

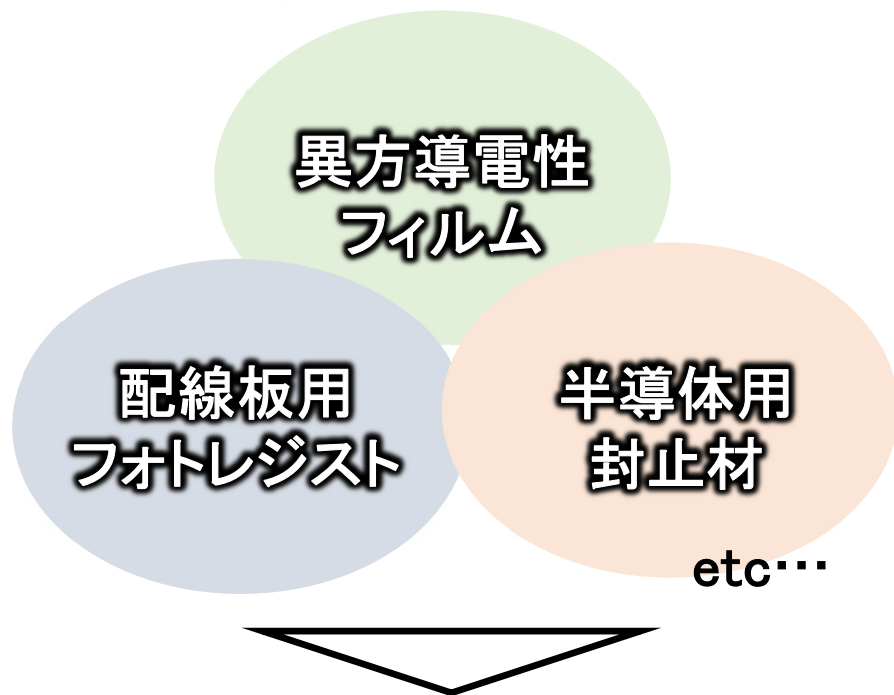
超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ)
最終成果報告会

「樹脂複合材料のデータ駆動設計」

2022年1月19日(水)

昭和電工マテリアルズ株式会社
田中直敬

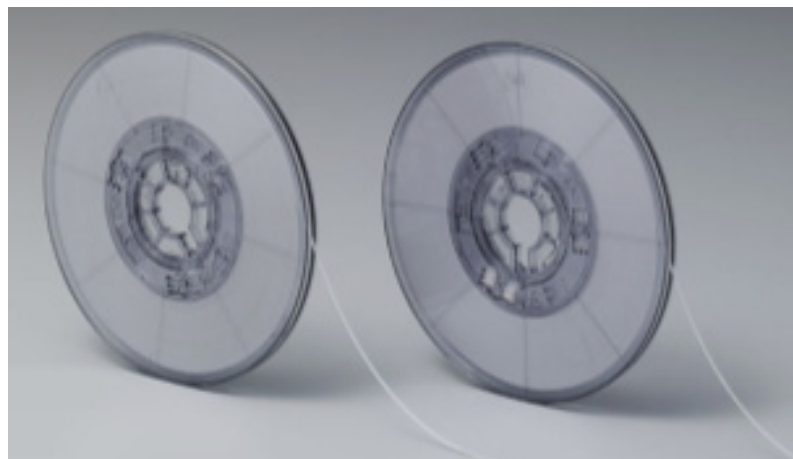
当社主力製品



電子部品用樹脂複合材料

- 設計自由度(難易度)が高い ←
- 複数特性のバランス取り
- 顧客課題が多様etc...

ex) 異方導電性フィルム(ACF)



