

マテリアルズ・デジタルイゼーション

Materials Digitalization

今出昌宏*

Masahiro Imade

マテリアルズインフォマティクス (MI) は新材料開発を大幅に加速する注目技術である。MI最大活用による材料開発デジタルイゼーション達成に向けて、新材料探索実践によるMI要素技術蓄積、材料データの収集自動化と共有のためのデータ基盤構築、材料技術者向けMI実践用基盤整備、WebページやワークショップによるMI人材育成を推進している。

Materials informatics (MI) can significantly accelerate the development of new materials. Aiming to achieve material development digitalization, we are accumulating MI elemental technologies by implementing a new material search, building a data infrastructure for automated material data collection and sharing, developing an MI platform for material engineers, and promoting MI human resource development by utilizing web pages and workshop activities.

1. 材料開発のデジタルイゼーション

1.1 材料開発へのデジタル技術活用

電子部品材料や樹脂材料などの開発は、従来、理論に裏打ちされた技術者の知見や経験に基づく候補選定と実験評価の繰り返しで実施されてきた事例が多く、研究開発から事業化まで非常に長い時間と手間が必要とされていた。

これを加速する手段として、計算科学やデータ駆動科学が積極活用され始めている。計算科学は、20世紀後半からの著しい計算機性能向上で、電子状態計算や分子動力学計算などの各種シミュレーションを実用的な適用規模と計算時間で実施可能となり応用分野が広がっている。もう一方のデータ駆動科学は、計算機の進化に加え、近年のAI技術の進展に伴い応用領域を広げており、材料分野での各種応用はマテリアルズインフォマティクス (MI) と総称されている。応用の一形態として計算科学で生成したデータを元にしたデータ駆動手法もあるため、計算科学は広義にMIの一要素技術に含められる場合もある。

計算科学とデータ駆動科学はそれぞれ理論科学の演繹 (えんえき) 的アプローチと実験科学の帰納的アプローチをデジタル技術活用で効率化したものであり、どちらも材料開発加速において必須である。

材料開発は、元素の種類／組成比／分子や結晶の構造／合成条件などの膨大なパラメータの組合せから目的特性を示す最適な組合せを特定する作業である。これは逆問題を解くことに相当し、帰納的アプローチを効率化するMIとの相性がよい。そのため、材料研究開発期間の大幅短縮を可能とする技術として、世界的にMIの注目度が高まっている。以降はMIに関する内容を中心に述べる。

1.2 MIにおけるデータ管理の重要性

MI実践の前提として、欠損のない良質かつ十分量の構造化されたデータが必要である。その一方、開発現場で日々蓄積されるデータは、そのデータ要件を満たさない場合が少なくない。したがって良質な材料データの収集・蓄積を可能とするデータ基盤整備が重要である。

また多くの場合、データは開発ごとの固有条件で取得され、その活用は個人やプロジェクト内に限定される場合が多い。一方で、例えば転移学習データとしての利用を考えた際には、他の材料開発でのデータは有用なデータとなる。ただし多くの場合、必要な時に他者の保有データを検索し二次利用することは困難である。このいわば孤立した「点」で存在するデータから「線」や「面」に相当する付加価値を創出するため、前記データ基盤にはデータ相互利用を可能にする仕組みも付与すべきである。

このようなデータ基盤が共通プラットフォームとして整備され広範囲での利用が進むと、例えば部門間での同一材料の実験や計算の重複実施の回避や、あるいはデータ基盤を介した新たな部門間連携の促進など、デジタル技術活用による単一材料開発の効率化を超える価値が創出され、材料開発デジタルイゼーションが達成される。

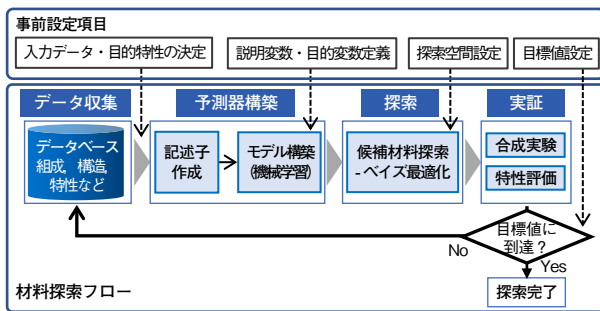
2. MIの概要と当社における取り組み

2.1 MIを用いた材料探索フロー

第1図にMIによる材料探索のフロー概要を示す。まず入力データと予測対象の材料特性 (目的特性) およびその到達目標値を決め、予測器 (機械学習モデル) への入出力項目である説明変数と目的変数定義、探索空間 (網羅的な予測値算出のための全組合せ) を事前設定する。その後データ収集、予測器構築、探索、実証を順次実施する。

データ収集では、材料組成や実験条件などの入力データ

*テクノロジー本部 マテリアル応用技術センター
Applied Materials Technology Center, Technology Div.



