

ゴム材料開発への『機械学習』の適用

取組のきっかけ

- ◆ ゴム材料開発では、材料補強のため母材ゴムにフィラーと呼ばれる充填剤を加えます。フィラーに表面処理を施すと、ゴムとのなじみややすさが改善され補強効果が向上します。
- ◆ 機械学習を活用し、膨大な種類の表面処理剤の中から、ゴムとなじみのよい物質を迅速に探索したいと考えました。

成果の概要

- ◆ 低分子化合物の化学構造をデータとして用いることで、機械学習により、ゴムとなじみのよい表面処理剤を見つけることができました。

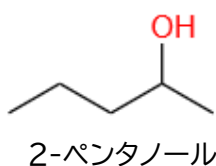
機械学習を行うには数値データが必要です。
化学構造式を以下のように数値化します。



化学構造式

SMILES記法に変換

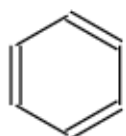
フィンガープリント変換(数値化)



CCCC(C)O



(0, 1, 1, 1, 0, ……)



ベンゼン



c1ccccc1



(1, 0, 0, 1, 0, ……)

機械学習に入力するための化学構造のデータ変換イメージ

成果の活用方法

- ◆ ゴム、プラスチック等となじみのよい物質を迅速に探索できます。
- ◆ 化学構造を入力データとして機械学習ができます。