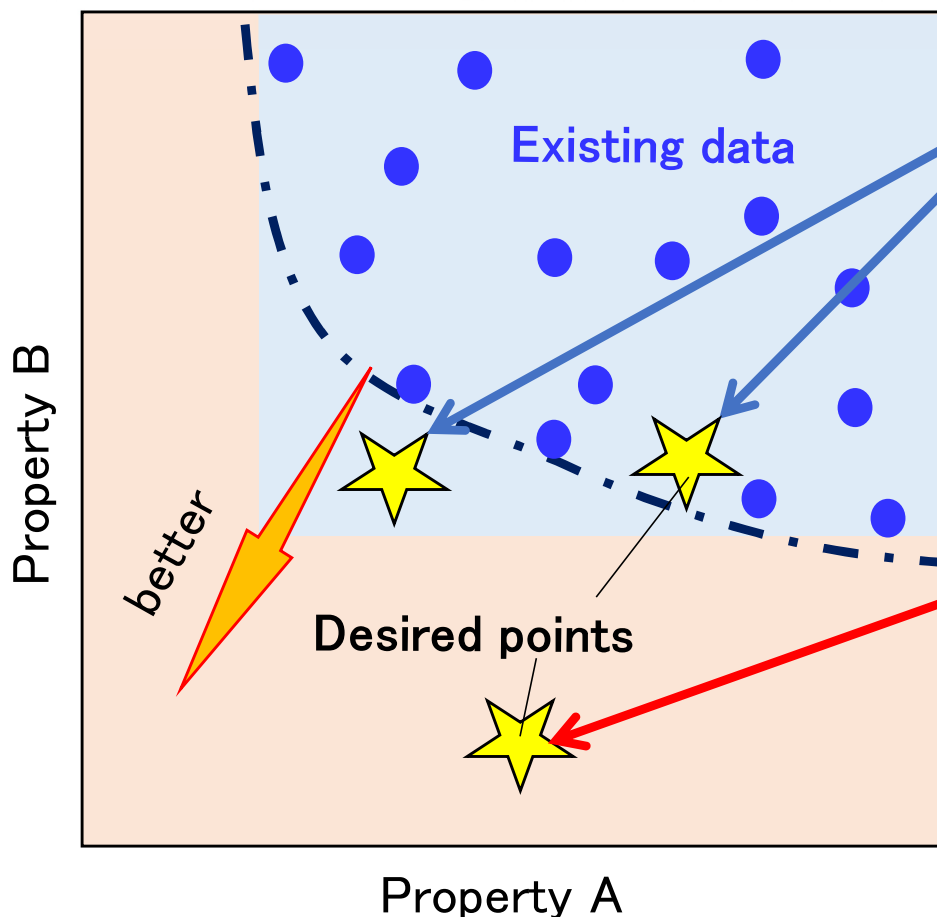
原材料候補(数1000種)

→ 原材料(10~20種) × 配合量

熱硬化性樹脂 (エポキシ、アクリル)	: エポキシA : a %
添加剤	: 添加剤B : b %
硬化剤	: 硬化剤C : c %
導電粒子	: 導電粒子E : d %
...	...

複雑な材料開発を迅速化するため
データ駆動設計技術が必要

マイナー/フルモデルチェンジ 両方の領域で設計技術を開発



課題⑤に参加

技術開発 機械学習による配合組成の最適化(内挿領域)
+ 高機能実現のための新化合物探索(外挿領域)

①マイナーチェンジ(内挿領域)



最適組成
高速提案

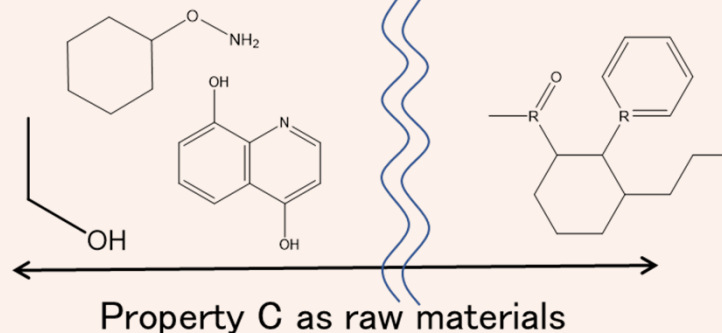
機械学習モデル

②フルモデルチェンジ(外挿領域)