第1図 MIによる材料探索フロー

Fig. 1 Material search flow by MI

に対応する目的特性値を含む構造化データを収集する。

予測器構築においては、入力データを記述子化（数値列へ変換）して用意する説明変数と、目的変数である目的特性値とを使用した機械学習でモデル構築する。

探索では構築した予測器で、探索空間を網羅予測する。予測結果のうち目標値への到達可能性が高いものを、ベイズ最適化などの手法で合成評価候補として決定する。

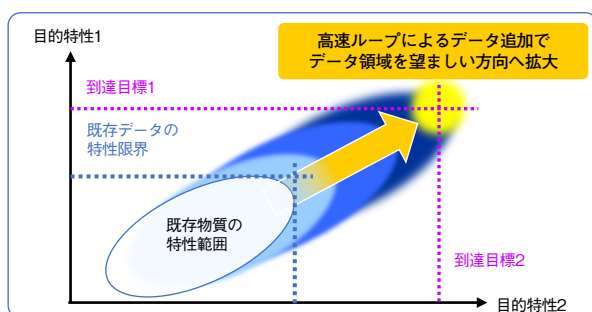
最後に、決定した候補を合成・評価する。通常は一度のフローでは目標値に到達しないので、合成・評価した条件とその評価結果の特性もデータに追加し、目標値に達するまで一連の処理を繰り返す。

データ収集から探索までは情報技術、記述子作成や合成評価候補判断と実証には材料技術が必要であり、一連のフローが有効に機能するには両技術連携が重要である。

2.2 当社におけるMIによる材料探索実践

当社では2018年から材料技術者とAI技術者の連携を本格化し、電池材料開発でのMI活用を開始した[1]。

新規に探索したい領域は、必然的にデータが少なく予測精度が悪い。したがって、データが少ない領域にデータを増やすことによる予測の外挿性獲得、言い換えるとデータ領域拡大による探索空間の内挿化が必要である（第2図）。そこで重要になるのは時間的ボトルネックとなる実験の効



第2図 データ追加による探索空間の内挿化

Fig. 2 Interpolation of design space by adding data

率化による、データ取得の高速化である。

そこで、データ取得サイクルを高速に回すために、対象材料専用の実験環境を構築し、第1図の実証ステップにおける合成・評価の内部フローをデータ収集に特化して高効率システム化した。物理的な工程は専任の実験補助員が実施し、条件設定および実験時の作業ログデータと評価データの回収は自動化することで、予測器構築、探索および実証の高速ループを実現した。

探索結果からの合成評価候補抽出においては、ベイズ最適化で求めた獲得関数のヒートマップを生成し、材料技術者にわかりやすい形で可視化共有することで、材料技術者の知見も反映しながら次の評価領域を決定した。またシステムには収集データの参照やダウンロード、特性評価結果のグラフ表示機能も実装した。必要に応じて各自のPCから任意の評価サンプルデータを抽出することができ、材料/AI技術者間でデータを確認しながらの議論に活用された。

この一連の取り組みで、従来なら数年かかる規模の探索空間を数か月で探索完了し、有望な新材料を複数得た。この事例を通じて、MI手法活用、データ収集システムによる実験効率化およびデータを軸にした材料/AI技術者連携が材料開発加速に効果大であることの社内認知が進んだ。

専用実験ラインとシステム構築による実験データ収集自動化と、材料/AI技術者の入り混じりがうまく機能したことによる材料探索加速の実現は、実用レベルのMI活用事例としては先進的であったと考えている。このようなMIの取り組みは各社クローズ実施であることが多く一概に比較できないが、大量の系統的独自実験データに基づく取り組みに関する公知情報は同時期に見当たらず、同様なシステムの構築だけでも1年程度必要であることを鑑みると、本取り組みは実践面で他社よりも2年程度先行したものと推定する。

ただし昨今では各社からの材料開発のデジタイゼーションに向けた取り組み方針発表や、アカデミック領域からの実験自動化に関する報告が増加しており、当社としても他材料系へ展開可能な汎用的なデータ基盤開発や実験作業自動化の取り組み強化が必要である。

2.3 計算科学活用とMI要素技術開発

前節で説明した実験とデータ収集の効率化の他にも、計算科学手法の効率化による材料探索手法開発[2]や、計算科学と機械学習の連携スキームでの材料探索[3]など、課題に応じて計算科学も取り入れている。

