

A2-09

中部センター セラミックス・合金拠点における研究事例 ～微構造、製造条件を活用した材料特性予測 AI の開発～

古嶋亮一（産総研 マルチマテリアル研究部門）

セラミックス・合金はその用途によって多様に存在するが、どの材料においても目的の特性を持つ材料を製造するために、「作っては評価する」のループを繰り返して目的の特性に近づけていく手法がとられている。しかし、複雑な工程によって製造される近年の先進素材において「作っては評価する」のループにかかる時間のロスが大きく、より効率的に目的の特性を有する材料を開発する技術が求められている。その1つの切り口として、既存のデータを活用したデータ駆動型材料開発がある。中部センターはMP I 拠点の1つとして、材料開発に必要なデータを取得し、データ駆動型の材料開発に活用するための各種装置を整備している。

本講演では、窒化ケイ素セラミックスを例に挙げ、微構造写真を用いた材料特性予測 AI 開発及び製造条件を用いた材料特性予測 AI 開発の2例を示す。セラミックスの微構造は、曲げ強度や破壊靱性などの機械的特性に影響を与えているが、微細組織は複雑に関与してくるため、例えば、気孔率とか粒子サイズなどから単純に特性を予測するのは困難である。そこで、深層学習

を活用して微構造写真と機械的特性を関連付けたモデルを作成した。その結果、そのモデルから機械的特性を高精度に予測することができた^{1,2)}。本手法を用いることで、手間のかかる測定をすることなく、機械的特性を推定することができ評価時間の短縮に繋がる。一方、製造条件から熱伝導率を予測するモデルについては、サポートベクター回帰やランダムフォレスト回帰を用いている^{3,4)}。製造条件からの特性予測は、評価サンプルが不要なことからバーチャル実験が可能であり価値は高いが、その分ハードルも高い。製造条件のみで精度の高い予測は困難であり、製造条件に加えて特性に関連のある情報をどのように見つけるのが鍵となる。Fig.1 には窒化ケイ素の熱伝導率を予測するために構築した AI の概念図を示している。熱伝導率に関連の高い物性値である密度を製造条件から予測し、さらに焼結助剤に関する専門家の知見を数値化したものを入力情報（説明変数）として用いることで、予測したい変数（目的変数）である熱伝導率を高い精度で予測することができるようになった。

今回紹介した2つの手法以外にも、AI の予測の根拠を明らかにする手法など、材料特性予測に必要な AI 技術を交え、紹介していく予定である。

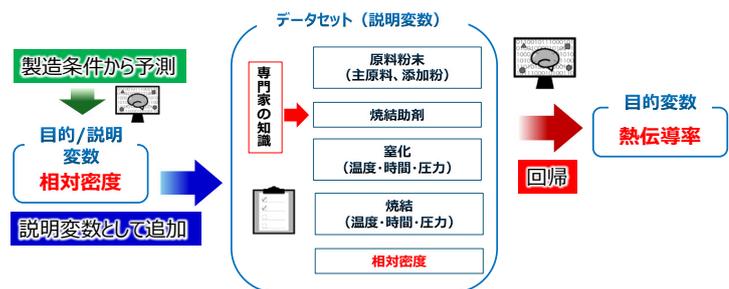


Fig.1 窒化ケイ素の熱伝導率予測のためのマルチレイヤー型AIの概念図

- 1) R.Furushima et al., J Am. Ceram. Soc. (2022) **106**(2) 817-821.
- 2) R.Furushima et al., J Am. Ceram. Soc. (2023) **106**(8) 4944-4954.
- 3) R.Furushima et al., Ceram. Int. (2024) **50**(5) 8520-8526.
- 4) R.Furushima et al., Ceram. Int. (2024) **50**(13) 24008-24015.

PROFILE

古嶋亮一（国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域 マルチマテリアル研究部門 軽量金属設計グループ・研究グループ長）

2008年3月東京工業大学大学院理工学研究科材料工学専攻 博士（工学）後期過程修了、2008年4月長岡技術科学大学産学融合トップランナー養成センター産学連携研究員、2012年産業技術総合研究所に入所、2024年現在 産業技術総合研究所マルチマテリアル研究部門軽量金属設計グループグループ長。専門は粉末冶金、材料評価 AI。セラミックス、合金などの種々の材料の特性を予測する AI の開発を行っている。所属学会は粉体粉末冶金協会、日本セラミックス協会、粉体工学会。