配合調整のみでは実現不可能
→ 高機能実現のための原材料化合物探索

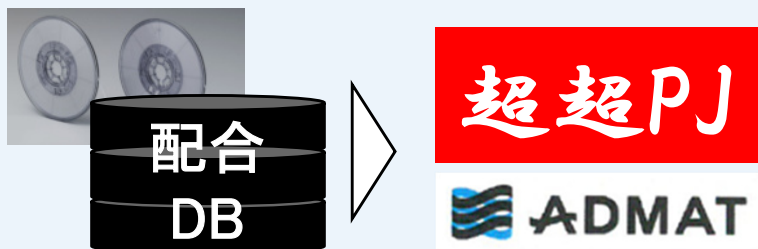
Existing materials

Novel material



①(内挿領域)

高次元な社内データ有効活用技術

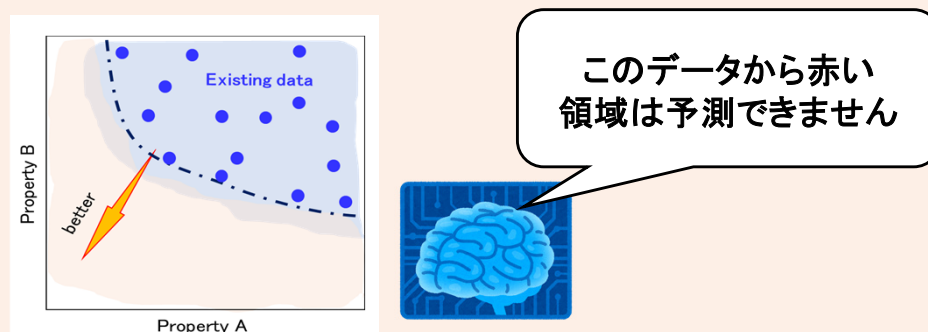


社内データの特徴 ①高次元(D~1000)

②0だらけ=スパース	材料A	材料B	材料C	~	物性A	物性B	③欠損値だらけ
	0	0	0		12	NA	
	0	5	0		NA	NA	
	0	0	0		NA	NA	
	0	0	0		NA	NA	
	~				~		
	0	0	6		NA	6	
	10	0	0		5	NA	

- 社内開発データをPJに持ち込み
- 解析に対して悪条件なデータ
→機械学習の適用性検証
解析ノウハウを蓄積

②(外挿領域)新原材料探索用Sim技術



- 既存実験データの解析のみでは外挿領域の探索は困難
→Simで学習データを拡張

③データ統合時欠損値対応解析技術

化合物	A team	B team	C team
Poly-amide	16	NA	NA
Poly-ethylene	NA	12	13
Poly-styrene	14	NA	15

- 異なる目標でデータ生成、登録
→統合すると欠損箇所が多くなる
→欠損値対応の解析技術を開発

超超PJにおける開発の取り組み

AI

○高次元データ対応
配合最適化技術 →トピックス①

○欠損データ対応
解析技術 →トピックス③

トピックス②

○Simデータ活用
回帰モデル構築
× Sim+AIによる
新材料自動探索

Sim.

○界面Sim基盤構築
○界面、誘電特性
Simデータ生成

内挿

外挿

外挿設計実現に向けたステップ

達成項目

- 界面Simモデルの構築
- 界面Sim基盤の構築
- 界面Simデータの蓄積
- 機械学習モデルの構築
- 機械学習モデル予測性能検証

残課題(社内検討)

- × 機械学習モデル外挿性の検証
- × 必要量のSimデータ蓄積
- × 予測モデルによる材料自動提案
- × 合成・評価による検証

機械学習によるSim予測モデル構築
外挿設計の検証は社内実施へ

技術面

- 高次元データベースに対応した配合最適設計を実用化
⇒内挿領域のデータ駆動型設計が可能に
- 界面相互作用エネルギーシミュレーション基盤を実用化
⇒外挿領域に向けたSim予測モデルを構築
- 欠損値解析に関する新規アルゴリズム(GMRM)を開発
⇒欠損率50%で欠損無し同等の予測性能を検証

