

「AI解析による熱硬化性樹脂合成の試行回数削減」

ADMAT : 中陳巧勤、藤田俊雄 昭和電工株式会社: 南拓也、奥野好成、大森和弘、室伏克己
共同研究: AIST 川田正晃、藤谷忠博

1. 背景

想定される出口 高性能樹脂材料、熱硬化型フレキシブル透明樹脂
社会への貢献 IoT時代の新たなICT機器、ウェアラブルデバイスの性能向上が図られ、
人々の豊かなライフスタイルが実現される

超超プロジェクトで
取得したい解決策

IoT時代のモノ作り
効率的な材料設計技術
迅速な試作・評価技術

材料開発への課題

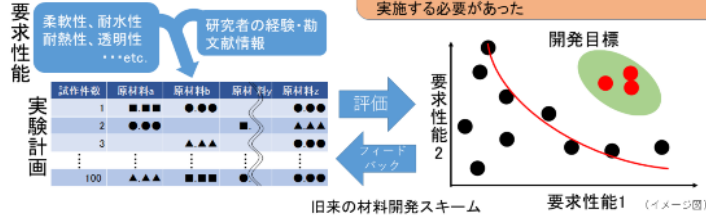
製品多様化(要求性能高度化・複雑化)

製品寿命サイクル短縮(開発リードタイム短縮)

高性能樹脂材料開発

要求性能を満たす樹脂組成にたどり着くまで
試行錯誤を繰り返す必要がある

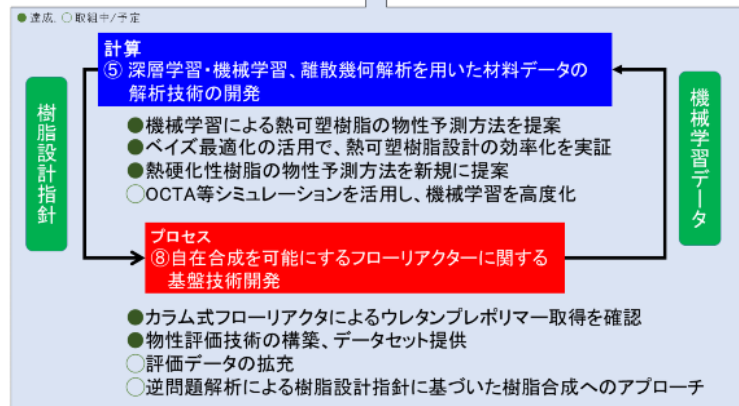
(事例) ソルダーレジスト用ウレタン樹脂
SDKでは800種類にも及ぶ原料の組み合わせから、
実際に100種の候補化合物を合成し、物性測定を
実施する必要があった



3. 開発項目と進捗状況

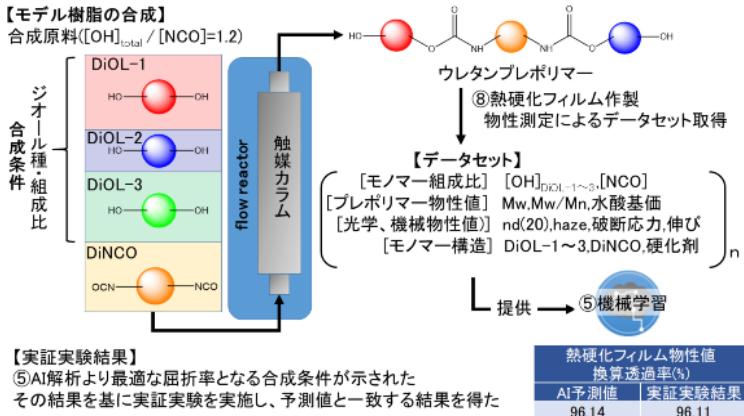
AI解析を活用した材料の高速開発化

目標: モノマー構造の最適解に達する迄の
(組み合わせの試行回数×試作・評価所要時間)で1/20に短縮



5. 進捗状況【⑧プロセス】モデル樹脂の合成とデータセットとの取得

- 種々のジオール化合物の組成をもつウレタンプレポリマーを合成
- 硬化フィルムの物性測定によってAI解析用データセットを取得
- AIが予測した条件を基にしたプレポリマー合成の実証実験を実施



2. 開発目標

熱硬化型のフレキシブルかつ透明な高性能樹脂材料をAI解析を活用して開発する



出口材料: 熱硬化型フレキシブル透明樹脂

ウレタン樹脂をモデル化合物として検討し、⑤、⑧との連携によって
材料の開発に取り組む

数値目標	2022年市場規模予測		
	生産量(km ²)	占有率(%)	
透過率 ≥ 85%	PET	33,200	77.6
Haze ≤ 5%	COP	8,000	18.7
引張伸び率 ≥ 50%	耐熱樹脂	1,600	3.7
熱安定性 ΔT% ≤ 5% (100°C, 85°C-85%RH)			

出典: 富士経済(2018年)

4. 進捗状況【⑤計算科学】熱硬化性樹脂の物性予測

- 実測結果を再現するAIモデルの構築
- 目的物性の最適値をAI予測する

【AIモデルの構築】

原料モノマーの構造式に基づく樹脂物性予測を実施

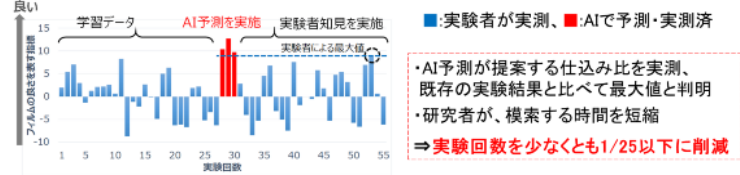
	データ数	R ²	評価
換算透過率[%]	27	0.801	○
破断応力[Mpa]	27	0.618	△
伸び[%GL]	27	0.453	×

評価基準: ○: 0.8 ≤ R² ≤ 1.0, △: 0.5 ≤ R² < 0.8, ×: R² ≤ 0.5

入力データ: 原料モノマーの分子構造、モル数、プレポリマーの水酸基数

【目的物性の最適値をAI予測】

指標(換算透過率、破断応力、伸び)の最高値の配合を予測・実測



6. 今後の取り組み

1. 令和元年度までの成果・トピックス

- 機械学習による熱可塑性樹脂の物性予測方法を提案
- ベイズ最適化による熱可塑性樹脂設計の効率化を実証
- 熱硬化性樹脂の物性予測方法を新規に提案
- 熱硬化性樹脂のAI学習モデルを構築し、最適配合の提案・実測
- フローリアクタに適したウレタン化触媒を開発
- 特許出願4件、学会発表7件、論文3件、プレスリリース2件

2. 今後の取り組み、課題

⑤【計算科学】

- AI学習モデルのブラッシュアップ
⇒説明変数の最適化による予測精度向上
⇒原料の種類を増やした実測データへ対応できるAI学習モデルを構築
- OCTAなどのシミュレーション手法を用いたAI学習を高度化
⇒シミュレーションによるデータセット生成

⑧【プロセス】

- 評価データの拡充
- 逆問題解析による樹脂設計指針に基づいた樹脂合成へのアプローチ