

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

「CNT複合材料の開発」

2022年1月19日(水)

日本ゼオン株式会社
本田 隆

SDGs・カーボンニュートラルを目指すCNT材料

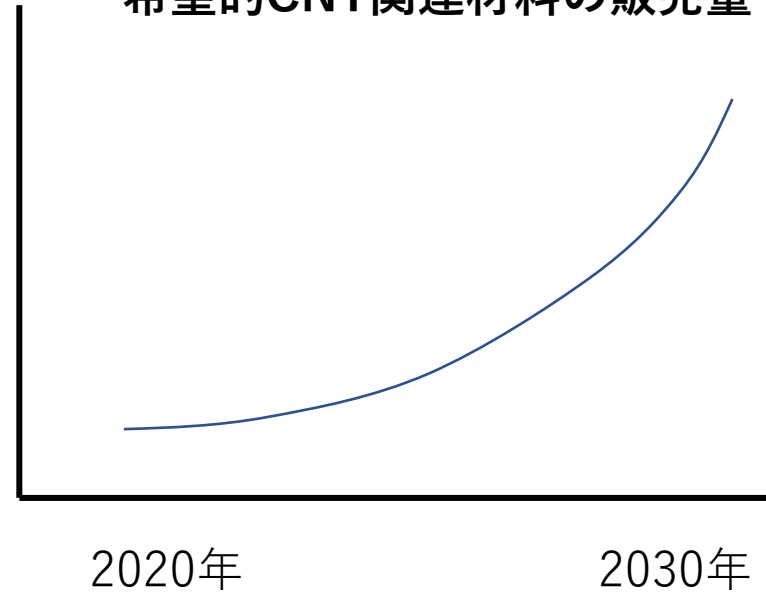
持続可能な社会が要求する材料:

環境負荷の低い高性能有機材料



CNT販売量

希望的CNT関連材料の販売量



SDGs・カーボンニュートラルな社会に向けて、CNTを利用した様々な高性能材料が期待されている

出典: ゼオンナノテクノロジー株式会社パンフレット(2016)

要求特性: 高強度、高耐久性、高電気伝導度、高熱伝導度



2030年の社会における炭素材料の波及イメージ図(屋外、屋内編抜粋)
出典: <https://www.nedo.go.jp/hyokabu/articles/201602cnt/page04.html>