他企業との連携

- 村田製作所: Sim基盤構築(PSACSの利用)

対外成果

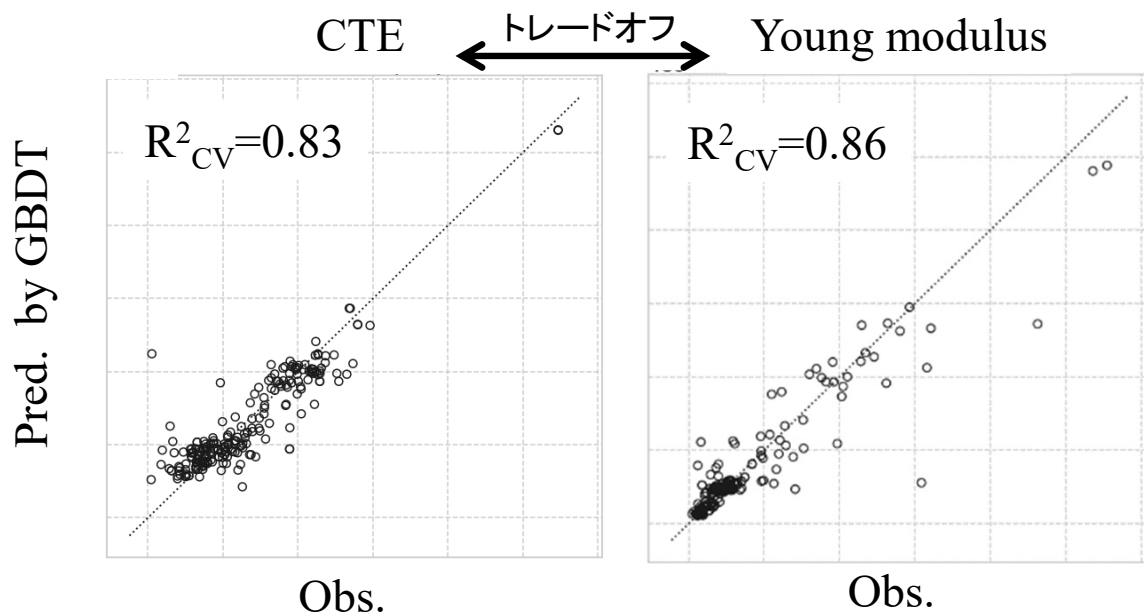
- 特許1件(GMRMに関して出願済)
- 学会発表1件(GMRMに関して発表、MRS Fall Meeting 2021)

開発項目トピックス① 配合データの解析(内挿領域)

