

# A1-08 複雑・複合材料系への AI 技術の開拓

室賀 駿 (産総研 ナノカーボンデバイス研究センター)

材料や製造プロセス開発における高速化・高度化が求められ、データ科学の活用した技術開発は盛んになっている<sup>1)</sup>。米国 Materials Genome Initiative から 10 年以上たった昨今において、元素や分子構造に由来した記述子を用いた AI 技術<sup>2)</sup>に関して大きく発展してきた。一方で現実の身の回りにある複雑・複合材料系は多数の成分を含み、微視的・巨視的な多様な構造をとるため、従来の AI 技術の適用は困難であった。こうした背景を元に産総研では「ともに挑む。つぎを創る。」のビジョンの下に、産業界と連携して材料・計測・解析の研究者を束ねて、複雑・複合材料系への AI 技術を目指した研究を大きく推進してきた<sup>3-5)</sup>。

その中でも複雑・複合材料系への AI を目指した概念であるマルチモーダル AI に関する最近の取り組みを紹介する。マルチモーダル AI とは、人間が視覚や聴覚といった複数の器官を用いて物事を判断するように推論を行う手法である。マーケティングやロボティクス等の一部分野で発展傾向であるが、素材産業においては全くの未確立であった。我々は複雑・複合材料系への AI 適用を目指したマルチモーダル AI の概念を提唱した<sup>5)</sup>。コンセ

プトは元素などで表現できない複雑な材料において、物理・化学構造を反映した計測データを束ねることで複雑な材料の特徴をモデルが獲得させるものである。例えば高分子複合材料の場合は、フィラーの配置などの物理構造を顕微鏡画像によって検知し、モノマーや添加成分の化学構造や相互作用をスペクトルから検知することを狙っている。実際に深層学習の一種である生成モデルにより組成物の情報に対応する画像やスペクトルを生成し、統合したモデルから力学特性などの回帰分析を行うことでマルチモーダル AI のコンセプトを実証した。これにより例えば、相反する特性がある時の最適条件の探索や、要求特性と製造コストを考慮しながら配合やプロセスを調整する上で有効である。こうした取り組みを元に現在、複合材料、有機材料、無機材料、などの多数の分野に波及させるために広く検討を進めており、素材産業の産業競争力強化に資する AI 社会実装加速に向け取り組んでいる。

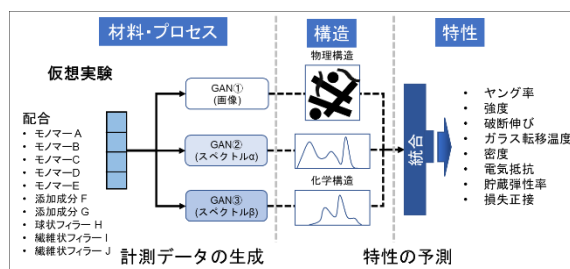


図 複雑・複合材料系におけるマルチモーダル AI の概念図<sup>5)</sup>

1) 室賀駿, 「研究総覧: 材料業界を取り巻くマテリアルズ・プロセスインフォマティクスの潮流と未来」 *成形加工*, **2022**, 34, 250.

2) S. Muroga et al., *FNTG*, **2021**. 室賀ほか, *成形加工シンポジウム'21*, **2021**. (講演賞)

3) 産総研ニュースリリース(2021/10/19)「人工知能により材料の構造画像を生成し、物性を予測する技術を開発—AI 技術で扱える材料を広げ、材料開発加速へ—」

4) T. Honda<sup>†</sup>, S. Muroga<sup>†</sup>, H. Nakajima<sup>†</sup>, et al., *Commun. Mater.*, **2021**, 2, 88.

5) 産総研ニュースリリース(2022/6/30)「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—」

## PROFILE

室賀 駿 (国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域 ナノカーボンデバイス研究センター 研究員)

2019 年 3 月京都大学工学研究科化学工学専攻博士課程修了・博士(工学)、日本学術振興会特別研究員(DC1)、同年 4 月産業技術総合研究所ナノチューブ実用化研究センター入所、2022 年 4 月より同ナノカーボンデバイス研究センター。高分子の評価の知見を元に、実験の立場からのマテリアルズ・インフォマティクス及びプロセス・インフォマティクスを推進。高分子に限らずナノカーボン、ナノセルロース、セラミックス等の材料や製造プロセスを対象に幅広く関わる。主な所属学協会はプラスチック成形加工学会、応用物理学会、高分子学会、化学工学会。E-mail: muroga-sh@aist.go.jp