【目標】

CNT不織膜のAIを利用した物性評価手法の開発

【目標値】

DLによる表面電気抵抗予測の R^2 値: 0.9以上
物性の異なるCNT混合不織膜でベストな組成を予測する。

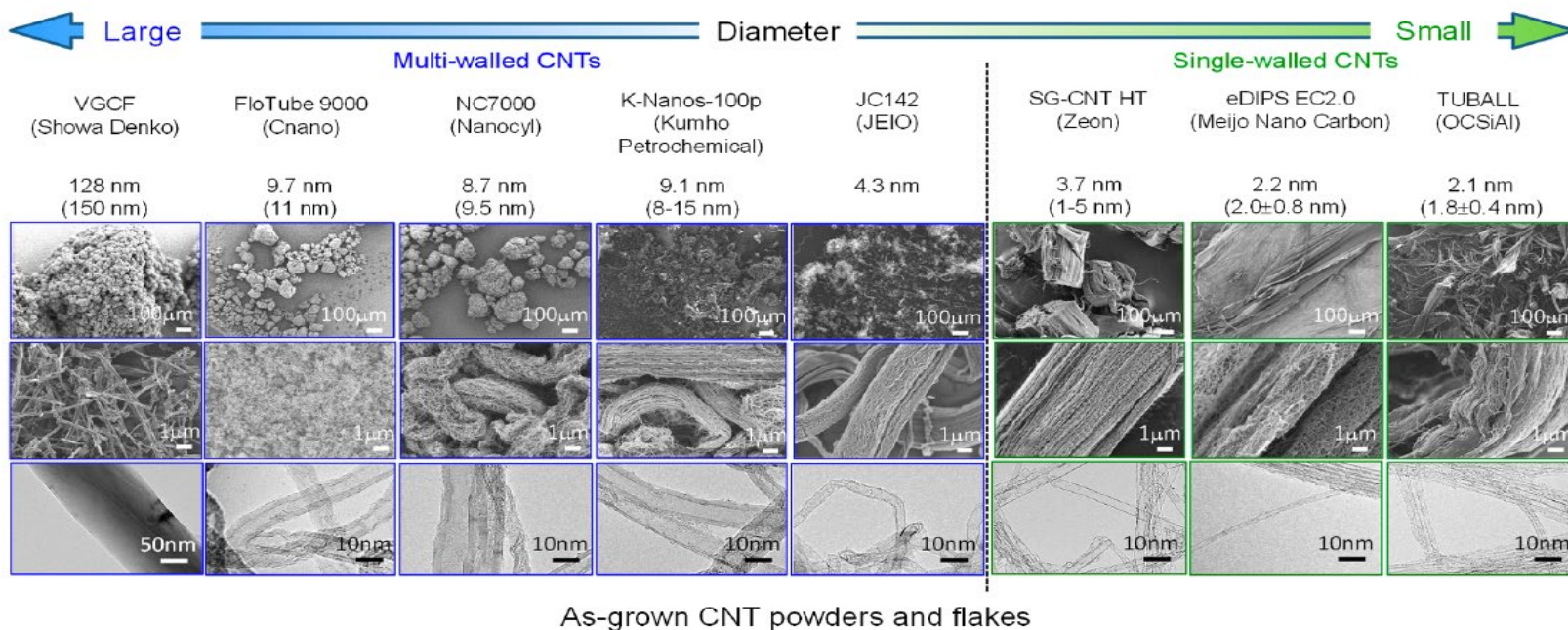
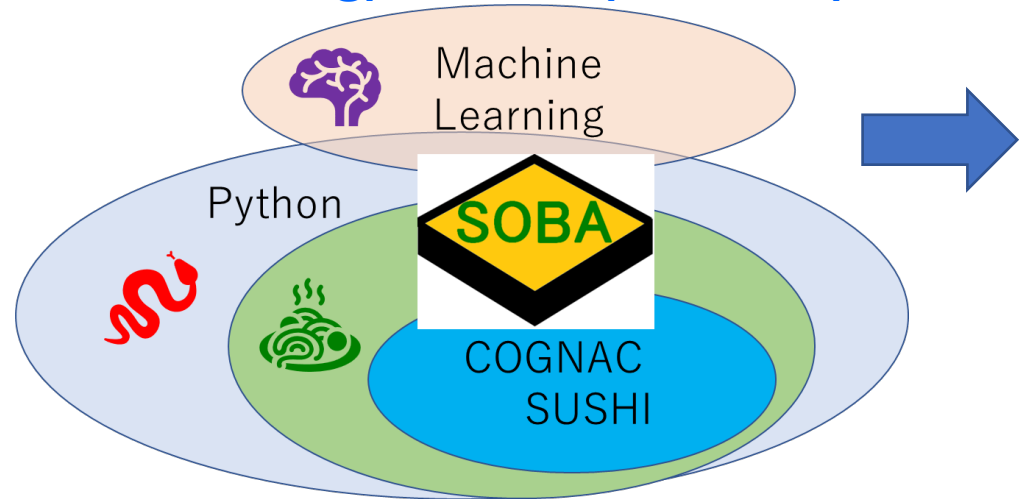


Figure 1. SEM and TEM images of as-grown, commercialized CNT powders and flakes from well-known worldwide suppliers in order of decreasing diameter (left to right).

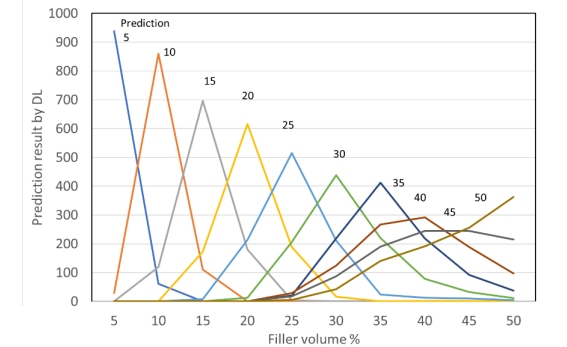
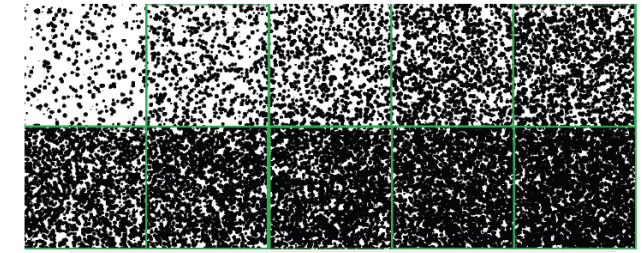
1. AI技術を取り入れるための基盤となるプラットフォームの開発

SOBA (2018~)

実体は4種類のPythonライブラリ
soba, sobagpu, sobampi, sobampu



高分子フィラー分散模擬構造のDL(2019)

