

2020年4月13日

昭和電工株式会社

国立研究開発法人 産業技術総合研究所

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

先端素材高速開発技術研究組合

人工知能(AI)の活用によりフレキシブル透明フィルム開発の迅速化を実証

昭和電工株式会社(社長:森川 宏平 以下、昭和電工)、国立研究開発法人 産業技術総合研究所(理事長:石村 和彦 以下、産総研)、国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構(理事長:石塚 博昭 以下、NEDO)、先端素材高速開発技術研究組合(理事長:腰塚 國博 以下、ADMAT)は、フレキシブル透明フィルム^(注1)の開発に人工知能(AI)を活用することにより、要求特性を満たすフィルムの実験回数を25分の1以下に低減できることを実証いたしました。

本開発は、NEDOの「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(以下、超超PJ)」の委託事業として実施しています。超超PJでは、経験知をもとにした従来の材料開発からの脱却を目指し、AIやマルチスケールシミュレーション^(注2)を積極的に活用することで、従来の材料開発と比較して実験回数を削減し、開発期間を大幅短縮することを目指しています。

昭和電工と産総研、ADMATは、モバイル機器(図1)などの開発に欠かせないフレキシブル透明フィルムの設計にAIを活用し、要求特性を満たすポリマーの探索に取り組んでいます。はじめに熟練研究員が27種類のフィルムを作成し、その原料の分子構造、モル比などの化学的な情報をExtended Connectivity Circular Fingerprints (ECFP)^(注3)という手法を応用して説明変数^(注4)に落とし込み、目的変数^(注5)にはトレードオフの関係にあり並立の難しい物性である換算透過率^(注6)、破断応力、伸びの3項目を選択し、作成したフィルムの実測データをAIに学習させました。

その後、説明変数を網羅的に割り当てたデータを用意して、偏差値概念^(注7)を導入したAIにこれら3項目が等しい割合で最大となる配合を予測させ、その予測の通りに3種類のフィルムを作成し、AI学習データを作製した熟練研究員が自己の知見に基づき作成した25種類のフィルムの物性値とを比較しました(図2)。

この結果、AIが予測した配合で作成した3種類のフィルムの物性値は、いずれも比較実験として熟練研究員が作成した25種類のフィルムの物性値よりも優れていることが判明しました(図3)。研究員による開発に比べて25分の1以下の実験回数でより高い物性値のフィルム(図4)を得られたことから、大幅な開発期間の短縮が可能であることが実証できただけでなく、研究員の経験知をもとに作成した製品を超える製品が開発できる可能性があることも実証しました。

今後は本技術をさらに高度化させ、要求特性を満たしながらより良い物性値となる配合比をAIが提案できるように開発を進めてまいります。なお、本件の詳細は、超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ) 成果報告会のホームページにて本日発表いたしました。

以上

(注1)フレキシブル透明フィルム:自由に歪曲できる透明なフィルムであり、タッチパネル用透明伝導性基材、フレキシブル回路用基材、フレキシブルディスプレイ用基材など幅広い分野への利用が考えられます。

(注2)マルチスケールシミュレーション:ミクロ領域では、原子、分子、マクロ領域で流体や連続体までの幅広い範囲を密度、流速密度、エネルギー密度を共通言語として双方向につなげたシミュレーションのこと。詳細は下記を参照ください。

URL:<https://www.admat.or.jp/technology>

URL:https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2019/pr20190401_2/pr20190401_2.html

(注3)Extended Connectivity Circular Fingerprints (ECFP):官能基などの部分構造の種類・数を数値化して分子の特徴を表現する方法。詳細は下記の論文を参照ください。

D. Rogers, M. Hahn, J. Chem. Inf. Model. 50, 742 (2010).

T. Minami, et al., MRS Advances, 3(49), 2975 (2018)

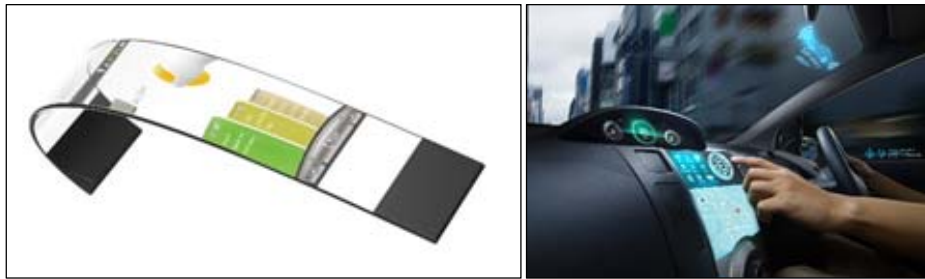
URL:https://www.jstage.jst.go.jp/article/ciqs/2018/0/2018_1P10/_article/-char/ja

