

## 《技術》

初校

## 2. サーキュラーエコノミーに向けたプラスチック DX 戦略

内藤 昌信\*

## はじめに

プラスチックは、その軽量性、安価さ、加工のしやすさといった特徴から、現代生活に欠かせない材料である。しかし、大量消費に伴い、海洋プラスチックごみの増加や、天然資源および生物多様性への影響など、深刻な環境負荷が顕在化している。そのため、大量生産・大量消費・大量廃棄を前提とした「リニアエコノミーモデル」から、製品や資源を長期間活用し、廃棄物を資源として循環させる「循環経済（サーキュラーエコノミー、CE）システム」への移行が、地球規模での課題となっている。軽量で加工性に優れたプラスチックは、金属やセラミックスと比較して、製造や輸送の過程で高い二酸化炭素削減効果が期待される。一方で、一般社団法人プラスチック循環利用協会の報告によると、日本では廃棄されたプラスチックの63%が焼却処分され、熱エネルギーを再利用するサーマルリサイクルに依存している<sup>1)</sup>。これに対し、循環経済の先進国である欧州では、サーマルリサイクルは資源循環と見なされず、マテリアルリサイクルやケミカルリサイクルの技術が進展している。また、欧州各国のCEに対する取り組みは、環境問題への対応を超え、事業利益をもたらす経営戦略として位置付けられるようになっており、日本においてもCEへの対応が喫緊の課題となっている。このような社会的要請を受け、内閣府総合科学技術・イノベーション会議が主導する戦略的イノベーション創造プログラム（SIP）「CEシステムの構築（CE-SIP）」が2023年度に伊藤耕三プログラムディレクター（東京大学特別教授／物質・材料研究機構フェロー）の下に発足した。このプログラムにおいて、物質・材料研究機構（NIMS）では国内初となるプラスチック材料のCEに関するデータ駆動型研究を推進するプラットフォーム「SIPラボ」を設置し、産官学連携による協調領域研究の推進と、産業競争力の強化を目指したデジタル解析基盤の構築を進めている。特に、CE産業支援に向け

た実践的な取り組みとして、NIMSが培ってきたデータ駆動型科学を活用した環境試験・診断技術の開発や、プラスチック製品のサステナビリティを追跡可能にするトレーサー技術の開発に注力している。また、SIPラボでは、CE関連企業の課題にワンストップで対応するユーザーフレンドリーな研究開発体制の整備も行っている。SIPプログラムを通じて、CEを加速するデータ駆動型研究開発ツールや、プラスチック材料の循環配慮設計に関するノウハウを蓄積・共有することで、動静脈企業間の連携を促進し、最終的には資源循環型プラスチック材料が日本の新たな成長資源となることを目指している。本稿では、SIPラボで進められているCEに関するマテリアルDX戦略の具体例を紹介するとともに、データ駆動型科学を活用したCE材料開発の可能性や、産官学の協働をいかに促進していくかを検討し、我が国におけるCE推進の方向性について議論を深めたい。

## 2.1 CEにおけるデータ活用

## 2.1.1 データ駆動科学を推進する水平統合型シェアプラットフォーム

NIMSにSIPラボを設置した背景について述べておきたい。NIMSでは、2017年度から2022年度までの6年間にわたり、旭化成株式会社、住友化学株式会社、三菱ケミカル株式会社、三井化学株式会社の化学メーカ4社と共同で「マテリアルズ・オープン・プラットフォーム（化学MOP）」という化学業界の水平連携によるオープンイノベーション推進プロジェクトを実施してきた。化学MOPは、化学業界各社が共通して抱える課題を協調領域として設定し、企業の枠を超えた共同研究を行う枠組みである。特に、汎用プラスチックに対するマテリアルズ・インフォマティクス（MI）は、重点的に取り組まれた課題の一つであった。例えば、プラスチックの引張弾性率やシャルピー衝撃値を機械学習で予測する際、少ない実験回数で材料物性を高精度に予測するMI実験計画法を開発した<sup>1)</sup>（図2.1, 2.2）。また、X線回折など比較的簡便な方法で得られる構造情報から、引張弾性率やシャルピー衝撃値といった物性値を

\*物質・材料研究機構 高分子・バイオ材料研究センター  
茨城県つくば市千現1-2-1 〒305-0047

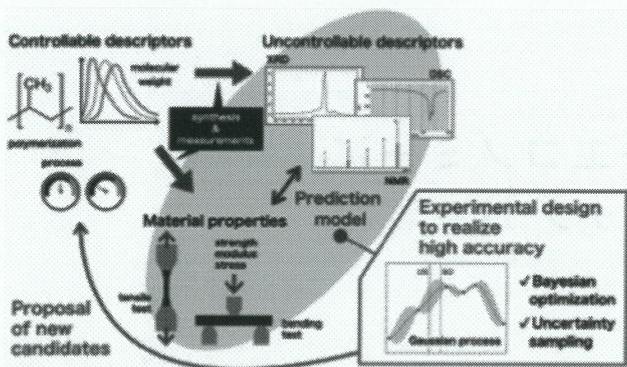


図 2.1 研究者が設定できる記述子（組成や加工プロセスなど）とプロセス加工後の材料の構造を提供する XRD や DSC 等の測定データによる記述子、および材料物性の関係。開発された AI を使うことで、測定データによる記述子から材料物性を予測する機械学習の精度を高くすることができる。AI 技術を用いて、研究者が設定できる記述子を適切に選択し、実際に材料を作製することで学習データを増やし、予測精度を向上させることができる。

