

## AI活用のヒント【新材料開発】

# マテリアルズインフォマティクスへの AI活用





新材料開発を中心としたR&Dに革新をもたらす

# マテリアルズ インフォマティクス へのAI活用

特に材料・素材系の製造業では、素材や加工方法などの多数の条件を組み合わせることで試行錯誤しながら新製品の開発・研究を行っている。この工程をより効率的に行う方法として注目されているのが、物性科学にデジタルやデータサイエンスの技術を組み合わせた「マテリアルズインフォマティクス」だ。中でも、AI技術を用いた手法に注目が集まっており、本稿ではAI活用を民主化するAI Cloudプラットフォーム「DataRobot」や最適化アドオンの「InverSol」を活用して、研究開発業務をどのように効率化できるかを解説する。

## 物性予測を革新する マテリアルズインフォマティクス

いま製造業の製品開発の間でマテリアルズインフォマティクス (MI) が注目されている。この用語を説明する前に、まず材料開発における典型的な業務プロセスを見ていこう。担当者は開発しようとする製品のコンセプトに基づき複数の原料候補を選定し、それらの原料の配合パターンを考慮しつつさまざまな加工プロセスを試行する。複数の観点で試験を実施し、納得できる

結果が得られたならば、その材料を製品に投入する。

しかし、この試行錯誤には多大な労力とコスト、時間を要する。原料候補と加工方法の組み合わせが膨大になるため製品化の確率が低く、加工や試験で失敗を繰り返すことによる無駄なコストが発生し、リードタイムが長期化してしまう。

そこで注目されているのがMIである。AIや統計分析などデータサイエンスの手法を活用し、材料開発の効率を飛躍的に高めることができ、近年、さまざまな企業のR&Dの現場がこのMIを取り入れようとしている。

### <新製品開発における物性予測の効率化が課題>

#### 典型的な業務プロセス



#### 課題

- 製品化確率が低い (原料候補と加工方法の組み合わせが膨大)
- 無駄なコスト (原料費、加工費用)
- リードタイムが長い (加工や試験の時間)

## 機械学習の効率化を実現する「DataRobot」

日鉄ソリューションズでは、このMIを効率的に行うために、機械学習の自動化も行うAI Cloudプラットフォーム「DataRobot」を活用したアプローチを提供している。

機械学習にもさまざまな種類があるが、DataRobotは教師あり機械学習を強みとし、その活用を自動化する。もともとはAIのモデルを自動的に作成するツールとして誕生したものだが、現在は前提となるデータ準備からモデルのデプロイ、管理・監視まで適用範囲を拡張し、一貫したサービスを提供している。

機械学習の活用を主導するデータサイエンティストには、データ取得やデータ操作、データ理解、プログラミングなどのITから統計学など幅広い領域にまたがる知識とスキルが要求されてきた。当然のことながら、そうした高度な能力を持ち合わせた人材はめったにいないものではなく、採用は簡単ではない。先述したMIの取り組みにAIを活用しようと思っても、人材不足の問題から思うように進まないこともある。

この課題を解決するのがDataRobotである。DataRobotには業界最高レベルのデータサイエンティストのノウハウがあらかじめ実装されており、そのベストプラクティスに基づいてデータの前処理や最適なアルゴリズムの選定などが行われる。AIモデル作成にもプログラミングを行う必要はなく、GUI上で数クリックするだけで完了し、そのままデプロイまで行うことができる。

機械学習の活用で重い負担となっていた部分をDataRobotが代行することによって、データサイエンティストはプログラミング作業ではなく、パラメータの調整やデータのチューニング、モデルの検討など、よ

り本業に注力できるようになる。またデータサイエンティストが存在しない会社でも、自動で作成された複数のAIモデルを選択・検討しながら、より最適な原料候補や加工方法を特定していくためのヒントを得ることができる。

## 材料組成と加工条件から圧縮強度を予測

DataRobotを実際にどのような形で材料開発に適用することができるのか、コンクリート開発を例に挙げ、材料組成と加工条件からどの程度の圧縮強度を得ることができるかを予測する取り組みを見てみよう。