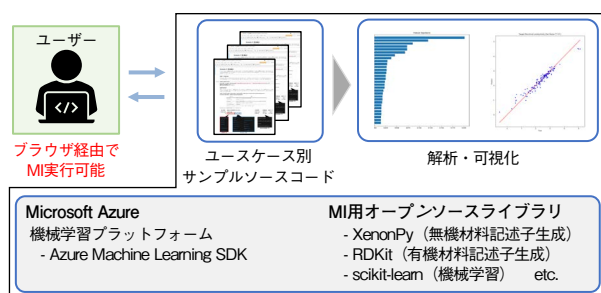
またMI技術応用範囲拡大に向けた要素技術開発も並行して実施している。無機組成生成技術[4]や論文マイニングによる無機合成プロセスパラグラフ抽出[5]など、自社独自およびオープンイノベーション併用で取り組んでいる。

3. MI社内普及に向けたMI技術の社内展開と人材育成の取り組み

MI技術の社内展開と人材育成によるMI社内普及を目指して、MI実践用の社内共通基盤の開発と、MI教育に取り組んでいる。

3.1 MI実践用共通基盤（機械学習基盤）

入門者から上級者までの幅広い範囲の利用者を想定した簡易プログラミング環境を開発し、MI実践用共通基盤（機械学習基盤）として社内運用している（第3図）。



第3図 MI実践用機械学習基盤の概要

Fig. 3 Overview of machine learning platform for MI practice

本環境はクラウドサービスのMicrosoft Azure^(注1)で提供される機械学習プラットフォームAzure Machine Learningや、MIに必要な各種オープンソースライブラリを使用して構築した環境であり、社内イントラネット内部のPCのブラウザから利用可能である。

記述子作成、機械学習モデル構築、予測、可視化などのMIの中核機能は、入門者でも容易に利用可能な独自ライブラリとして提供している。さらに一般的回帰問題や有機材料対応などさまざまなユースケースのサンプルコード群を提供することで入門者のプログラミングに対するハードルを下げている。上級者は自身の課題に応じて自由度高く複雑な処理も可能である。

利用ユーザー登録者数は、社内材料技術者全体の約14%に達している。現在は機械学習基盤としての機能を提供しているが、今後はデータ収集／蓄積／共有のためのデータ基盤の機能追加を計画している。

3.2 MI教育

社内のさまざまな部門間でのMI連携推進のための社内Webサイトを運営し、MI最新ニュース／MI概論資料／オープンデータベースや有用ツールへのリンク／メールマガ

ジン登録（イベント案内やニュース更新連絡）／MI相談受付窓口などの情報を発信している。

また、MI概要の研修やMI実践用共通基盤の利用に関するワークショップ、自テーマへのMI活用についての相談会を定期的に開催し、自立的なMI実践の可能な材料技術者（MI人材）の育成にも取り組んでいる。

4. 材料開発分野の動向と展望

材料の特性や機能は最終製品価値に直結する競争力の源泉であるため、MI技術の研究開発や、それを活用した革新的な新材料開発の競争は激化している。また我が国の政策動向としても、データを基軸とした研究開発プラットフォームの整備とマテリアルデータの利活用促進に向けたデータ基盤整備や人材育成の取り組みが示されている[6]。

当社も上記動向を注視しつつ、社内横断でのデータの収集、蓄積、共有ならびに再利用を促進する新たなデータ収集基盤の構築と社内展開およびMI人材育成を進め、材料技術者自身が単独でもMI実践可能な体制を目指す。その結果として材料開発短期化を実現し、高効率な電子部品などの早期市場投入を通じて持続可能社会へ貢献していく。

参考文献

- [1] 朴尚洙, “全固体電池はマテリアルインフォマティクスで、変わるパナソニックの材料研究,” MONOist, <https://monoist.atmarkit.co.jp/mn/articles/1903/29/news063.html>, 参照 Oct. 20, 2021.
- [2] 横山智康 他, “有機無機ハイブリッド材料開発のデジタルイノベーション,” パナソニック技報, vol.67 no.2, pp. 72-77, 2021.
- [3] 大越孝洋 他, “ハイスループット計算と機械学習を活用した光機能性有機材料の新規構造探索,” パナソニック技報, vol.67, no.2, pp. 78-83, 2021.
- [4] Y. Sawada et al., “Conditional Generative Adversarial Networks for Inorganic Chemical Compositions,” Chem. Lett. vol.50, no.4, pp. 623-626, 2021.
- [5] 國吉房貴 他, “論文中に記載される合成プロセスの抽出手法の提案と全固体電池分野での評価,” 人工知能学会全国大会論文集, JSAI2020(0), pp. 3Rin460-3Rin460, Jun. 2020.
- [6] 内閣官房, “第5回イノベーション政策強化推進のための有識者会議「マテリアル戦略」議事次第（配付資料資料1：マテリアル革新力強化戦略案）,” https://www.cas.go.jp/jp/seisaku/material_senryaku/dai5/gijisidai.html, 参照 Oct. 20, 2021.

(注1) Microsoft Corp. の米国およびその他の国における登録商標または商標。