高精度に推定することにも成功している<sup>2)</sup> (図 2.3)。また、化学 MOP では実践的な例題として、汎用性の高いポリプロピレン (PP) のホモポリマー、ホモポリマーブレンド、ホモポリマーコンパウンドの計 245 種類について分子構造解析、熱物性、および力学特性データを取得した。化学 MOP 終了時には、同一装置・同一条件で取得された世界最大規模の汎用プラスチックの構造・物性に関する 4 万以上のデータポイントを含む PP 市販品に関する世界最大のデータベースとなったが、これがリサイクル PP に関するデータベース構築において極めて重要な役割を担うことになる。

リサイクルプラスチック研究に資するデータベース構築の例として、米国国立再生可能エネルギー研究所 (NREL) の G. T. Beckham らは、ポリオレフィン、重縮合系ポリマー、共重合体など 20 クラスの市販ポリマー 59 種類の化学的および物理的特性の実測および添加剤の同定を行い、オンラインで公開した<sup>3)</sup>。ここで選定された 23 クラスのプラスチックはいずれも年間 100 万トン以上生産されてい

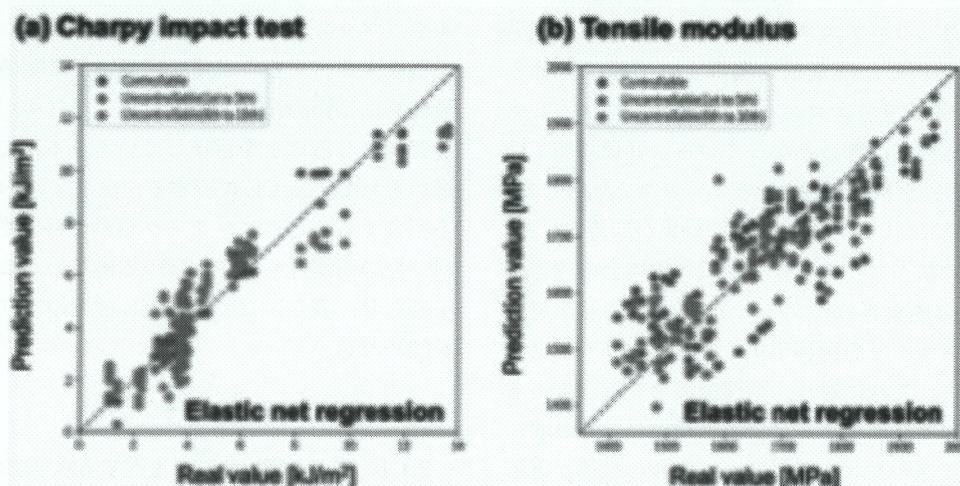


図 2.2 (a) シャルピー衝撃試験と (b) 引張弾性率の実測値と予測値の散布図。回帰モデルとしてエラスティック ネット回帰を採用。予測と実測が高い精度で一致していることが明らかとなった。

