

2023年度 中国本部化学／繊維／金属部会第1回講演会

～マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用～

山口県 化学部門

伊藤 由実

化学/繊維/金属部会 副部会長



広島県 化学部門

下畑 祐介

化学/繊維/金属部会 幹事



1. はじめに

材料開発の分野では、機械学習等の情報科学（インフォマティクス）を用いることにより、開発効率を高めるマテリアルズ・インフォマティクス（MI:Materials Informatics）が著しく進展している。本講演会では①MIの基礎となる機械学習、②MIの金属材料への応用、③開発材料の最適な製造方法を探索するプロセス・インフォマティクスまで含めた産総研中国センターの「有機・バイオ材料拠点」での取り組みについて3件の講演を行った。

2. 「データ解析・機械学習の基礎」¹⁾

講演者：公益社団法人日本技術士会中国本部 化学/繊維/金属部会 副部会長 伊藤由実 氏



機械学習とは、蓄積されたデータの解析から予測モデルを構築し、新たなデータを用いてその予測モデルを自動で改善するコンピューターアルゴリズム（計算方法）である。その基礎的な手法は次の通りである。

(1) データの標準化

実験等で得たデータは、単位やデータ分布が大きく異なるものがある。正確な解析を行うためには、各データ（特徴量）のスケールを扱いやすいものに整える必要がある。そのために、標準化を行う。標準化は、特徴量の各データからその平均値を減じ、

標準偏差で除すことで、特徴量の平均値を0、標準偏差を1に変換する方法である。

(2) 主成分分析

予測モデルを構築するため、各特徴量間の相関関係を求めるが、特徴量の数が多くなると組み合わせが膨大となり、予測モデル構築が困難となる。そこで、主成分分析を用いて、各特徴量の情報を少数の主成分に圧縮（例えば x_1, x_2, x_3, x_4 の4つの特徴量を t_1, t_2 の2つの主成分に圧縮）する。

(3) 予測モデルの構築

予測モデルとして、線形重回帰分析モデル（例えば $y = a_1x_1 + a_2x_2 + b$ ）を用いる際は、説明変数（ x_1, x_2 ）間の相関が強いとモデルが不正確になる場合がある（多重共線性）。これを防ぐため、説明変数に対して主成分分析を行った後、無相関の主成分を用いて重回帰分析を行う主成分回帰等を用いる。

(4) モデルの適用範囲の設定

予測モデルが、推定性能を発揮できる説明変数の範囲を、データ密度等から決める。

3. 「機械学習による金属材料のプロセス・組織・特性の分析」²⁾

講演者：広島大学大学院 先進理工系科学研究科准教授 杉尾健次郎 氏



機械材料物理学研究室では、高機能・高性能

な金属・セラミックス・金属基複合材料の物理現象の解明と開発に関する研究が行われている。杉尾氏が部会長を務められる軽金属学会マテリアルズ・インフォマティクス研究部会では、データベースを中心としたプロセス・材料組織・材料特性の相互の関係性を機械学習により分析するシステムの開発が行われ、金属材料の研究開発に適用が図られている。データ駆動型の材料開発を可能とするためには、プロセス-組織-性質-パフォーマンス (PSPP) の関係性を見出すことが重要である。

(1) Web アプリケーションについて

研究室の試験機や評価装置を IoT 化することにより、インターネットサーバーでの実験データ収集から特徴量の抽出と収集、機械学習に至るまでの一連の研究作業を支えるシステム「MaterInfo」が整備された。本システムにより、研究活動の DX が推進されている。

(2) 研究事例について

Al-Si 鋳造合金の品質改良において、材料組織観察の画像処理結果から画像の平均自由行程 (IMFP) を抽出することにより、機械的性質 (強度、伸び) との関係性を評価できる。

4. 「産総研中国センターに設置された MPI 有機・バイオ材料拠点の概要と取組のご紹介」³⁾

講演者: 国立研究開発法人 産業技術総合研究所中国センター 所長 兼 材料・化学領域 機能化学研究部門 研究部門長
佐藤浩昭氏



産業技術総合研究所は、日本のイノベーション・エコシステムの中核として 12 研究拠点、7 研究領域で約 10,000 名が研究開発に携わる。中国センターは 2015 年 4 月より材料・化学領

域 機能化学研究部門に改組され、「材料診断」、「ものづくり診断」が看板研究とされる。国のマテリアル革新力強化戦略に基づき、「マテリアル・プロセス・イノベーションプラットフォーム」の有機・バイオ材料拠点とされた。

(1) 材料診断について

プラスチックなどの材料は素材メーカーから中間部材メーカー、セットメーカーを経て最終製品となる。しかし、これらのメーカー間で材料に関する情報交換が十分ではなく、我が国の強みである「擦り合わせ」を発揮できていない。そこで、産総研の最先端機器および専門家集団による材料診断により各企業の開発、製造における課題を解決する。さらにプロセス・インフォマティクスを用いた製造プロセスの最適化への試みも行っている。

(2) サーキュラーエコノミーへの対応

サーキュラーエコノミーにおける樹脂リサイクルは経済性があることが大前提である。再生樹脂から価値の高い製品を生み出すため、材料診断技術による再生樹脂の評価技術を開発し、再生樹脂の品質管理と使いこなしのための情報交換を推進している。

(3) 材料のバイオマス化への取り組み

ナノセルロールを用いた複合材料が開発されている。この開発でも、機械学習による物性予想等のデータ駆動型アプローチが推進されている。

5. 講演会参加者数

参加者 58 名 (会場 12 名、オンライン 46 名)
[17 都道府県、13 技術部門]

<出展・参考資料>

2023 年度中国本部化学／繊維／金属部会第 1 回講演会資料

- 1) 伊藤由実「データ解析・機械学習の基礎」
- 2) 杉尾健次郎「機械学習による金属材料のプロセス・組織・特性の分析」
- 3) 佐藤浩昭「産総研中国センターに設置された MPI 有機・バイオ材料拠点の概要と取組のご紹介」