

データサイエンスによる実験効率化コンサル

新規材料開発の実験条件最適化を、データサイエンスの各種技術でお手伝いいたします。

概要：過去の実験データを用いて次回の実験条件を最適化

- お客様の材料開発実験データから、最適な次回実験条件を統計手法「ベイズ最適化」を用いて決定し、実験の効率化のためのコンサルテーションを行います。
- 画像セグメンテーション、実験データからの特徴量抽出自動化等と組み合わせ、埋もれている過去のデータを最大限活用します。

ベイズ最適化とは

- 図1にベイズ最適化の概念図を示します。これまでの実験データから材料特性の予測モデルを構築しますが、その際、予測値の分散も同時に推定します。
- 次回の製造(実験)条件は、予測モデルの予測値だけでなく、その分散を考慮して決定します。
- 予測値の分散が大きい条件(モデルの精度が低い条件)では、より良い材料特性が得られる可能性があります。
- 仮に良い材料特性が得られなくとも、その実験条件周りのモデルの精度が高くなり、次回製造(実験)条件の効率的な探索に繋がります。

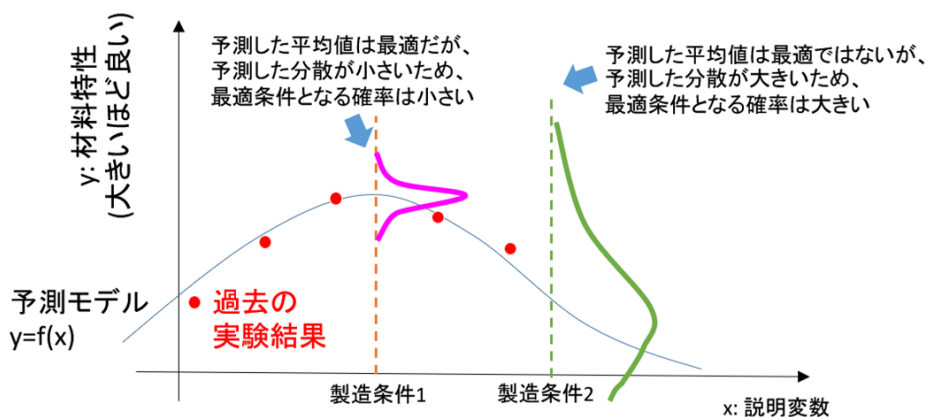


図1 ベイズ最適化の概念図

過去の実験データの活用

- 予測モデルを構築するには実験データが定量化されている必要があります。材料の組成、温度、反応時間等の数値データはそのまま予測モデルに使用できます。
- 電子顕微鏡、CT等、実験結果が画像データとして得られる種類の実験の場合、そのままでは予測モデルに使えません。そこで、画像セグメンテーションを用いて定量化します。
- 図2に画像セグメンテーションの概念図を示します。問題に合わせて、お客様のお手持ちの画像データを用いてセグメンテーションモデルの学習を行います。セグメンテーション結果から、体積分率、平均粒径等の定量的な情報が得られ、予測モデルの構築に使えるデータが得られます。
- 過去の実験結果がデジタル化されておらず、紙上にグラフがプロットされている場合、OCRでグラフを読み込み、画像処理で数値化した上で、ピークの位置や直線の傾きを自動的に抽出し、定量化されたデータを予測モデルに使用することが可能です。
- お客様の材料開発において、データサイエンスの各種技術をどのように用いて実験を効率化するか、コンサルテーションを通じてお手伝いいたします。

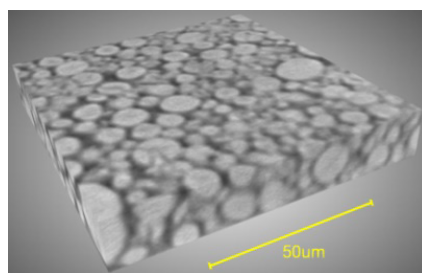


図2A リチウムイオン電池正極塗膜CT画像

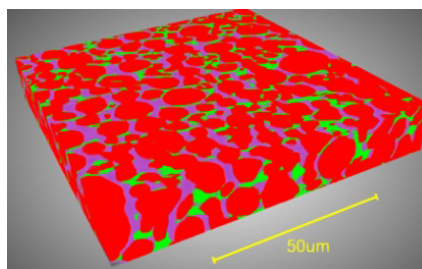


図2B 物質ごとの体積分率を抽出