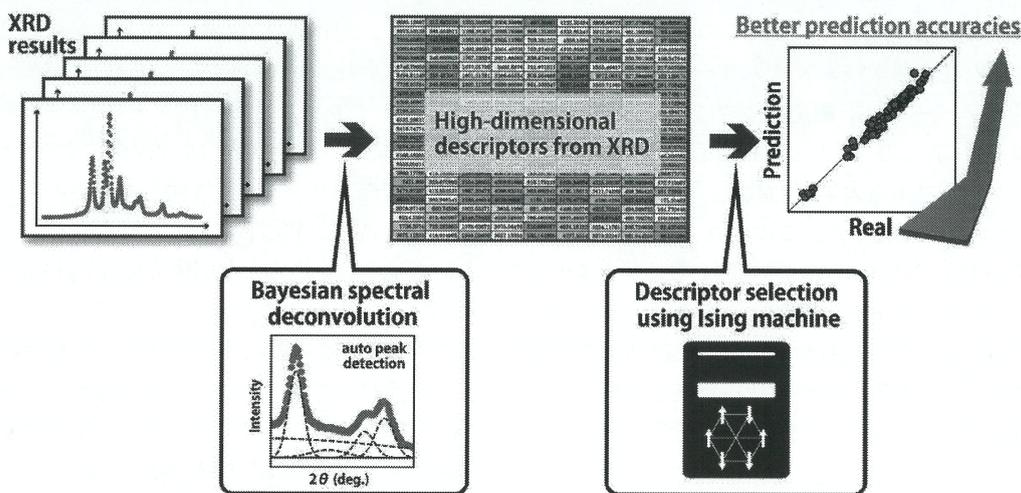


図 2.3 ポリマー材料の XRD 結果のみを使用して高精度な機械学習予測モデルを構築するための手順を示すフローダイアグラム

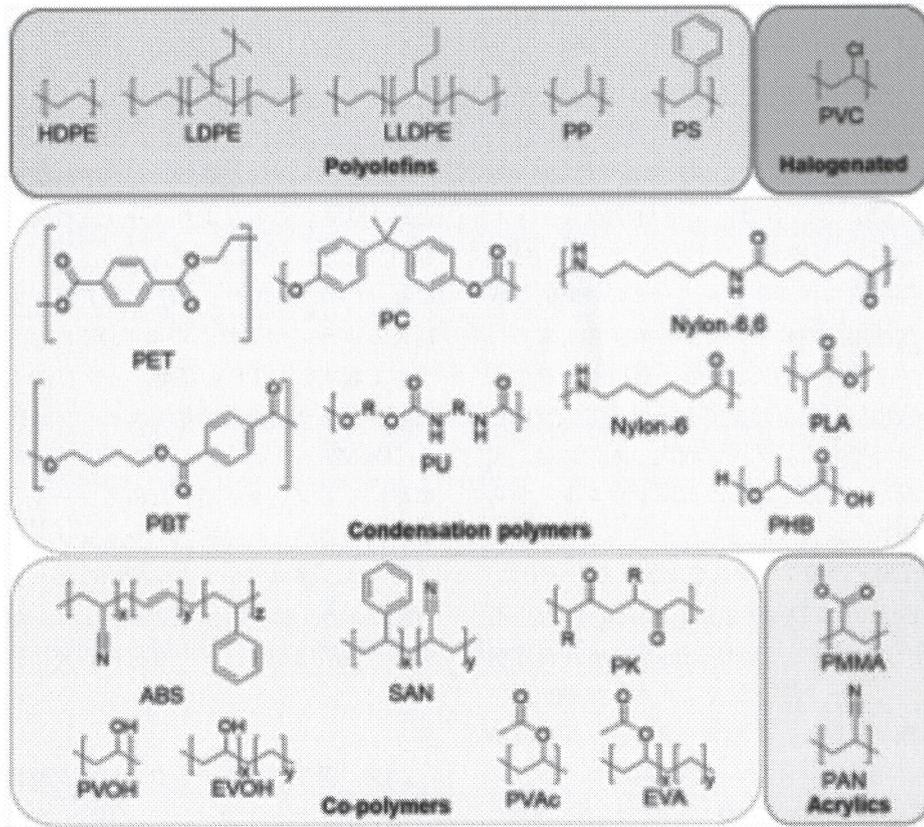


図 2.4 プラスチックリサイクル研究の基盤データベース構築に用いた 23 種類の市販ポリマー分類一覧

る汎用のもので、2018年に世界で製造されたポリマーの95%を占めている(図2.4)。研究チームはフーリエ変換赤外分光測定(FT-IR)、ゲル浸透クロマトグラフィー(GPC)、示差走査熱量測定(DSC)、誘導結合プラズマ質量分析(IPC)など、多様な分析手法を用いて市販ポリマーの構造解析・物性評価および添加剤の同定を行った。その結果、販売元が提示した情報と実測データにはしばしば乖離があることが明らかとなった。例えば、販売元から提供される分子量の表記には二峰性成分や分子量分布については言及されていない場合がほとんどであるが、実測データからはそれらが物性に影響する程度に存在することを明らかにしている。このことから、再生プラスチックの循環利用に関する規格を定めるためには、市販ポリマーの基礎データをまとめた基盤データベースが前提条件として必要になってくることを示唆している。一方、化学MOPでは、市販PPを同一装置を用い、同一条件下で実験を行ったことが非常に重要であり、かつ、構造解析や熱物性データだけでなく、引張弾性率やシャルピー衝撃値などの力学物性に関するデータも網羅していることが、寿命予測や品質管理にデータ駆動型研究を導入する上で貴重な付加価値を生んでいる。

2.1.2 プラスチックリサイクルを取り巻く社会情勢事例  
今日のCEに関する機運の高まりは環境問題の側面に加

え、欧州が主導する施策によるところが大きい。一例として2023年7月に、欧州委員会により自動車の車両設計から生産、廃車までの過程における循環性の向上に向けた自動車設計・廃車(ELV: End-of-Life Vehicles)管理における持続可能性要件に関する規則案(ELV規則案)が欧州議会及び理事会に対して提案され、現在審議が行われている。ELV規則案では、EUにおけるCEへの移行は、天然資源への負荷を軽減し、持続可能な成長と雇用を生み出すとともに、EUの2050年のカーボンニュートラル目標達成と生物多様性の損失を食い止めるための前提条件と考えられている。ここで、経済成長と雇用の創出を強調し、経済政策を通じて環境に対応していく点が、これまでの環境政策との大きな違いである。ELV規則案では、プラスチックのリサイクル強化がうたわれており、新車製造におけるプラスチックの25%以上を再生プラスチックとし、うち、25%を廃自動車由来とすることとしている。PPはバンパーをはじめ様々な自動車部品に採用されており、自動車用途においてポリウレタンに次ぐ主要なプラスチック材料である。そのため、CE-SIPでは自動車向けPPに関するCEの実現を目指して多角的な研究開発が行われている。NIMSのSIPラボにおいても、化学MOPで蓄積した市販PPに関する基盤データに加え、再生PPに関する構造・物性データの収集・蓄積を進めている。

