

機械学習のソフトマターへの実践的活用

物質・材料研究機構 ○内藤昌信

新材料の開発に関わる情報は増え続けているにもかかわらず、一般的に新材料の開発期間は10~20年かかると言われている。そのような市場ニーズに応えるため、近年、新材料の市場投入までの時間と開発コストの両方を削減するために、機械学習を用いた材料探索技術が、高性能な新機能材料の発見に重要な役割を果たすようになってきた。通常、機械学習は、認識されていない傾向やパターンを特定し、新しい候補材料を提案するために、そのアルゴリズムを大規模なデータベース上で訓練する必要がある。しかし、材料科学の分野では、実験用のデータセットを構築するためにはコストがかかることが多く、また、データが欠落していたり、疎なデータが含まれていたりして、意図しない誤差が発生することが問題となる。

本講演では、実験データセットが非常に限られた場合に、機械学習をどのように適用するか的事例として、構造材料用高強度接着剤の予測と最適化について、我々の最近の結果について紹介する。具体的には、実験系の設計、能動学習パイプライン、ベイズ最適化を組み合わせることで、材料探索にかかる時間を大幅に短縮することに成功した事例について述べる。特に、最初は非常に少ない、あるいは既存のデータセットから出発し、それを元に機械学習モデルを構築し、最適化を繰り返すことで候補材料と反応条件の膨大な組み合わせから極めて強力な構造用接着剤の設計・開発を加速させるというアクティブラーニングという手法についてご紹介する。

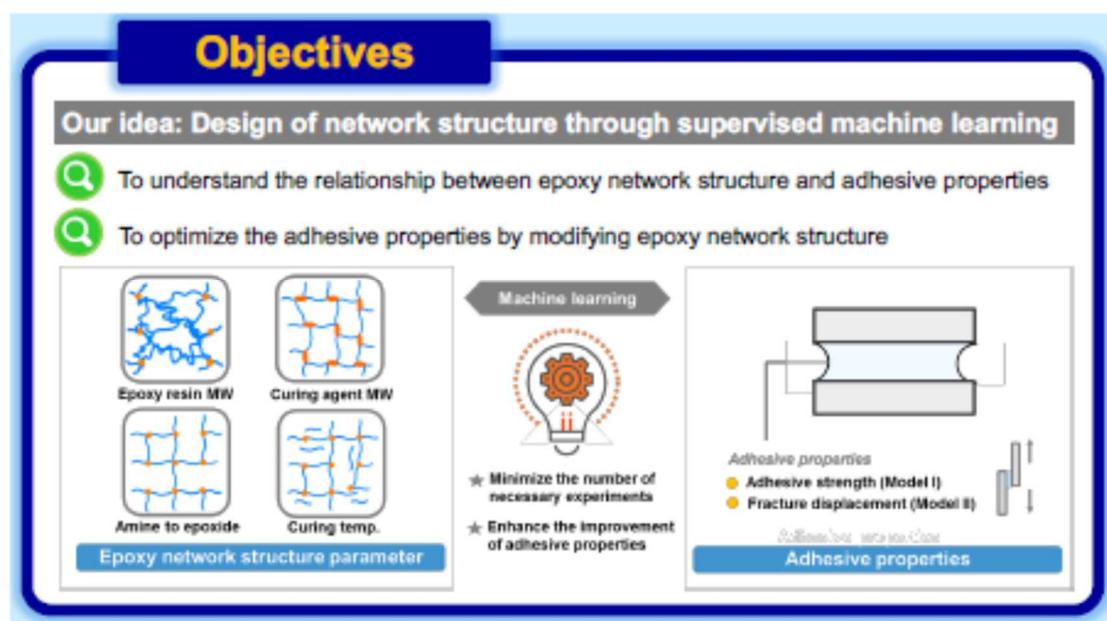


図1 本研究のコンセプト

1) S.Pruksawan, et al., Sci. Tech. Adv. Matter., 20, 1010 (2019).

Practical application of machine learning for soft matters

Naito Masanobu (Research and Services Division of Materials Data and Integrated System (MaDIS)
National Institute for Materials Science (NIMS), 1-2-1 Sengen, Tsukuba Ibaraki 305-0047, Japan,

¹Tel: +81-29-860-4783, E-mail: NAITO.Masanobu@nims.go.jp