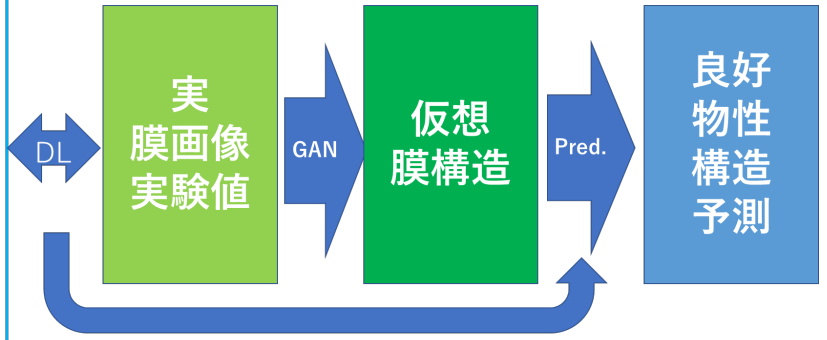


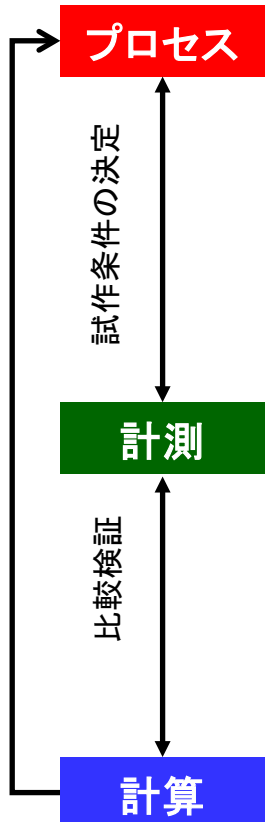
仮想実験

2. DLのCNT不織膜への展開

GAN(敵対的生成ネットワーク)
の導入を開始する(2019)。

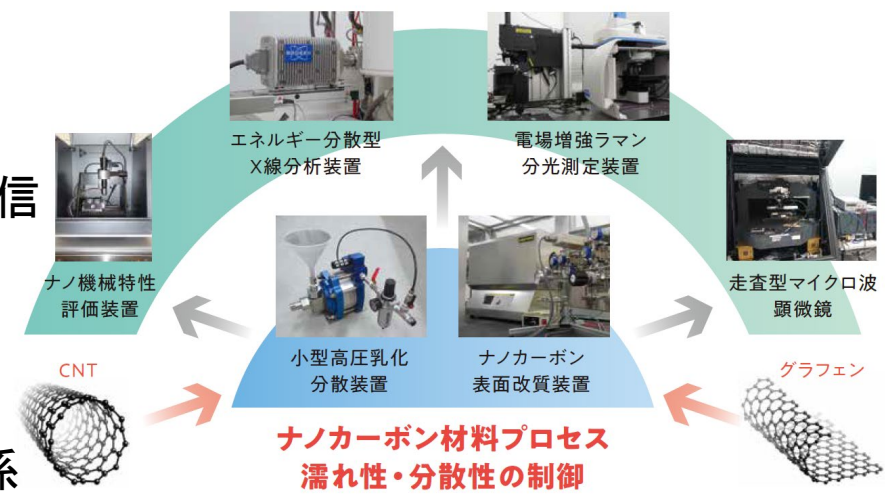
プロセス製品情報





⑨CNT分散・混合技術・分散液評価技術・不織膜作製技術の開発

- 高分散溶媒の評価
- 機械的高分散手法の評価
高圧乳化分散
- 高分子フィルム加工機との通信
混練押出機・引取・巻取機



⑬CNT不織膜計測

- SEM観察
- 細孔分布構造等と物性の関係
- 熱伝導率、導電率、結晶性、抵抗
- サイクリックボルタメトリー、ガルバノスタティックサイクリング

③AIを利用したCNT不織膜の評価

- Soft Blends Analyzer (SOBA) の開発とリリース
- SEM画像を利用した深層学習(DL)
- SEM画像を利用した敵対的生成ネットワーク解析(GAN)
- 現場型AI