### 2.1.3 CE 研究を加速するマテリアル DX ツール「DICE」

SIP ラボで収集した PP に関する膨大なデータは、産官学に関わらず、プログラムに参画する機関には無償で公開する予定である。データベースのプラットフォームには、NIMS が開発を進める材料プラットフォーム「DICE」を最大限に活用している。NIMS は、文部科学省「マテリアル DX プラットフォーム構想」におけるデータ中核拠点として、産学の高品質なマテリアルデータの戦略的な収集・蓄積・流通・利活用を進めている。その基盤となる材料プラットフォームである「DICE」は、材料データの入り口（集まる）から出口（使う）までを一貫して扱う総合的な機械学習ツール群である。データ収集の入口には、実験・計測装置や文献からの取り込み、機関レポジトリからの取り込みなど、複数の情報源からのハイスループット・ハイクオリティー収集・登録システムを実装するとともに、データを RDF（Resource Description Framework）形式で階層的、構造的に理解し、かつ Linked Data など情報工学的手法によってデータ間を繋ぐことで、格納データの高付加価値化に繋げている。またデータの利活用になる出口側では、データ可視化システムや各種解析ソフトウェアを整備・提供し、データ駆動型材料開発における様々な課題解決の糸口を与えられるような、システム科学的なサービス提供を行っている。SIP ラボで開発中の再生 PP データベースにおいても、データ解析 AI、データサーバなど基本的な機械学習モジュールを DICE が提供する各種サービスを利用することで、システム開発の迅速化・低コスト化を図っている（図 2.5）。中でも、DICE ツールの一つである RDE（Research Data Express）は、物質・材料に係るデータを保管し、国内の物質・材料研究に供するためにデータをクラウド上で管理するシステムである。主なサービスは、研究データ蓄積・管理サービス、研究データ公開、共用（検索・閲覧）サービス、認可情報、装置情報、試料

情報、語彙（装置・試料に関する用語）などのマスタ管理である。例えば、RDE に生データを登録すると、構造化されたデータをクラウド上にセキュアな状態で保存することができる。また、機械学習を行う際のトラブルの主要原因となるデータの前処理にかかる時間も最小限で済ませることができる。これによりユーザーや研究グループ内での再利用、また、他の研究グループとのデータの共用が容易となり、CE プラスチック研究のデジタル化がシームレスに行えるようになった。この RDE には、化学 MOP や SIP ラボで収集した PP の基盤データに加え、文部科学省が推進するデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（DxMT）やマテリアル先端リサーチインフラ（ARIM）においてもデータ活用のためのツールとして採用されている。利用者がこれら複数プロジェクトにメンバー登録されていれば、プロジェクト横断的にデータを利用することも可能であり、様々な国家プロジェクトから創出されるデータ資源を活用して、新たな材料研究に展開することができる。

### 2.1.4 再生プラスチックとデータ駆動科学の応用事例 1

サーキュラーエコノミー（CE）の実現において、データ駆動科学はプラスチックの劣化挙動やリサイクルプロセスの解析において、ますます重要な役割を果たしている。本項では、再生プラスチックの劣化評価に焦点を当て、データ駆動型手法を応用した具体的な事例を紹介する<sup>4~6)</sup>。従来、プラスチックの劣化挙動は、酸化劣化により生成されるカルボニル基（C=O 基）の濃度を測定するカルボニルインデックス（carbonyl index, CI）を用いて評価されてきた。CI は、劣化が進むにつれて増加するカルボニル基のピーク強度を基準スペクトルのピーク強度で正規化して算出される指標である。しかし、この手法では非酸化型の劣化やポリマーに元来含まれるカルボニル基の影響を十分

