

ファンケル・キリン・慶應義塾大学の共同研究で AI技術・シミュレーション技術を用いた新たな洗浄剤開発プロセスを検討 — 高いメイク落とし機能を有する洗浄剤の製品開発へ応用 —

キリンホールディングス株式会社（社長 磯崎功典 以下キリン）は、株式会社ファンケル（社長 島田和幸 以下ファンケル）と慶應義塾大学（塾長 伊藤公平）の三者で、新たな洗浄剤の開発プロセスに関する研究を行ってきました。

その結果、ファンケルが蓄積した実験データをもとに、キリンの機械学習技術^{※1}と慶應義塾大学の分子シミュレーション技術^{※2}を組み合わせることで、洗浄剤のメイクを落とす性能を、高い精度でスピーディーに予測できるシステム構築の可能性を見出しました。

本研究成果に関しては、2022年9月20日（火）から9月22日（木）に開催された第32回国際化粧品技術者会連盟（IFSCC）ロンドン大会2022にて、ファンケルおよび慶應義塾大学と共同で発表しました。

※1 AI技術のうちデータを分析する方法の1つ。コンピューターがデータから反復的に学習し、そこに含むパターンを見つけ出すことを示す。今回の例では、洗浄剤の原料とメイク落とし性能の両方のデータを含んだデータをコンピューターに学習させ、未知の洗浄剤のメイク落とし性能を予想する機能を有している。

※2 コンピューター内の仮想空間で原子・分子の動きを再現し、物理現象を分子レベルで解析する手法のこと。

【研究背景・目的】

ファンケルでは洗浄剤に関するさまざまな研究を行ってきました。近年では、女性の社会進出に伴う時短ニーズや、環境負荷低減意識が高まっている社会状況を踏まえ、クレンジング料と洗顔料の機能を1本に併せ持つ水性洗浄剤の開発に着手しました。今回、製品開発のプロセスに機械学習技術と分子シミュレーション技術を採用することで、無限に存在する化粧品原料の組み合わせから、高いメイク落とし性能を有する最適な組み合わせをスピーディーに見出し、革新的な製品を上市することを目指してキリンおよび慶應義塾大学と共同研究を行いました。

● 研究方法・結果

【メイク落としの性能をAIを用いて予測するシステムの基礎を検討】

ファンケルは2016年から、市販のウォータープルーフアイライナーと人工皮革でメイク汚れの除去率を計算し、洗浄率を算出して500以上の実測データを蓄積しています。今回このデータを、キリンが有する機械学習技術を活用し、メイク落としの性能を予測するシステムを構築しました。

洗浄剤の成分組成と洗浄率のデータに加え、使用した成分の鎖長の長さや分子の大きさなどの分子構造から得られる情報を成分のデータベースを用いて数値化し機械学習技術に加えることで、高い精度（決定係数^{※3} $R^2=0.765$ ）で洗浄率を予測できました（図1）。

※3 機械学習技術によって推定された値の当てはまりの良さを示す指標。0から1までの値を取り、1に近いほど、予測値が実際のデータに当てはまっていることを示す。

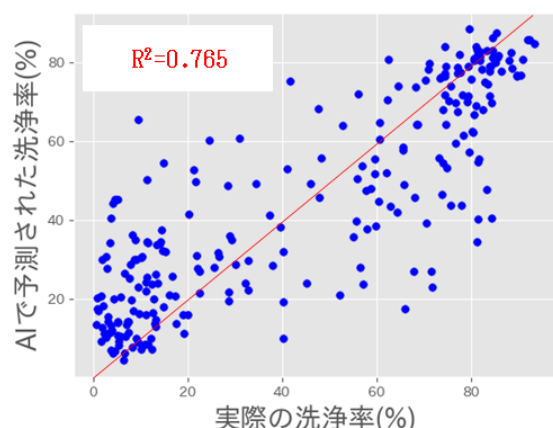


図1 洗浄率のAI予測値と実測値の比較

【キリンの機械学習技術】

キリンは、業務の飛躍的な効率化や、創出された時間で価値創造を行うためにビール新商品開発をサポートする「醸造匠 AI」などの開発を進め、機械学習技術の知見を蓄積してきました。化粧品原料は1万種類以上あり、その組み合わせは膨大な数となります。今回、クレンジング剤の開発に当社が培ってきた機械学習技術を応用することで、効率的に高機能な商品の開発を目指します。

【洗浄率予測システムにより予測した洗浄率と実際の洗浄率が概ね一致したことを確認】

本研究で構築した洗浄率予測システムを用い、キリンの機械学習技術を活用し、コンピューター上で 10 万通りの計算を行いました。その結果、界面活性剤の中でファンケルの独自原料であるヘキサカプリル酸ポリグリセリル-20^{※4}が最も高いメイク落とし性能を有し、さらに保湿剤である PPG-9 ジグリセリル^{※5}やシクロヘキシルグリセリン^{※6}などの特定の成分との組み合わせが、高い洗浄率に寄与する傾向があることが判明しました（図 2）。

10 万通りの計算結果から、前述の成分を含む予測洗浄率が最も高いと予測されるモデル洗浄剤を試作してメイク落としの性能を評価したところ、予測洗浄率と実際の洗浄率が概ね一致しました。また、図 3 に示すとおり、各種メイクだけでなく、皮脂・泥などのさまざまな汚れに対して高い洗浄性能を有することが確認できました。