開発成果の概要

- ・モデル素材の開発目標、物性値
キャパシタ素材に最適な複合CNT不織膜の物性探索
- ・開発期間短縮
DLを用いた仮想実験による高速化
- ・プレスリリース
NEDO/ADMAT/日本ゼオン “AIが生成した材料の構造画像を用い、物性を予測する技術を開発” (2021/8/30).
産総研”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” (2021/10/19).
- ・学会口頭発表
室賀駿, 本田隆, 中島秀朗, 小橋和文, 清水太陽, 森田裕史, 岡崎俊也, 畠賢治 “(注目講演)不定形材料の
マテリアルズ・プロセスインフォマティクスを実現する深層学習による仮想実験法の開発”, 第82回応用物理学会
秋季学術講演会, 2021.9.
本田隆, 室賀駿, 中島秀朗, 小橋和文, 清水太陽, 森田裕史, 岡崎俊也, 畠賢治 “CNT不織膜の仮想実験”
第70回高分子討論会, 2021.9.
室賀駿, 本田隆, 中島秀朗, 小橋和文, 清水太陽, 森田裕史, 岡崎俊也, 畠賢治 “ディープラーニング×
ポリマーコンポジット仮想実験の可能性” プラスチック成形加工学会第32回年次大会, 2021.6.
- ・論文
T. Honda, S. Muroga, H. Nakajima, T. Shimizu, K. Kobashi, H. Morita, T. Okazaki, and K. Hata
“ Virtual Experimentations by Deep learning on Tangible Materials”, *Communications Materials*, 2, 88 (2021).
Shun Muroga "Deep learning virtual experiments for complex materials with non-periodic, undefinable, hierarchical,
tangible structures -Overcoming the limitations of conventional materials and process informatics-" Nature Portfolio
Device and Materials Engineering Community, Behind the Paper (2021).
森田裕史, 本田隆, 室賀駿, 中島秀朗, 小橋和文, 清水太陽, 岡崎俊也, 畠賢治 “カーボンナノチューブ
不織膜における深層学習を用いた仮想実験 “日本膜学会誌, 46(6),353-358 (2021).

短縮率のサンプル数依存性

従来実験数	Tt [h]
1	31.5
5	157.5
10	315
50	1575
100	3150
200	6300

PJ実験数 (DPF構築後)	Tp [h]	Tp2 [h] (DPF構築までの 時間除外)
1	616.0	31.5
2	647.5	63
5	742.0	157.5
10	899.5	315