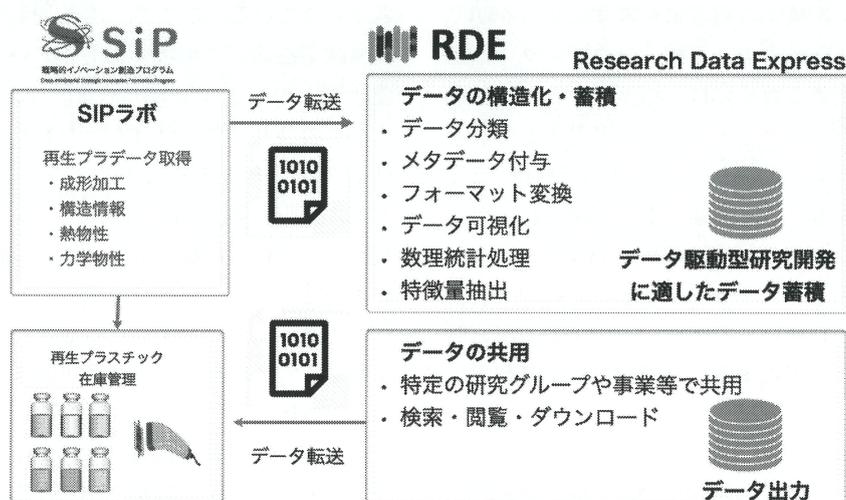


図 2.5 RDE を利用した SIP ラボのデータ収集・蓄積・流通・利活用のイメージ

に考慮できないという課題があった。また、市販プラスチックには劣化抑制や機能付与のために様々な添加剤が加えられており、これらの微量成分が実使用環境で徐々に溶出し、閾値を超えると物理特性に大きな劣化をもたらす。このような添加剤の量を正確に定量化することは、従来の分析技術では困難であった。本項で紹介する RQMS (Reference-Free Quantitative Mass Spectrometry) は、ポリマーの熱分解質量分析 (pyrolysis-MS) データを基に、化学組成や配列情報を解析するデータ駆動型技術である。この手法は参照スペクトルを必要とせず (reference-free)、観測されたスペクトルデータを非負行列因子分解 (NMF) を用いて解析し、基底スペクトルとその混合比率を同時に推定するものである<sup>5)</sup>。NMF は、観測スペクトルをフラグメントスペクトルに分解し、さらにフラグメントスペクトル

から基底スペクトルを推定することで、ポリマー内のトリアッドやペンタッドといった特定配列の組成を正確に推定することができる (図 2.6)。最近、日比らはこの RQMS を用いてプラスチックの劣化度を化学的に評価する新たな手法を開発した<sup>6)</sup> (図 2.7)。具体的には、RQMS により標準物質を必要とせず定質量分析を行い、「完全に劣化したポリマー (completely degraded polymer, CDP)」を AI が導き出すことで、化学的劣化度 (compositional degradation degree) を求める手法を提案した。ポリウレタンフィルムを対象に加速劣化試験を実施し、安定剤としてハロゲン化アミン系光安定剤 (HALS) および紫外線吸収剤 (UVA) を添加して劣化挙動を比較した。RQMS 解析により、CDP と未劣化ポリマー、さらに添加剤の相対比を定量化し、化学的劣化度を算出した。その結果、

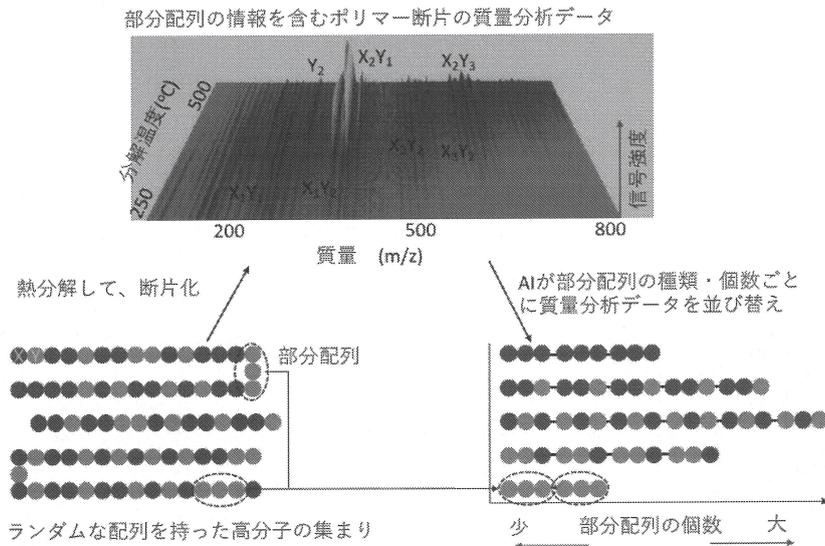
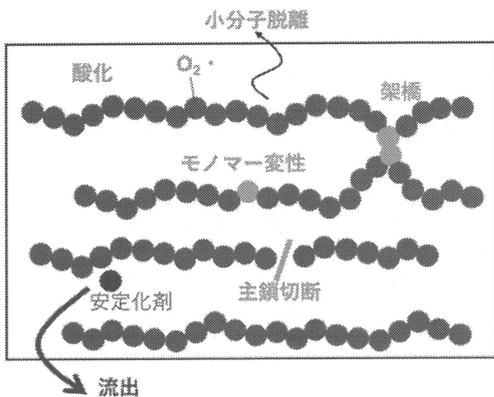


図 2.6 高分子鎖の仮想的再配列による部分配列の定量化。検体に含まれるランダムな配列 (左下) を、AI 解析によって規則的な配列 (右下) を有する共重合体の混合物に置き換えることで、部分配列を定量化できる。(CC-BY 4.0)

