを行うことで、耐熱、耐摩擦、耐食性や電気絶縁性などの優れた物理・化学特性を持つものを指します。半導体デバイスや自動車、情報通信、産業機械、医療などさまざまな分野で利用されています。

## ※10 マルチマテリアル

鋼材やアルミニウムをはじめとする金属および炭素繊維複合材料などの樹脂材料を組み合わせることで、軽量化や高強度化を実現する手法です。主に自動車や航空機など輸送機器の軽量化に重要な技術です。

## ※11 マテリアルズ・インフォマティクス

材料(マテリアル)に関する実験やシミュレーション結果のデータを情報科学(インフォマティクス)の手法を用いて解析することで、効率的で高速な新材料探索を行う取り組みのことです。

## ※12 プロセス・インフォマティクス

材料の小スケール試作や工業的なスケールアップに至るまで、多様な製造プロセスにおける材料開発をデータ科学と融合させて解析する取り組みのことです。製造条件の決定や製品化までの試行錯誤の短縮、特定の職人に属人化した技術のデジタル化においても重要な技術です。

以上

本件に関するお問い合わせ先

日本ゼオン株式会社 コーポレートサステイナビリティ統括部門 広報室 電話:03-3216-2747