従来はN回の実験が必要であったが、PJ型では深層学習により2配合に絞り込み+検証実験を行うと想定し、DPF構築無しとした場合

- ・従来型での実験数がN=50の場合 **1/25 倍**
- ・従来型での実験数がN=100の場合 **1/50 倍**

従来型のサンプル数が多いほど短縮率の効果大

プレス発表：試算根拠

従来 実験1716回 × 31.5時間 = 54054時間 = 6.2年 . . . ①

今回、学習データ用実験 17回 × 31.5時間 = 535.5時間 . . . ②

学習時間 100時間 . . . ③

(②+③) / ① = 26.5日 / 6.2年 = 1 / 85

※学習時間：深層学習の収束計算 + 1716組成の推定結果出力

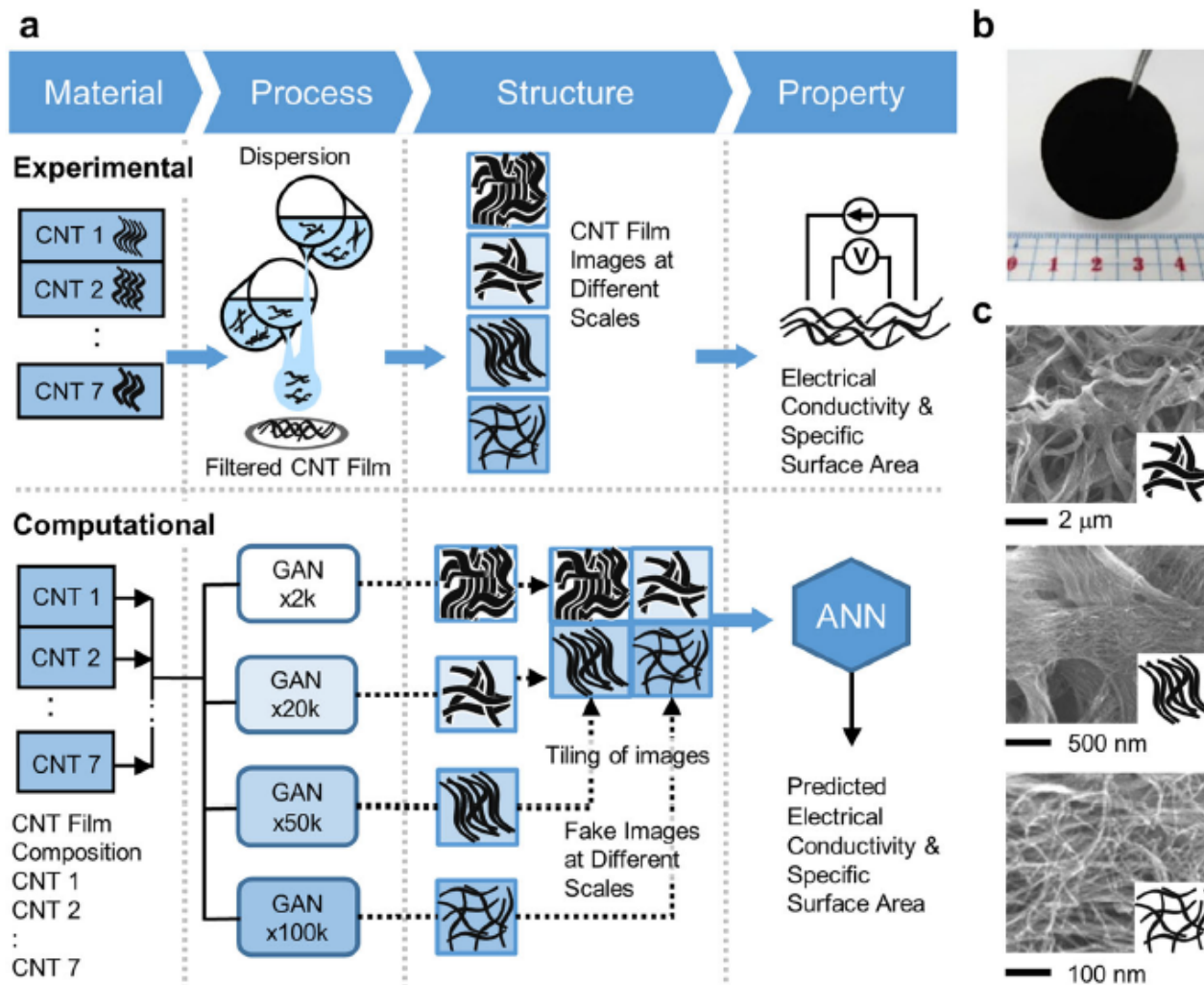
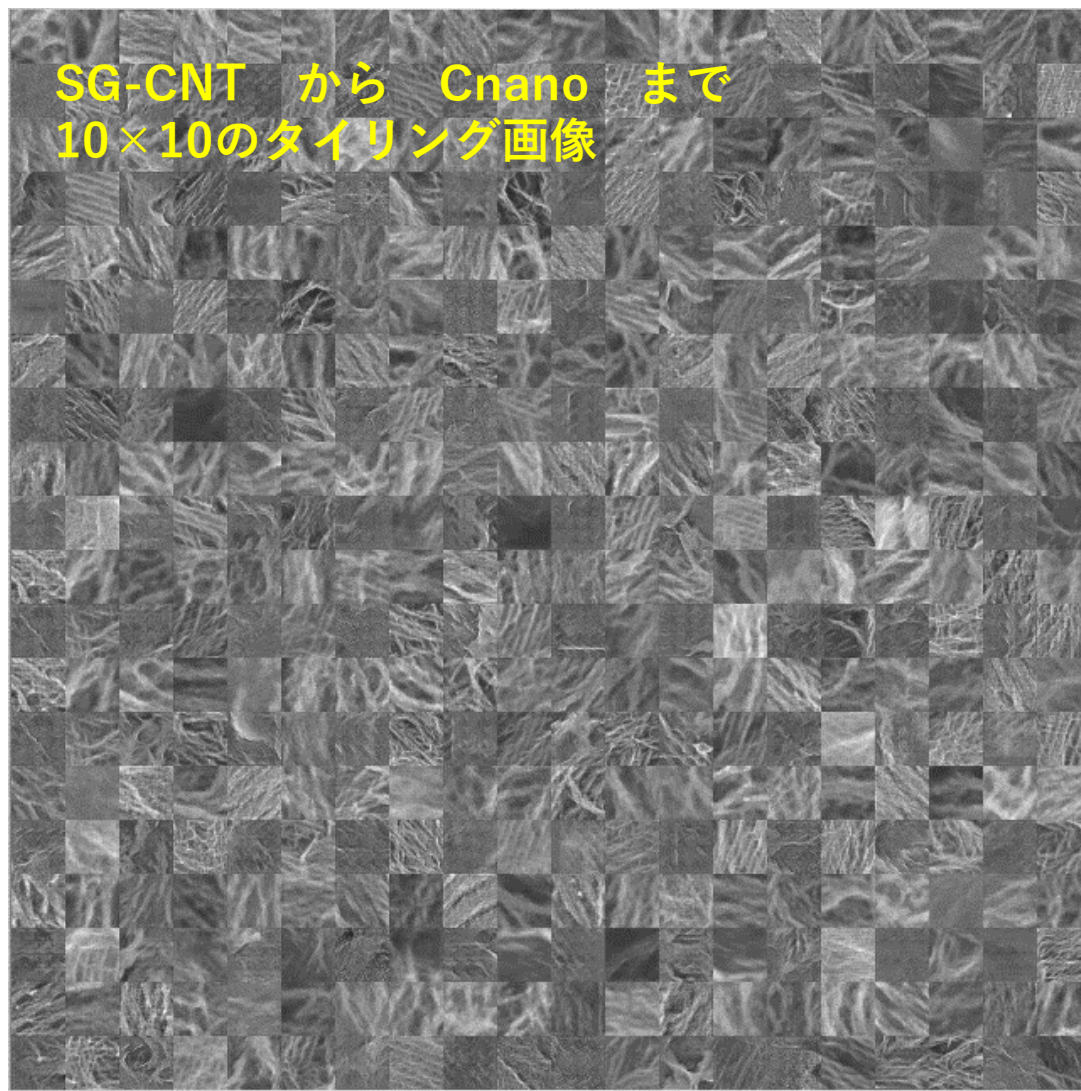
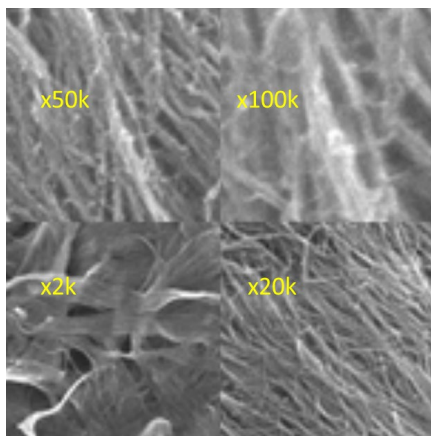