様々な劣化機構



劣化度定義

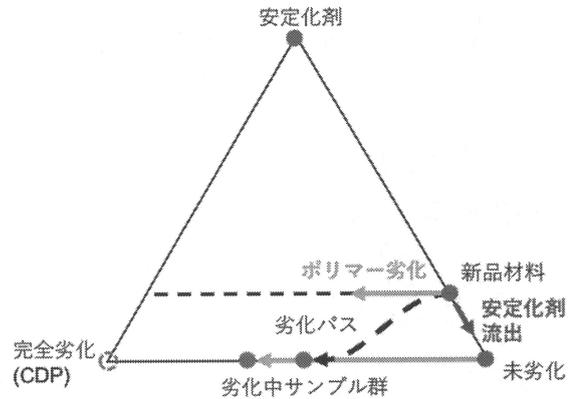


図 2.7 RQMS を用いたプラスチック劣化度の定義。プラスチックはさまざまなメカニズムで劣化するため、劣化度の定義が困難である。また、ある閾値を超えて劣化が進むと、材料特性が突然低下するため、化学的な指標により使用限界を予測することが重要である。熱分解質量分析計の AI 解析である RQMS を利用することで、完全に劣化したポリマーと未劣化のポリマーの重量比を用いた劣化度の定量化でき、劣化メカニズムへの深い洞察や、プラスチック材料の突然の破損が予測可能となった。(CC-BY 4.0)

HALS は劣化進行を顕著に抑制し、60 日間の試験後でも約 1 wt% が残存していることが確認された。一方、UVA 単独では劣化抑制効果が低く、速やかに溶出する挙動が観察された。しかし、HALS と UVA を併用することで、UVA の溶出が抑制され、HALS が基材ポリマーの劣化を抑制することで UVA の安定性が向上することが示唆された。さらに、SCICAS (表面および界面切削解析システム) を用いて機械的特性との関連を評価したところ、化学的劣化度が 50% を超えると、材料が急激に硬化および脆化する臨界点が特定され、劣化挙動が材料特性に与える影響が明らかになった。本研究では、CDP を基準とした化学的劣化度が、物理特性の非線形な劣化挙動を正確に捉える指標であることを示した。このアプローチは、従来の CI を超えて包括的な劣化評価を可能にし、リサイクル素材の品質評価や、劣化抑制型材料の設計における実用的な指針を提供することができる。また、プラスチック劣化と添加剤の溶出が相互に誘発するプロセスであることを明らかにし、劣化メカニズムの理解を深める結果につながった。

質を保証し、高機能用途に安定的に供給することが極めて重要である。そのためには、ロットごとに品質を把握し適材適所に配分する全数検査が不可欠であるが、従来の引張試験や衝撃試験などの破壊試験によるロット単位評価はコストと時間の制約から現実的でなく、特に家庭系廃プラスチックのように異種ポリマーや非プラスチック成分が混入して品質変動が大きい材料では、高付加価値用途への展開を阻む主要なボトルネックとなってきた。我々はこの課題に対し、製造工程に必ず存在する熔融・混練・ペレット化過程で得られるスクリュウ回転トルクから算出した熔融粘度の経時変化に着目し、この情報を追加コストの発生しない補助データとして利用することで、ロットごとの機械的特性を事前に予測し分類する手法を提案した (図 2.8)。熔融粘度の変化は分子量分布、化学的劣化度、異種ポリマー混入量といったロット固有の情報を反映しており、これを解析することで全数破壊試験を行うことなく、特定用途に適したロットの抽出が可能になる。我々の実験では、日本国内の複数自治体から収集した家庭系ポリプロピレン (PP) 廃棄物 23 ロットを対象に、密度・磁力・光学分離を経てペレット化した試料を小型二軸押出機により 220°C、600 秒間混練し、その間に得られるトルクから粘度の時系列デー

