

## 材料性能に寄与する物理化学的特徴を見出すための MI ソフトウェアシステムとその応用

○永井詩織（株式会社島津製作所）

MI Software System and Applications for Finding Physicochemical Features that Improve Material Properties (*Shimadzu Corporation*) ○Shiori Nagai

Shimadzu Corporation is developing software systems and data processing algorithms to promote materials informatics (MI) which focuses on utilization of analytical instrument data generated by gas chromatography, infrared spectroscopy and other instruments. In general, MI analysis using the composition of material and synthesis conditions is able to find the optimal combination of parameters to achieve the target performance, although it is difficult to explain why. On the other hand, if we perform a regression analysis using the feature quantities obtained from the analytical instrument data of the material as explanatory variables, the performance of the material as objective variables, we can obtain clues to find out the physical features and chemical components that contributing to the performance of the material. We believe that combining the information obtained through such analysis with expertise and experiential knowledge from researchers and developers in material field, it would be easier to form hypothesis and lead to speeding up development.

In order to utilize analytical instrument data smoothly for MI analysis, two functions are required: (1) function to collect and organize dataset used for machine learning, and (2) function of data processing for feature extraction and data standardization. In this talk, we will introduce our efforts to realize the function (1) and the software systems under development. For function (2), we will explain the data processing that corrects the retention time misalignment of a group of chromatogram data with an illustrative case.

島津製作所は、ガスクロマトグラフィーや赤外分光法などに代表される分析機器データの活用に重点を置いたマテリアルズ・インフォマティクス(MI)を推進するためのソフトウェアシステムおよびデータ処理アルゴリズムの開発を進めている。一般に、材料の組成や合成条件を用いた MI 解析では目標性能の達成のために最適なパラメータの組み合わせを見つけることが出来ても、その根拠を説明するのが難しかった。それに対して、例えば、材料の分析機器データから得られる特徴量を説明変数とし材料性能を目的変数とする回帰分析を行えば、その性能に寄与する物理的特徴や化学的成分の手掛かりを得ることができる。このような解析で得られた情報を材料開発に従事する研究開発者の専門知や経験知と結びつけることで、仮説形成が容易になり開発のスピードアップにつながると考えている。

MI 解析で分析機器データをスムーズに利用するためには、(1)機械学習に利用したいデータ群を集めて整理できる機能、(2)特徴量抽出や規格化のためのデータ処理機能の 2 つが必要になる。本講演では、(1)の機能実現に向けた取り組みと開発中のソフトウェアシステムを紹介し、(2)の機能についてはクロマトグラムデータ群の保持時間ずれを補正するデータ処理を例示的なケースで説明する。