Fig. 1 Concept of the deep-learning-based computational framework for virtual experiments. **a** Schematic of the process flow of real experiments versus computational procedure of virtual experiments. **b** Digital photograph of carbon nanotube (CNT) film featured in this article as an example of tangible materials. **c** SEM images of a CNT film at different magnifications showing the hierarchical structure.

仮想実験

CNT SEM・タイリング 画像のAIによる生成



仮想実験の結果

<https://www.nature.com/articles/s43246-021-00195-2>

Fig. 2: Potential of generative adversarial network (GAN) to create fake CNT film

SEM images and accuracy of ANN prediction of properties.

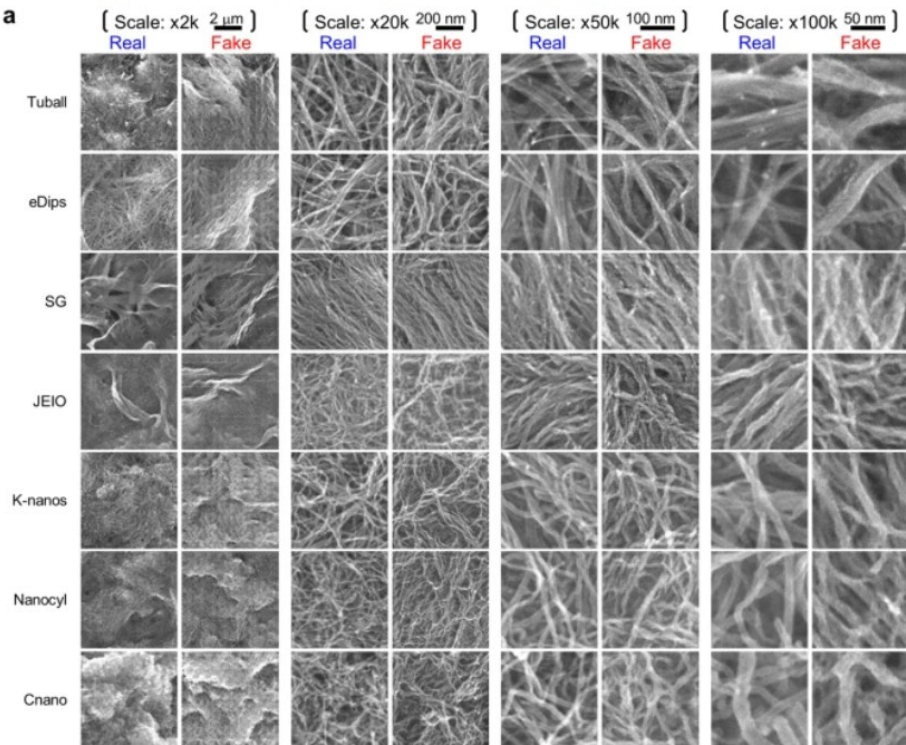
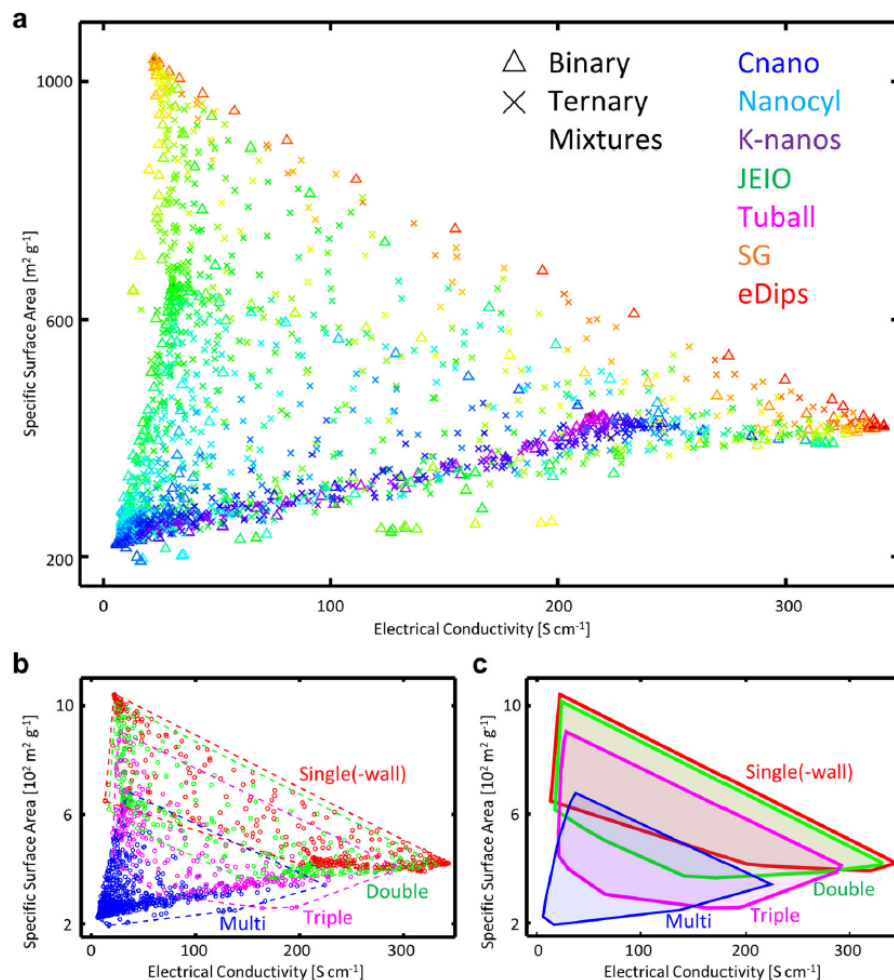