2.1.5 再生プラスチックとデータ駆動科学の応用事例 2  
サーキュラーエコノミーの実現においては、再生材の品

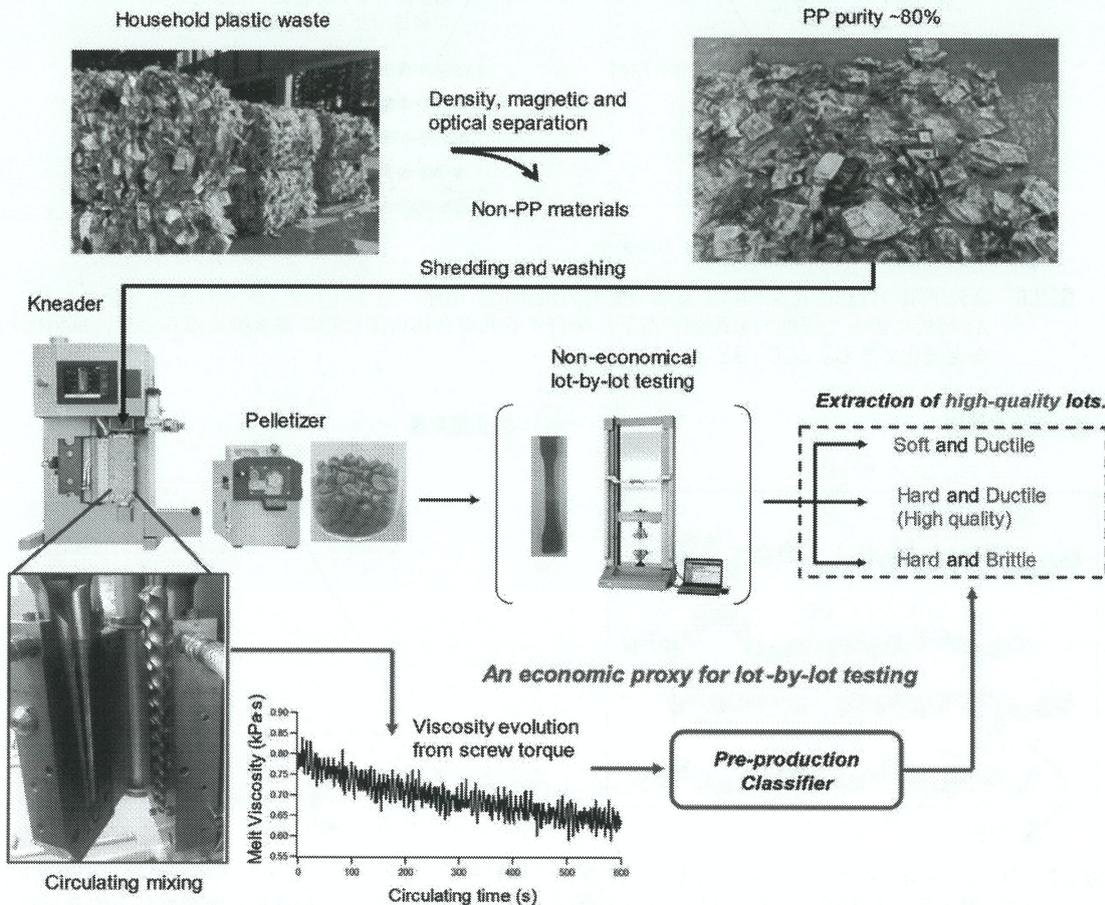


図 2.8 家庭系廃プラスチック由来リサイクル PP の熔融・混練・ペレット化工程において、スクリュウ回転トルクから算出される熔融粘度の経時変化を取得し、AI 解析により引張特性を事前予測してロット分類を行うことで、追加コストをかけずに高品質ロットを抽出する手法の概念図。(CC-BY 4.0)

タを取得した。このデータを20秒ごとに平均化して600点から30点に圧縮し、さらに生データ、ゼロ平均オフセット補正データ、分散1に標準化したデータの三種を作成し、それぞれが粘度の絶対値、初期値と終期の差、曲線形状といった異なる特徴を強調するよう設計した。解析には双方向再帰型ニューラルネットワーク (Bi-RNN) を用い、3チャンネル×30時系列点の入力から混練初期および終了直前の粘度挙動を含む時間的コンテキストを双方向から抽出し、全結合層を経て弾性率・降伏応力・破断伸びに基づく3クラス (柔軟型, バランス型高品質, 硬質脆性型) に分類した。データ不足に対応するため、粘度曲線にガウス雑音を加えるデータ拡張によりデータセットを10倍に増強し、Leave-One-Out Cross Validation (LOOCV) で精度評価を行った (図 2.8)。その結果は図 2.9 に示す通りであり、3種類のデータを組み合わせた入力では85%以上の分類精度を達成した。特に高品質クラス (Class 1) の予測精度は高く、予測で選別した6ロットのうち5ロットが真の高品質クラスであった。これらを混合して成形した試験片の引張特性は、弾性率 930 MPa, 降伏応力 26.1 MPa, 破断伸び 283%と、実測の高品質クラス平均値とほぼ一致し、本手法の実用性を裏付けた。さらに、この引張特性分類モデルを転移学習し、成形条件の異なる試験片のシャルピー衝撃エネルギー予測に応用したところ、脆性クラス (低衝撃) の検出感度は70%, 高衝撃クラスの精度は66%に達し、特に製品品質を著しく損なう脆性ロットの見逃しを大幅に低減できた。これらの結果は、非経済的な全数破壊試験を省略しつつ、生産前に高品質ロットを効率的に抽出できることを示している。本手法は、従来のラマン分光、近赤外分光、ハイパースペクトルイメージングなどの光学分離技術では困難であった機械的特性に基づくリアルタイム

選別を、製造ライン内で追加コストなしに実現できる点に特徴がある。さらに、得られた粘度データを分光法や質量分析による化学組成解析と統合することで、多成分系ポリマーの特性予測や用途別材料設計が可能となり、循環型社会における再生材の高付加価値利用を一層促進することができる。このようなアプローチは、材料開発の設計段階からリサイクル工程を組み込む「Design for Circularity」を実現し、使い捨てから循環利用へのパラダイム転換を支える基盤技術となり得る。