■社内製品データの解析

N~6000, D~1000

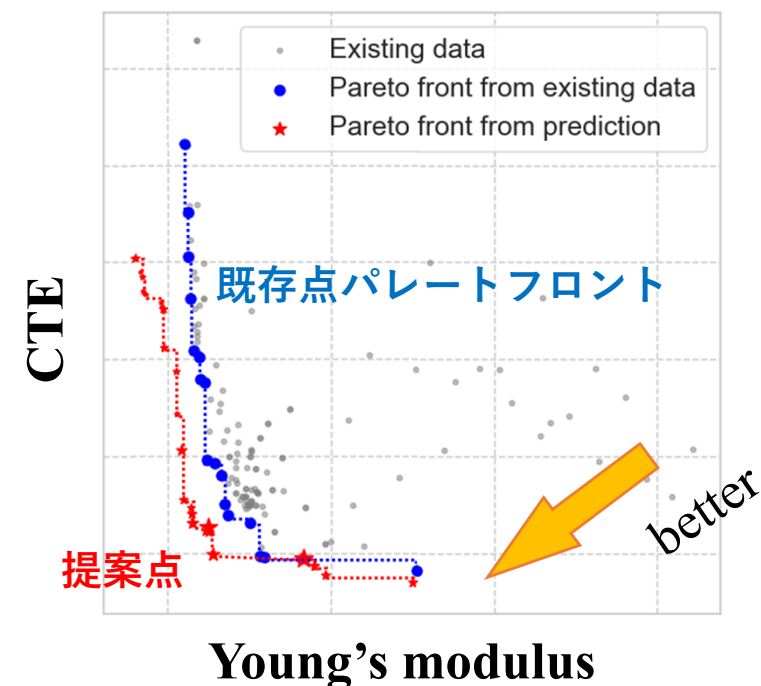
ノウハウ データ密度が高い領域を自動抽出
→ N=223, D=76



CTE, 弾性率は $R^2 > 0.8$
高精度なモデルが作成可能

■最適解探索

パレート解探索結果



学習済みのモデルから
既存パレート解よりも
優れた解を提案

データ密度高→既存機械学習を適用することで高精度なモデル構築可能
学習済みモデルを探索することで良い解を提案

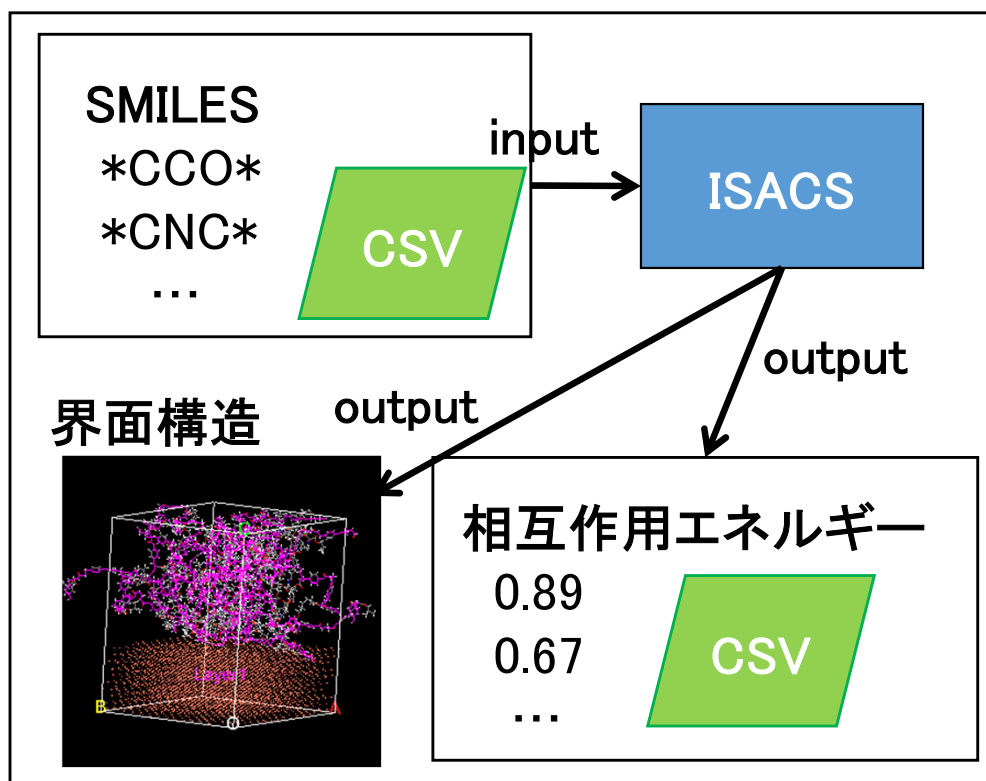
■ 界面相互作用エネルギー計算システム

PSACSの機能拡張→ISACS

入力: 分子構造 (SMILES)

