

高分子材料の開発に人工知能を活用

◆高分子材料開発における人工知能活用に関するワークショップ

近年の人工知能（AI）の発展には、ビッグデータの深層学習の貢献が大きいですが、一般には、AIという用語は広い意味で情報科学的手法と捉えられている。高分子化学の分野では、ビッグデータを得ること自体が難しいため、AI活用では、少ないデータをどう使うか、化学構造をどう捉えるか、という視点が大切になる。

2019年3月20日、高分子学会関東支部は「AIは高分子研究をどのように変えるか：シーズから迫るAIの本質」と題するワークショップを開催した。その中で、民間企業の高分子材料開発に関する成功例を3件を紹介する。

◆高分子材料開発へのAI応用には少ないデータを活かすことが大切

DICの今田知之サイエンティストの「データ駆動型科学による高機能フェノール樹脂の開発」は、AIを用いた新規材料の開発事例である。厚膜塗布時も柔軟性があり、高い耐熱性、高いアルカリ溶解性をあわせもつフェノール樹脂の開発を目指している。過去に得られた150件のデータを用い、ランダムフォレストや多層パーセプトロンなどのAI手法により、高分子の化学構造から物性を予測モデルを作成した。それを用いて、好ましい特性をもつ新規材料の開発に成功している。

昭和電工の南拓也リサーチャーらの「ベイズ最適化を活用した耐熱性ポリマーの効率的設計」は、高分子材料の探索手段の提案である。データベースに化学構造とガラス転移点（ T_g ）の記載のある417件の高分子を仮想の検討対象とした。10件のデータから、より高い T_g を持つ高分子を予測し、次の高分子を選択する過程を繰り返す。この選択にAI手法であるベイズ最適化を用いると、最も高い T_g をもつ高分子に、他の方法より速く到達することができた。

コニカミノルタの池田祐子博士らの「マテリアルズ・インフォマティクスを用いた高分子複合材料の弾性率の予測モデル構築」は、化学構造ではなく、市販のポリプロピレンやフィラーの銘柄とその混合比を入力データとした。PLS回帰を用いて、180件のデータから弾性率を良好に予測することが可能になった。

高分子材料の開発でも、AI利用の成果がみられるようになった。【戸潤一孔】