おわりに

本稿では、循環経済 (CE) の実現に向けたプラスチックリサイクルの課題と、それに対するデータ駆動型アプローチの有効性についてSIPラボの取り組みを交えて紹介した。NIMSのSIPラボを中心に進められている研究は、プラスチックの構造や物性データの効率的な収集と解析を可能にする新しい技術基盤を提供している。特に、データプラットフォーム「DICE」を活用したマテリアルズ・インフォマティクス (MI) や、標品フリー定量質量分析 (RQMS) の応用は、プラスチックリサイクルの効率化と高精度化に寄与し、循環型材料の設計や再生プラスチックのプロセス最適化に新たな方法論を提案するものである。これらの技術を活用することで、プラスチック劣化のメカニズム解明や、リサイクル素材の品質管理が進み、日本が循環経済におけるリーダーシップを発揮する基盤が構築されつつある。一方で、今後の課題として、国際的なデータ共有と標準化が挙げられる。国内外の研究機関や企業間でデータを連携し、統一された基盤データを整備することで、再生プラスチックの品質保証や規格化が進み、グローバル市場での競争力が高まるだろう。また、リアルタイム解析

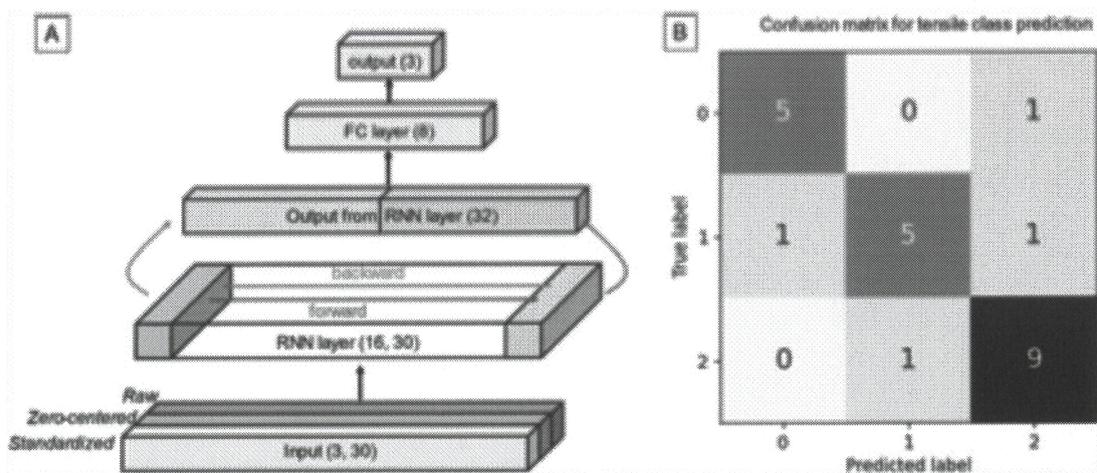


図 2.9 (A) 本研究で用いた双方向再帰型ニューラルネットワーク (Bi-RNN) によるロット分類モデルの構造。3種類の前処理を施した溶融粘度時系列データ (3チャンネル×30時系列点) を入力し、時間的コンテキストを抽出して弾性率・降伏応力・破断伸びに基づく3クラスに分類する。(B) Leave-One-Out Cross Validation (LOOCV) による予測結果を示す混同行列。対角線上の値が正しい分類に対応し、85%以上の精度でロット分類が可能であることを示す。(CC-BY 4.0)

技術の実用化が期待される。これにより、自動車や建材をはじめとするさまざまな用途で、製造現場での適応性が向上し、リサイクルプロセス全体の効率が飛躍的に向上する可能性がある。同時に、耐久性と再利用性を兼ね備えた新しい材料の設計が進めば、リサイクル工程を考慮した製品開発が加速し、CEの普及がさらに進むことが期待される。これらを実現するためには、産官学の連携をより強化し、新たなビジネスモデルや雇用創出につなげる取り組みが必要である。CE推進に不可欠なデジタル技術と材料科学の融合は、日本の産業競争力を強化し、持続可能な社会の実現に貢献するものである。本稿で紹介した技術基盤は、これらの取り組みの第一歩であり、未来志向の循環型社会への道筋に貢献できれば幸いである。

#### 謝辞

本研究の一部は、戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)第3期「サーキュラーエコノミーシステムの構築」(23827524)の支援を受けて実施した。

#### 文 献

- 1) R. Tamura, et al., *Sci. Tech. Adv. Mater. Methods.*, **1**, 152 (2021).
- 2) R. Tamura, et al., *Sci. Tech. Adv. Mater.*, **25**, 2388016 (2024).
- 3) A. A. Cuthbertson, et al., *Green Chem.*, **26**, 7067 (2024).
- 4) Y. Hibi, et al., *Chem. Sci.*, **14**, 5619 (2023).
- 5) Y. Hibi, et al., *Polym. Degrad. Stab.*, **232**, 111128 (2024).
- 6) Y. Hibi et al., *ACS SRM.*, **2**, 673 (2025).

#### 引 用 資 料

- \*1) 一般社団法人プラスチック循環利用協会, <https://www.pwmi.or.jp/column/column-2534/> (2025.8.15 アクセス).