出力: ① 界面構造自動作成

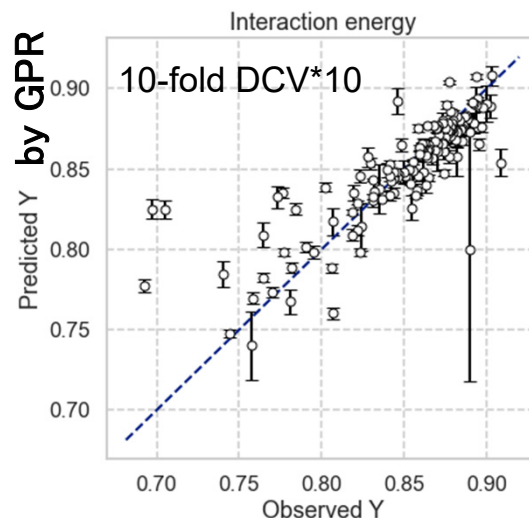
② 基盤-分子の
相互作用エネルギー計算 (MD)



解析例

Y: 対Cu相互作用エネルギー

X: VSA記述子/モノマー原子数



類似化合物がない
外れ値を除いて、
高精度予測が可能

更なるデータの積
み増しが必要

残課題(社内検討)

- ✓ MLモデル外挿性の検証
- ✓ MLモデルによる原材料自動提案
- ✓ 合成・評価による検証

界面相互作用エネルギー計算システムを構築 → 非専門家でもSim可能
誰でも(実験データに対しての)外挿領域の予測が可能となった

■ 共有データベース化の課題

目標が異なるデータの統合

index	X1	X2	Sim1	Sim2	Exp
1	1	NA	4	5	5
2	1	2	NA	1	2
3	2	3	NA	NA	NA
4	1	2	NA	1	1

- 欠損値が多数存在
→ そのまま解析できない
- 欠損値への対処
 - 欠損値を含むサンプルを削除
→ データ数が減る☹
 - 補完
→ 推定にバイアスが乗る☹