(注 4)説明変数:ポリマー原料のモル比や官能基の種類など、予測の手がかりとなる変数のことを指します。

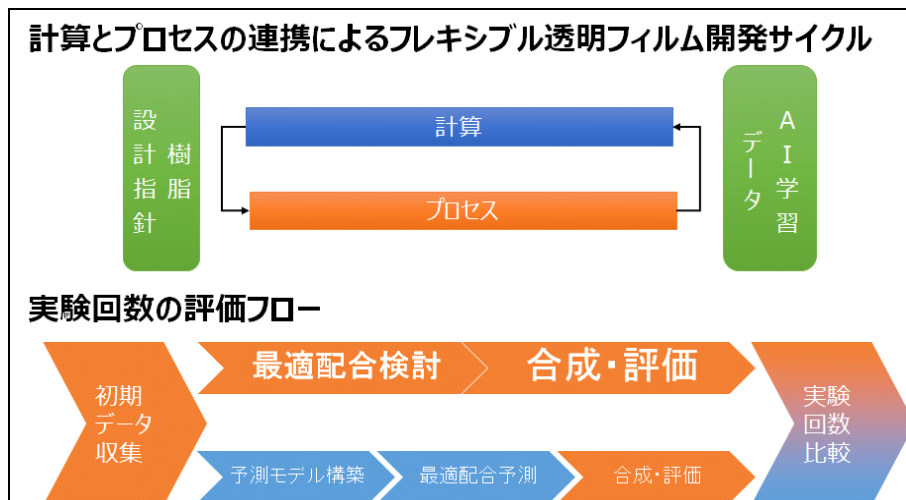
(注 5)目的変数:ポリマー物性など、予測したい変数のこと。

(注 6)換算透過率:熟練研究員によって実測された屈折率を透過率に換算したもの。

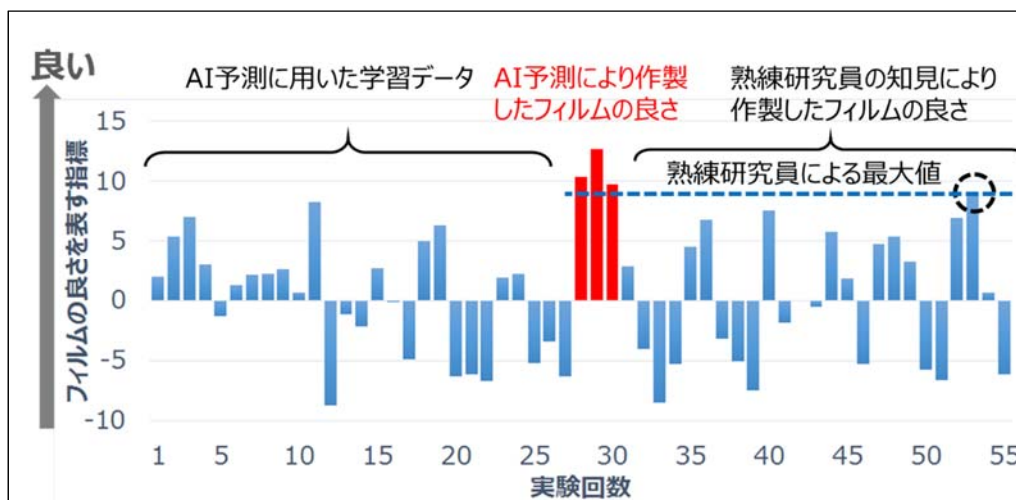
(注 7)偏差値概念:平均値が 50、標準偏差が 10 となるように変数を規格化したもので、本件では、3 つの目的変数(換算透過率、破断応力、伸び)を偏差値に変換して規格化する処理を実施しました。



(図 1)フレキシブル透明フィルムの用途例



(図 2) 計算とプロセスの連携イメージ、実験回数の評価フロー



(図 3) AIにより優れた物性のフィルムをより高効率に開発できることを実証



(図 4)AI 予測を行い作製したフレキシブル透明フィルム(引張試験中の写真)

【昭和電工 会社概要】

会社名:昭和電工株式会社

所在地:東京都港区芝大門一丁目13番9号

設立:1939年6月

代表者:代表取締役社長 森川 宏平

事業内容:有機・無機化学品、セラミックス、電子材料、アルミニウムなどの製造・販売

URL:<https://www.sdk.co.jp/>

【産総研 組織概要】

組織名:国立研究開発法人 産業技術総合研究所

所在地:東京都千代田区霞が関 1-3-1

設立:2001年4月

代表者:理事長 石村 和彦

事業内容:産業技術に関わる研究開発

URL:<https://www.aist.go.jp/>

【NEDO 組織概要】

組織名:国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構

所在地:神奈川県川崎市幸区大宮町1310番 ミューザ川崎セントラルタワー

設立:2003年10月

代表者:理事長 石塚 博昭

事業内容:技術開発マネジメント関連業務

URL:<https://www.nedo.go.jp/>

【ADMAT 組織概要】

組織名:先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)

所在地:茨城県つくば市東一丁目1-1中央5-1(産総研つくばセンター内)

設立:2016年7月

代表者:理事長 腰塚 國博

事業内容:機能性材料の試作回数・開発期間を大幅に短縮する研究開発

URL:<http://www.admat.or.jp/>

【本件に関するお問い合わせ先】

昭和電工

TEL:03-5470-3235 FAX:03-3431-6215

担当:CSR・コミュニケーション室

産総研

TEL:029-861-3050 FAX:029-861-3171 E-mail:m.kawata@aist.go.jp

担当:機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

川田 正晃 〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第 2

TEL:029-862-6216 FAX:029-862-6212 E-mail:press-ml@aist.go.jp

担当:企画本部報道室

NEDO

TEL:044-520-5220 E-mail:miyakemsm@nedo.go.jp

担当:材料・ナノテクノロジー部

三宅、原

ADMAT

TEL:029-856-3580 FAX:029-856-3582 E-mail:y-matsuda@admat.or.jp

担当:松田 幸人