仮に「540 kg/m<sup>3</sup>のセメントと162 kg/m<sup>3</sup>の水を混ぜ合わせて28日経過したときのコンクリートの圧縮強度は79.99 MPa」、「332.5kg/m<sup>3</sup>のセメントと228 kg/m<sup>3</sup>の水を混ぜ合わせて270日経過したときのコンクリートの圧縮強度は40.27 MPa」といった過去データが社内に蓄積されているとしよう。このように材料配合組成や製造条件などのデータを教師データとして投入し、DataRobotは自動的に物性予測モデルを作成する。

ほかにも、セメントと水を混ぜ合わせる際にどんな方法を採用したか、加工時の温度はどれくらいだったか、どんな添加剤を使ったのかといった詳細なパラメータを併せてDataRobotに投入することで、物性予測モデルの精度をさらに向上することができる。

DataRobotは、異なるアルゴリズムに基づいた複数の物性予測モデルを提示することも可能だ。データサイエンティストはDataRobotから同時に示される説明やインサイト（気づき）に基づいて最適な物性予測モデルを選択することで、無駄な試行錯誤を省いた効率的な加工や試験を行い、要求仕様を満たしたコンクリートの圧縮強度を確保できる。結果として材料開発のコスト削減やリードタイム短縮につながっていく。

### < DataRobot デモ >

セメント (成分1) [kg/m <sup>3</sup> ]	高炉スラグ (成分2) [kg/m <sup>3</sup> ]	フライアッシュ (成分3) [kg/m <sup>3</sup> ]	水 (成分4) [kg/m <sup>3</sup> ]	高性能AE減水剤 (成分5) [kg/m <sup>3</sup> ]	粗骨材 (成分6) [kg/m <sup>3</sup> ]	細骨材 (成分7) [kg/m <sup>3</sup> ]	経過日数 (1~365)	コンクリート圧縮強度 [MPa]
540.0	0.0	0.0	162.0	2.5	1040.0	676.0	28	79.99
540.0	0.0	0.0	162.0	2.5	1055.0	676.0	28	61.89
332.5	142.5	0.0	228.0	0.0	932.0	594.0	270	40.27
332.5	142.5	0.0	228.0	0.0	932.0	594.0	365	41.05
198.6	132.4	0.0	192.0	0.0	978.4	825.5	360	44.30

過去データから生成したAIモデルを活用し、多数のパラメータの組み合わせからどのような結果が得られるかを予想できる



DataRobotで予測

## 分析は予測から処方へ

ただし機械学習から得られる物性予測モデルは万能ではないのも事実である。上記のコンクリート開発の例のように、内挿<sup>\*1</sup>において所定の条件を満たす数値を求めるケースであれば、難易度は比較的low、作成した物性予測モデルについても高い精度を得ることができる。

ところが過去実績を超える良い結果、すなわち外挿<sup>\*1</sup>における予測を行おうとすると途端に難易度は跳ね上がってしまう。例えば、過去に作った経験のない85.00MPaという圧縮硬度のコンクリートを作りたいという場合どうすればよいか。仮に過去データからセメントの割合を増やすほど圧縮硬度が上がるといった傾向が回帰直線上から明らかになったとしても、それが外挿部において正しいとは限らない。教師あり機械学習では過去のデータ（内挿領域）を元にモデルを作成するため、その範囲外（外挿領域）における予測値の妥当性を検証することは不可能である。

したがってMIにおいては、何が起るかを求める予測分析（Predictive Analytics）から、その先にある、どうしたらよいかを求める処方分析（Prescriptive Analytics）へとステップを進めることが重要となる。

ここまで述べてきたのはDataRobotに原料配合や操業条件、気象条件などの説明変数を入力し、そこから品質や物性、収益などの目的変数を出させる順問題のアプローチであった。これに対して処方分析で必要となるのは、満たさなければならない出力条件を獲得するための入力値を導き出す逆問題のアプローチである。