※4 ノニオン界面活性剤（非イオン性界面活性剤）に分類される洗浄成分。ファンケルが独自開発した原料であり、マイルドクレンジングオイルなどに採用実績がある。

※5 保湿効果が高いにもかかわらずベタつき感の少ない、肌になじみの良い保湿成分。

※6 保湿効果が高いにもかかわらずベタつき感の少ない、肌になじみの良い保湿成分。

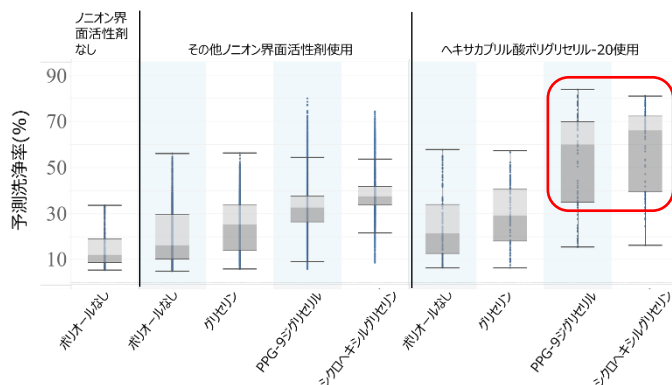


図 2 界面活性剤と保湿剤の組み合わせによる予測洗浄率の傾向



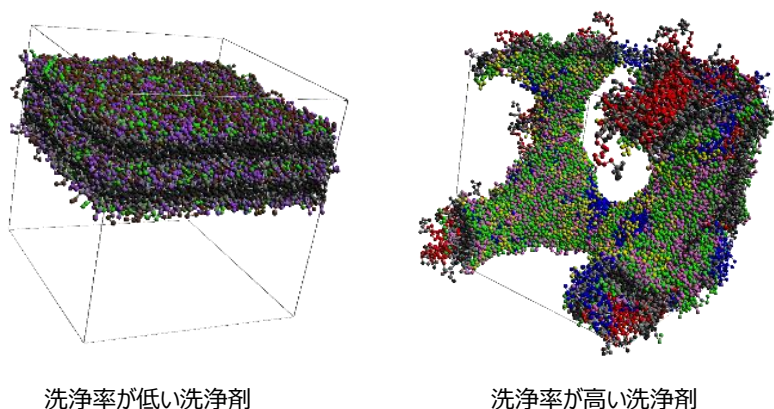
図 3 モデル洗浄剤の各種汚れに対する洗浄効果
左画像の上から、アイライナー、フィルムマスカラ、口紅、クリームファンデーション、赤色に着色した皮脂、泥汚れを示し、右画像は洗浄後の状態

【分子シミュレーション技術でクレンジング剤のメカニズムを解明】

さらなる予測精度向上を目指し、慶應義塾大学の分子シミュレーション技術を取り入れることを検討しました。洗浄剤のメイクを落とす性能は、使用する界面活性剤分子の構造に加え、界面活性剤を形成する集合構造や、汚れに対する吸着状態に強く左右されると考えられます。そこで慶應義塾大学が DPD 法^{※7}と呼ばれる分子シミュレーション技術を用いて、モデル洗浄剤の分子の構造や動きをコンピューター上でシミュレーションしました。100 種類以上の組み合わせでシミュレーションを行った結果、実際の洗浄率と、汚れに対する吸着の仕方のシミュレーション結果に相関があることを見出しました。

さらに、洗浄率が高い洗浄剤と低い洗浄剤では、水中で形成される構造に特徴的な違いがあることが明らかになりました（図 4）。今後は分子シミュレーションの結果から得られたデータを機械学習に組み込み、洗浄率予測システムの精度向上および実用化に向けた検討を進めていきます。

※7 分子シミュレーションの一種であり、原子や分子をある程度ひとまとめにして扱うことで、従来の分子シミュレーションよりも多成分・複雑な混合系の現象を再現できる解析手法。



【コンピューター上で再現された洗浄剤に配合している成分が形成する構造の例】

洗浄率が低い洗浄剤（左）に比べて洗浄率が高い洗浄剤（右）は複雑な構造をとっていることが分かる。

図 4 DPD 法による分子シミュレーション結果

【今後の展開】

ファンケルは、今後も分子シミュレーションによって得られた情報を機械学習に加え、予測精度向上に取り組むとともに、本研究で得られた成果から、高いメイク落とし機能を有する洗浄剤の製品化に向けて検討を進めていきます。また、AI 技術を用いた製品開発プロセスは、将来的には他の製品開発へ水平展開していくことを視野に入れて研究を継続していきます。

キリンは、機械学習技術、シミュレーション技術、さらに両方を併用する技術の活用は、ヘルスサイエンス事業をはじめとする各種事業の研究開発に広く展開できると考えています。今後、本研究で得られた知見を踏まえ、研究開発のさらなる基盤構築を目指し、お客様に新しい価値をお届けしていきます。

キリングroupは長期経営構想「キリングroup・ビジョン 2027」を策定し、「食から医にわたる領域で価値を創造し、世界の CSV^{※8} 先進企業になる」ことを目指しています。その実現に向けて、既存事業の「食領域」（酒類・飲料事業）と「医領域」（医薬事業）に加え、キリングroupが長年培ってきた高度な「発酵・バイオ」の技術をベースにして、人々の健康に貢献していく「ヘルスサイエンス領域」（ヘルスサイエンス事業）を立ち上げ、育成を進めています。ヘルスサイエンス領域では、「免疫」および「脳機能」などを重点領域に定め、さまざまな研究開発を行っています。

キリングroupは、自然と人を見つめるものづくりで、「食と健康」の新たなよるこびを広げ、こころ豊かな社会の実現に貢献します。

※8 Creating Shared Value の略。お客様や社会と共有できる価値の創造。

以上