

花王 デイリープラーニング技術を用いた新素材開発手法を開発

花王マテリアルサイエンス研究所と奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究情報科学領域の金谷重彦教授は共同で、材料工学分野にデイリープラーニング技術を活用する手法を開発した。今まで長期間を要していた素材開発の高速化に寄与するほか、A-Iがどのように予測をしているか明らかにすることで、新しい素材開発の手掛かりとなることも期待される。

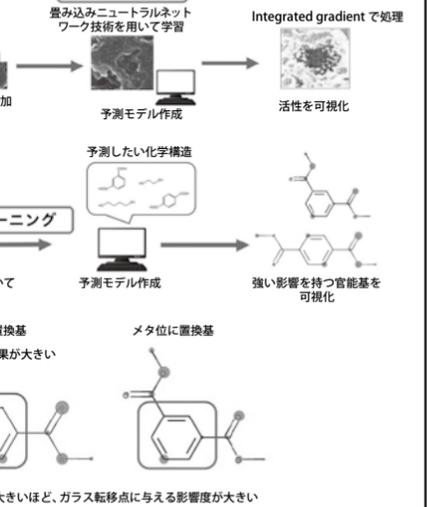
研究成果は、「第43回ケモインフォマティクス討論会」(2020年12月9日、オンライン開催)にて発表している。

商品開発を行うには優れた素材の開発が必要であり、洗剤の場合は界面活性剤が重要な素材の1つとなるが、今まで素材開発はトライアンドエラーを繰り返す方法で行われていたため、莫大な時間と費用が掛かっていた。その問題を解決するため、デイリープラーニングを用いてA-Iに大量のデータを学習させ、予測を行うことで開発プロセスを短くする方法を検討さ

性剤の製造などに用いられており、それを開発するには、化学反応を促進する効率を上げることが重要だ。今回、2級アミンとアルコールを反応させた時の銅触媒の微細な構造を電子顕微鏡で撮影し、活性が高かった場合、低かった場合の違いをデータから学習させることで、活性を上げる構造を予測するモデルを作成した。

電子顕微鏡写真143枚に対し、写真の一部を切り出す、複写する等の処理を行い、1万枚に増やしたものをデイリープラーニングで解析し、活

性予測モデルを作成するとともに、活性が触媒のどの場所で起こっているかを確認するため、画像を作成した。研究チームで、作成した予測モデルを確認したところ、非常に高精度なモデルの作成に成功したことがわかった。また、触媒中には反応原料が拡散するための穴であるメソポア(2-50nm)とマクロポア(50nm以上)が存在しているが、今回得た画像から、マクロポアの周辺の構造が活性に影響を与えているという具体的な予想が得られた。この知見を設計に活かすことで、より活性の高い触媒の開発につながると考えられる。



る物質で、洗剤の界面活性剤の製造などに用いられており、それを開発するには、化学反応を促進する効率を上げることが重要だ。今回、2級アミンとアルコールを反応させた時の銅触媒の微細な構造を電子顕微鏡で撮影し、活性が高かった場合、低かった場合の違いをデータから学習させることで、活性を上げる構造を予測するモデルを作成した。

電子顕微鏡写真143枚に対し、写真の一部を切り出す、複写する等の処理を行い、1万枚に増やしたものをデイリープラーニングで解析し、活

性予測モデルを作成するとともに、活性が触媒のどの場所で起こっているかを確認するため、画像を作成した。研究チームで、作成した予測モデルを確認したところ、非常に高精度なモデルの作成に成功したことがわかった。また、触媒中には反応原料が拡散するための穴であるメソポア(2-50nm)とマクロポア(50nm以上)が存在しているが、今回得た画像から、マクロポアの周辺の構造が活性に影響を与えているという具体的な予想が得られた。この知見を設計に活かすことで、より活性の高い触媒の開発につながると考えられる。

記者の窓

セブンイレブンがネットコンビニの展開を本格化する。18年10月に北海道で試験的に開始しその後、広島、東京都内に及び、現在400店舗で展開している。サービスを進化させリアルタイム在庫が確認できるほか、配達も2時間から最短30分に短縮された。配送はセイノードの子

会社で専門のGENIEが担う。セブンイレブンの配送サービスだけに特化し、高齢者の見守りサービスも行う。触媒は化学反応を速める物質で、洗剤の界面活

い、ミニスーパーの機能を果たしている。S M各社がネットスーパーを実施しているが、配送の枠が少なく、消費者の使い勝手がいまをさらに伸ばす可能性がある。21年度にネットコンビニを1000店に拡大すると発表している。一方のGENIEは全国展開を視野に入れている。ドラッグストアを含め、小

小商圈を巡る競争が一変

セブンイレブンはひとつである一方、S Mにとっても十分な配

小商圈を巡る競争が一変する。(F)

この技術は、他のさまざまな素材開発にも応用が可能であり、これまで研究者の経験に依存してきた素材開発の場面に、データ科学を取り込み、研究者の知見と融合することで、効率的に素材開発を行うことが可能になると考えられる。