そこに向けて日鉄ソリューションズでは、DataRobotとネイティブに連携してこの逆問題を解くことのできるアド

オン製品の「InverSol」を提供している。

※1…機械学習における内挿とは教師データの数値の学習範囲内で得られた出力のこと。外挿とはその範囲外の数値で求められる出力のこと。

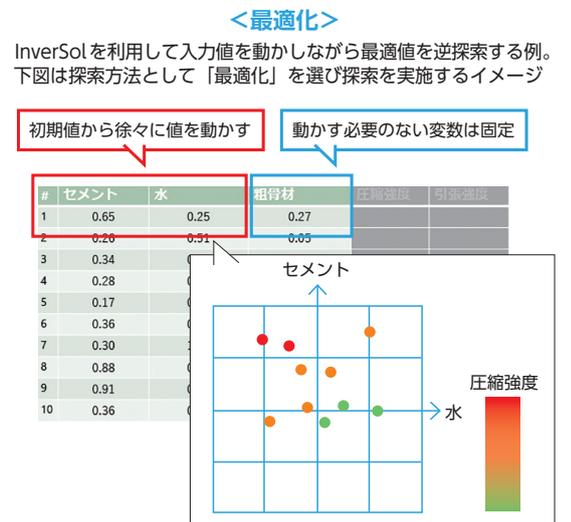
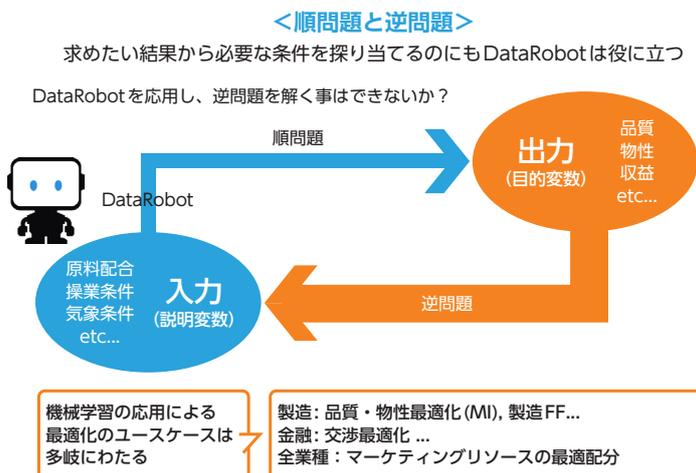
## DataRobot × InverSol 活用による 製品開発プロセスの効率化

DataRobotとInverSolを組み合わせることで、製品開発プロセスは具体的にどのように効率化されるか。

製品コンセプトに基づき原料候補を探索し、加工、試験を行うという標準的な業務プロセスを想定した場合、DataRobotの単体利用でも仮想シミュレーションによってある程度の効率化は可能だ。しかし、原料候補の入力については人間の担当者が明示的に探索を実施する必要がある。仮に10水準の項目が10個あった場合、組み合わせは100億(10<sup>10</sup>)パターンとなり、探索する変数の数やその水準数が増えるに従い組み合わせパターンは相乗的に膨らんでいく。予測できるとはいえ、こうした膨大なデータをすべて検証するのはほぼ不可能だ。

これに対してDataRobotにInverSolを組み合わせた場合、最適な入力（原料候補）の探索を自動化できる。探索に当たっては変数と可動範囲を設定するが、動かしたくない変数は固定しておくことも可能だ。またInverSolには次のような複数の探索方法があらかじめ組み込まれており、任意に選択することができる。

- ランダムサーチ：探索空間からランダムサンプリングした変数の組み合わせについて試行を繰り返す。
- グリッドサーチ：各変数および設定した候補について、すべての組み合わせをしらみ潰しにした探索を行う。
- 最適化：逐次的に最適値を探索する。InverSolでは近



年多方面から注目されているベイズ最適化もサポートしている。これは評価値が大きくなりそうな候補を重点的に観測し、逆に小さくなりそうな候補は観測しないという方法をとるもので、グリッドサーチと比べてモデルを評価する回数を大幅に抑えつつ最適解にたどりつける。