外挿性の高いGMRをベースに
補完、削除不要の手法を開発

■ 提案手法 GMRM

Gaussian Mixture
Regression for
Missing data

index	X1	Sim1	Sim2	Exp
1	1	4	5	5

index	X1	X2	Sim2	Exp
2	1	2	1	2
4	1	2	1	1

index	X1	X2
3	2	3

流れ

- ① 欠損パターンごとに尤度計算
- ② 同時分布 $p(X,Y)$ をGMMで学習
- ③ 条件付分布 $p(Y|X)$ を予測 = GMR

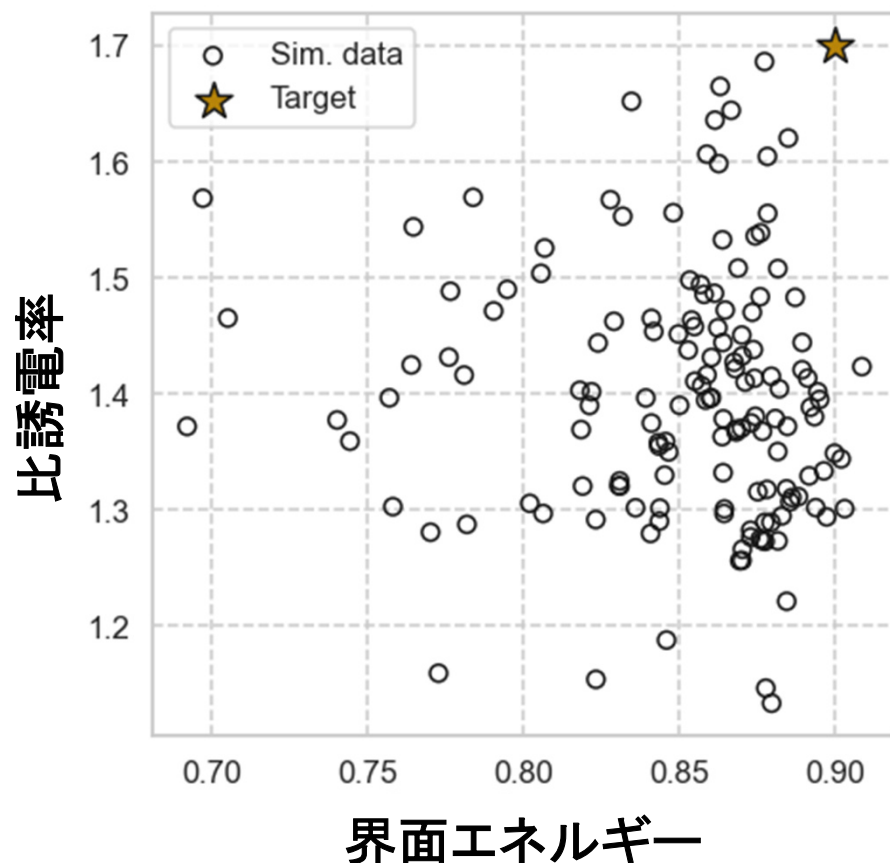
特徴

- 欠損値の取扱いに試行錯誤不要
- 直接逆解析が可能 (GMRの特徴)
 $p(X,Y)$ から $p(X|Y)$ を求める

■ISACSに蓄積した高分子Simデータを活用

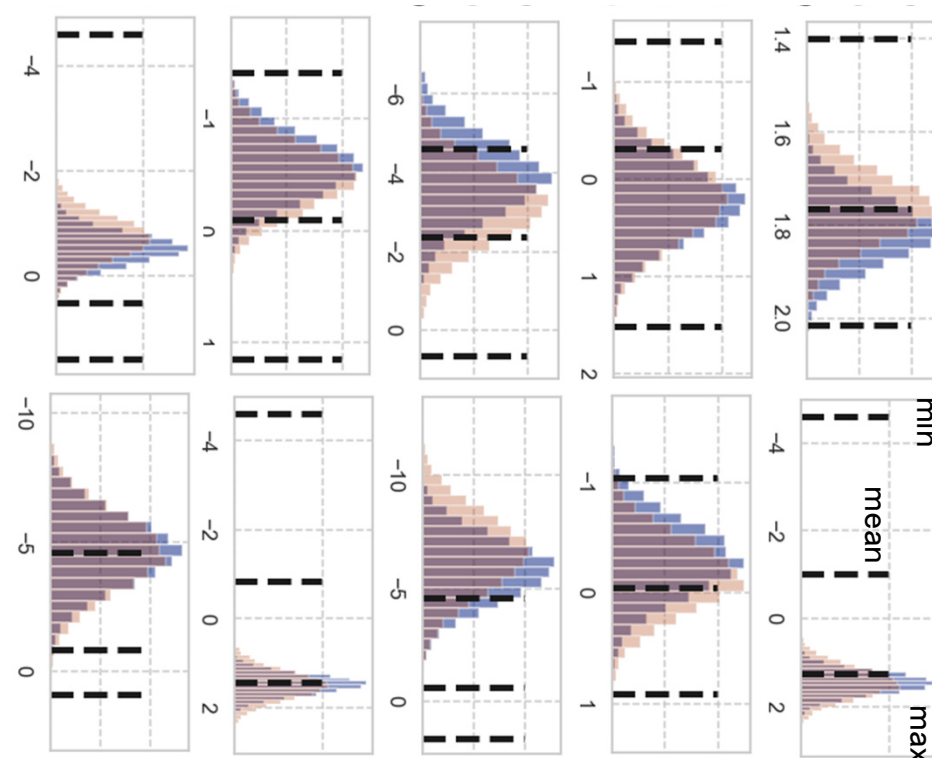
Y: 比誘電率、界面エネルギー X: VSA記述子/モノマー原子数

→ Yの目標値を満足するXを逆解析



青: GMRで元データ(欠損無し)を学習

赤: GMRMでYの50%を欠損させたデータを学習



GMRMにより多くの欠損値が存在しても
元のデータを逆解析したX分布と同様の分布を生成可能

社内展開

- ✓ PJ参画で得られた課題やノウハウを社内開発へフィードバック
- ✓ 開発した手法、アルゴリズム（GMRMなど）の社内活用を推進

社会的展開

- ✓ コンソーシアム継続参加により、日本の素材産業全体の底上げに向けた活動を継続し、企業を超えたネットワークを強化したい

以上