

インターンシップ報告書

所属：新領域創成科学研究科 物質系専攻
寺嶋・伊藤研究室

学年・学籍番号・氏名：博士課程 3年 47-217003 稲田祐樹
指導教員：寺嶋和夫教授

メールアドレス：inada-yuki021@g.ecc.u-tokyo.ac.jp
電話：04-7136-3797

1. インターンシップの概要

インターンシップ先：日本ゼオン株式会社 総合開発センター 基盤技術研究所

期間：2023年2月1日～2023年3月31日

業務形態：オンラインと出社のハイブリッド形式。週に二日の頻度で総合開発センターへ出社。

受入担当者：研究企画管理部 部長 松原哲明 / 担当 角替靖男

指導担当者：基盤技術研究所 所長 小野裕己 / 担当 代田陸

テーマ：

(1) ゴム配合探索プログラムの高速化

(2) トナー断面の SEM 画像をもとにした三次元顔料分布の推算

志望背景：

日本ゼオン株式会社は、主に合成ゴムや樹脂材料などの高分子材料を取り扱っている。私の大学での研究は無機材料を対象としたマテリアルズインフォマティクスであるが、隣接分野である有機材料のデータ分析をテーマとした研究の経験によって、今後の研究活動においてより視野を広げることができると考えた。また、企業での実運用を想定したデータ分析に取り組むことで、自身の大学での研究についてもより実用性を高めた成果をあげるための知見や経験が得られると期待し、本インターンシップへの参加を希望した。

2. インターンシップテーマと成果

(1) ゴム配合探索プログラムの高速化

日本ゼオン株式会社においては、所望の物性の条件を満たすゴム配合の迅速な提案のために、機械学習の活用を試みている。ゴム配合から物性を予測する機械学習モデルを使用し、所望の物性のゴム配合を提案するプログラムを、本インターンシップで主に指導を担当して下さった代田様が作成していた。このプログラムは、その場でリアルタイムに予測結果を表示することを目標に作成されているが、実行に一分程度かかるなど、実行速度が十分でないという問題があった。

このプログラムに対して、探索する配合候補の数をより柔軟に調整できるように変更を加えた上、より探索空間が広い場合に良い性能となる探索手法である山登り法を提案、実装した。結果として、100件程度の予測結果を数秒で出力できるようになり、実用的な実行速度となった。

(2) トナー断面の SEM 画像をもとにした三次元顔料分布の推算

高品質なトナーを生産する上で、トナーの帯電状態が重要である。トナーの製造において、帯電状態のばらつきや低下が発生する場合があります。この原因究明のためにトナーの内部の状態を観測、分析することが求められている。しかしトナーの内部について得られるデータは基本的に断面の SEM 画像であり、直接的に三次元の情報を得るのは難しい。

今回は、トナーの断面から得られる、断面の半径と顔料の位置、大きさの情報から、トナー内部の三

次元的な情報を推測することを試みた。手法として、球状のトナーとその内部の顔料分布をモデル化して様々な条件でシミュレーションを行い、その結果と実際のトナーのデータを比較した。具体的には、トナーのサイズと断面の半径の関係、トナー内部の顔料の配置の偏り、トナー内部で顔料が占める体積について、この検討を行った。

結果として、断面の半径からの元のトナーのサイズの推定、顔料がトナー内で一様に分布しているかの判別、トナーの断面に占める顔料の面積の割合からのトナー中の顔料の体積の割合の推定が可能となった。なお、本課題ではまだモデル化に取り入れられていない要素もあり、より実態に即したシミュレーションに発展させることで、トナーの内部情報をより正確に把握できるようになると期待される。

これらをまとめた結果を、インターンシップの最終報告会という形で発表した。

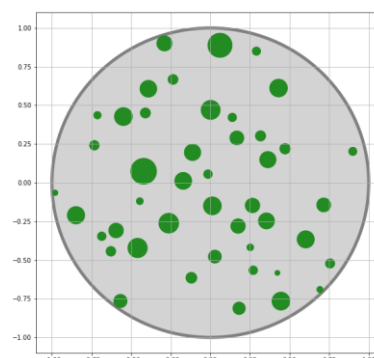


図. シミュレーションで作成されたトナー断面の例。
緑の点が顔料に対応。

3. 感想

本インターンシップにおいて、企業の研究開発におけるデータ活用が着々と進んでいる様子を肌で感じることができ、非常に良い刺激となったと感じている。同時に、データの蓄積や整備など、一朝一夕では解決の難しい課題も存在していることを認識し、データの収集と分析の両方の面での今後の発展の必要性を実感した。

インターンシップの最中においては、様々な分野のご専門の方々のご意見を伺うことが、どのように分析を進めていくか、どういう方向性のプログラムが役に立つのかといった方針の決定の大きな助けとなった。ゴム配合探索プログラムのテーマでは、実際にどのようにゴムが作られ、データが取られているのかという研究の場を見学させていただくことで、データや目的に対する理解を深めることができた。また、SEM 画像解析のテーマにおいては、どのように分析を進めるのかまだ方針が定まっていない状態からの議論に参加させていただいたことで、様々な観点から意見交換を行うことの重要性を感じた。自分の専門外の分野の話に対しても積極的に理解を試みることや、逆に専門の違うの方々に対して手法や結果を分かりやすく説明することが、充実した議論をするために大事であることを実感した。

以上の点については、普段の研究においても重要であるが、今回、普段と異なる分野で、多くの方々が関わる研究に参加させていただいたことで、その重要性をよりはっきりと再認識することができた。今後の研究活動や、企業で働くことを考えても、大きな糧となるインターンシップとなったと思う。

4. 謝辞

二か月間の長期インターンシップを受け入れてくださった日本ゼオン株式会社の皆様に、心から感謝申し上げます。小野様や代田様をはじめとした基盤技術研究所の皆様には、テーマの提案や議論のみならず、さまざまな交流の場を用意していただくなど、多くの面でお世話になりました。その他にも、様々な方からご助言などをいただく機会が多くあり、非常に有意義な時間を過ごすことができました。また、研究企画管理部の角替様と GMSI 事務局の青木様には、様々な事務手続きなどに対応していただき、大変お世話になりました。

本インターンシップで関わったすべての方々に、重ねて御礼申し上げます。