こうしたInverSolの逆解析によって生成された入力候補のパラメータに基づきテストを実施し、その結果の妥当性を確認する。さらに、そこから得られた実データをDataRobotにフィードバックして予測モデルに反映するといったサイクルを回すことでR&Dを加速させ、試作の精度を大幅に高めるほか、コスト削減やリードタイムの短縮を図ることが可能となるだろう。

## DataRobot × InverSol活用の応用例

なお、DataRobotとInverSolを組み合わせたソリューションはMIだけに限らず、さまざまな分野への応用が可能だ。例えば工場における後処理工程パラメータ最適化（フィードフォワード制御）も非常に有望である。

製造条件を事前に最適化した上で生産ラインを稼働させることで、品質不良リスクを低減し、歩留まり改善や安定生産につなげることができる。

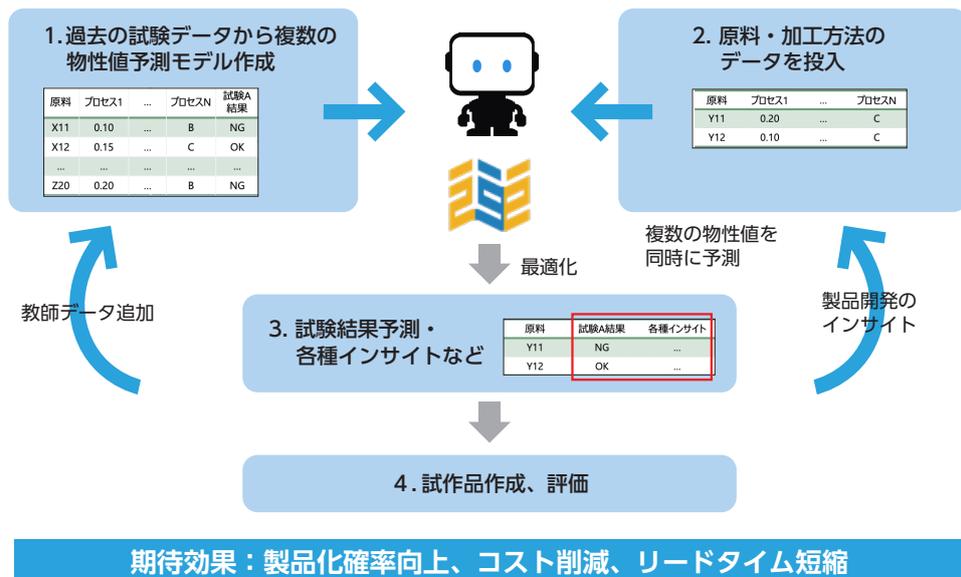
さらにマーケティング分野における施策の最適化といった活用も注目されている。これまでではどの顧客に、どのマーケティング施策をどの程度割り当てれば最大の投資対効果が得られるかがわからず、現場の営業担当者の勘に頼るしかなかった。

そこにDataRobotとInverSolを組み合わせることで、顧客ごとの過去の施策データと採用や売上実績から施策効果を予測するモデルを作成し、さらに与えられた制約の中で訪問回数やメール数などを策定するといった、顧客ごとの施策パターンを最適化することが可能になる。

このように、DataRobotやInverSolを用いることで、機械学習プログラム構築の手間を省力化して、データサイエンティストがよりデータに向き合う時間を確保するほか、データサイエンティストがいない企業でも、AI活用の障壁を引き下げることができる。日鉄ソリューションズでは、AIを用いた業務の効率化や高度化を支援していく。

### < DataRobot + InverSol の活用例 >

DataRobotとInverSolを利用した新製品開発の最適化イメージ



**日鉄ソリューションズ株式会社**  
 デジタルテクノロジー&ソリューション事業部 営業部  
 〒105-6417  
 東京都港区虎ノ門一丁目17番1号 虎ノ門ヒルズビジネスタワー  
 E-mail: dts-marketing@jp.nssol.nipponsteel.com  
<https://www.marketing.nssol.nipponsteel.com/>

- NS Solutions、NSロゴ、InverSol、InverSolロゴは日鉄ソリューションズ株式会社の登録商標です。
- その他、本文記載の会社名および製品名は、それぞれ各社の商標または登録商標です。