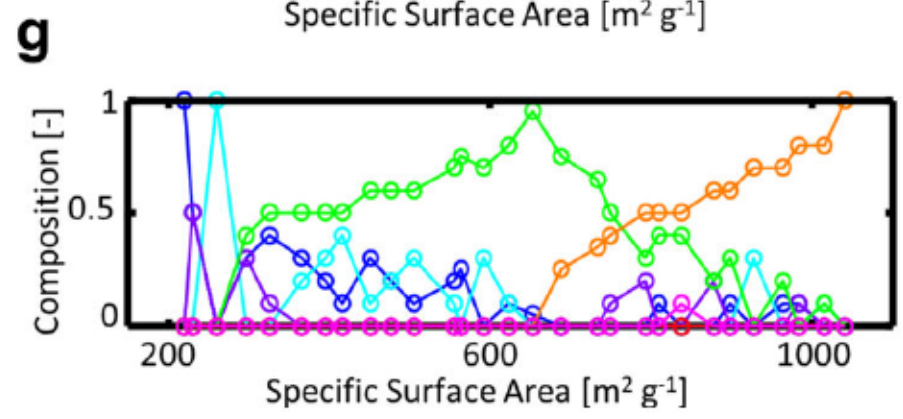
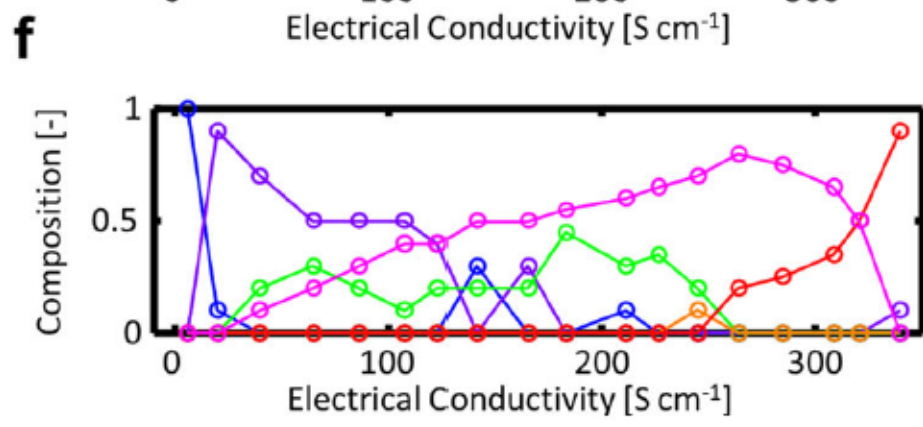
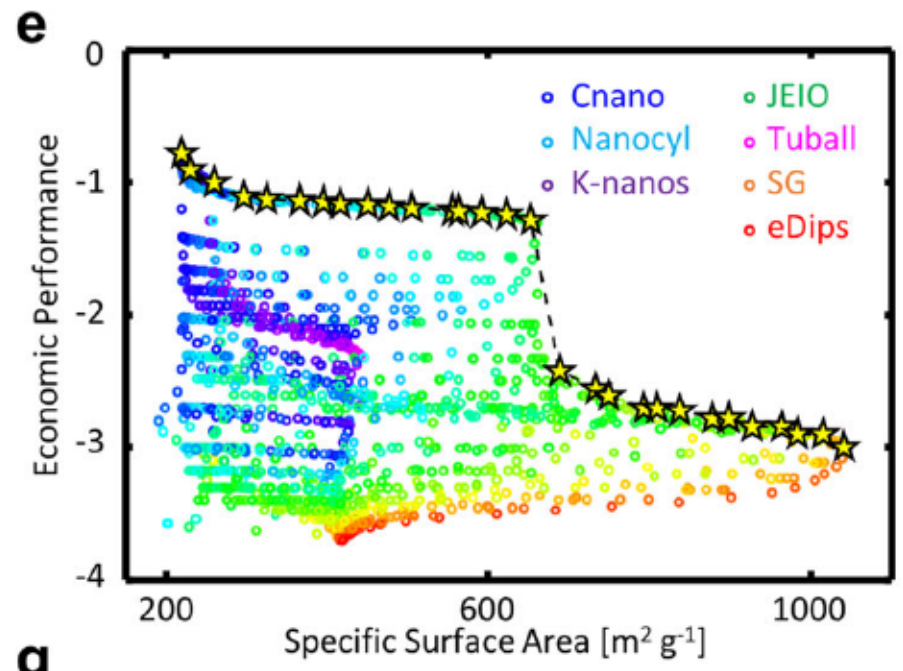
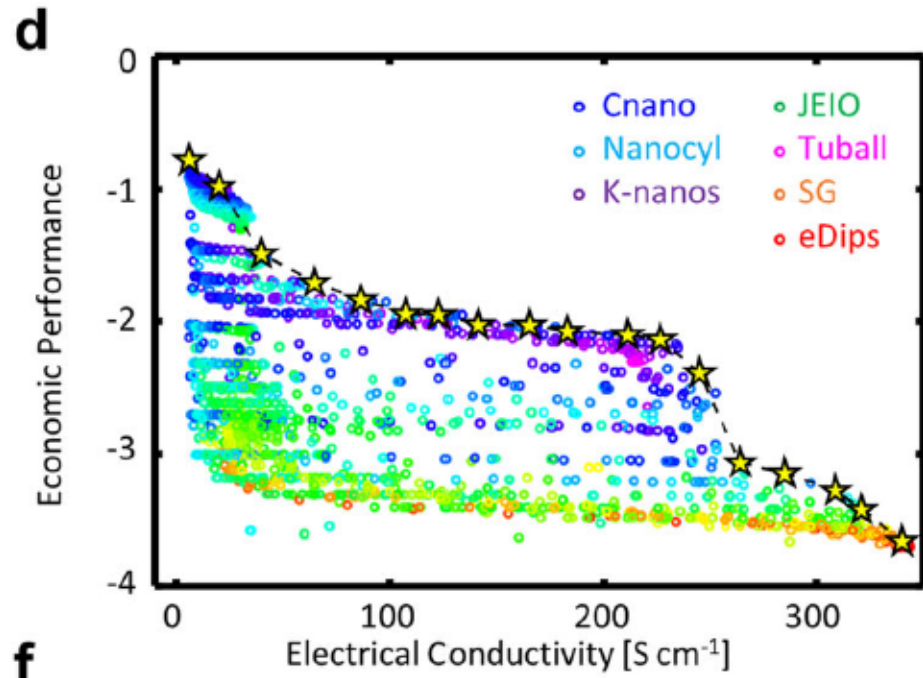
Fig. 3 Predicted properties of 1716 CNT films.



T. Honda, S. Muroga, H. Nakajima, T. Shimizu, K. Kobashi, H. Morita, T. Okazaki, and K. Hata

“ Virtual Experimentations by Deep learning on Tangible Materials”, *Communications Materials*, (2021).

CNT不織膜経済性の評価結果



SOBAの活用

※DL/GANを利用した高機能材料の開発

SEM・TEM画像が全て貴重な学習データとなる。

DL/GANの活用で、これまでに無いフレームワークの構築と新たな材料開発の高速化が可能。

例えば、高分子複合材料の画像の教育・物性推定による材料開発の高速化が可能。



〈産総研〉

室賀 駿、中島 秀朗、清水 太陽、小橋 和文、
森田 裕史、岡崎 俊也、畠 賢治