

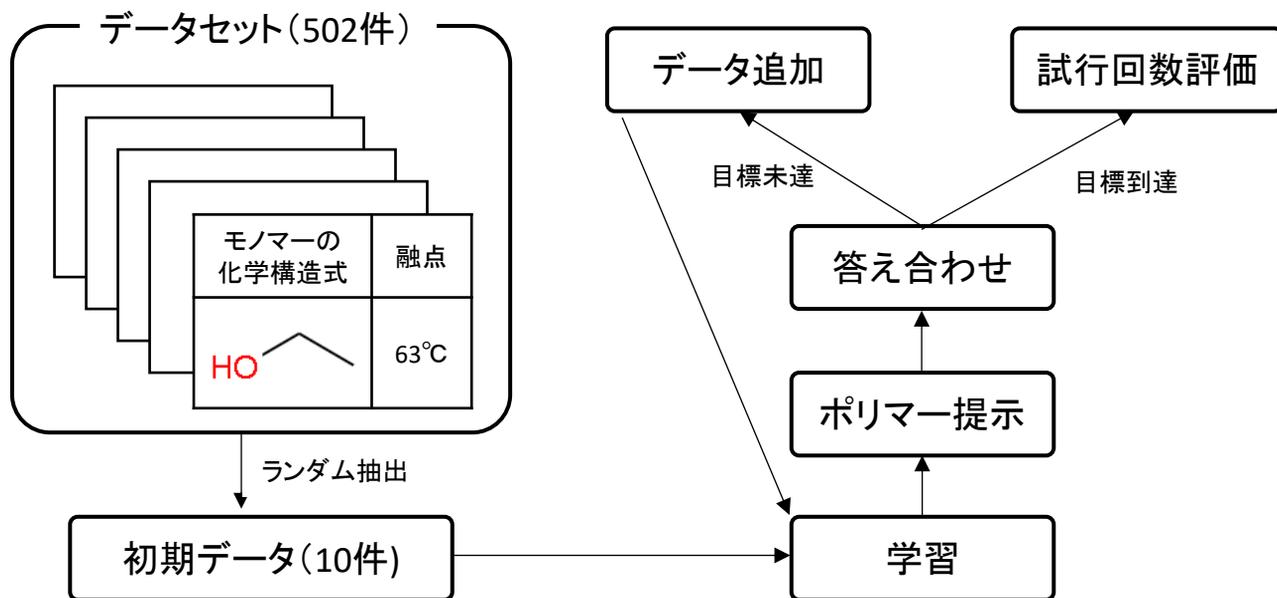
バイズ最適化を活用した 高分子材料設計の試行回数低減

取組のきっかけ

- ◆ 高分子材料の開発において、構造／配合／製造条件等のパラメータは複雑になる場合が多く、効率的な探索方法が求められています。
- ◆ バイズ最適化を活用し、小規模データから少ない工数でパラメータの最適化を試みます。

成果の概要

- ◆ 初期データ10件で開始し、平均12.5回の試行でデータセット内で最も融点の高いポリマーに到達することができました。
- ◆ 探索範囲を約10,000件の生成した化学構造に拡張し、2回目の試行でさらに高融点のポリマーを探索することができました。



成果の活用方法

- ◆ 構造／配合／製造条件等のパラメータを、効率的に探索することができます。初期データが数件程度の少ない場合にも適用できます。