

プロセスも含めたポリマー材料設計戦略～自動化化学への展開～

(東大院工・奈良先端大) 船津 公人

Strategy for Polymer Materials Design with Process Condition -Development of Automated Chemistry (Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, Nara Institute of Science and Technology) Kimito Funatsu

Application of data-driven chemistry to design of organic materials with process condition is shown using concrete example. Process informatics realizing material design, process design and quality control is referred in this lecture.

Keywords : Data-Driven Chemistry, Chemoinformatics, Process Informatics, Materials Informatics

目的物性・特性をもつ新規分子・材料開発に相当する「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そしてそれを安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応するには、いまや多くのデータ、情報の積極的活用が不可欠となってきたとの時代の判断がそこにある。これについては図1に示したようなプロセスインフォマティクスが今後必要になる。

材料物性はプロセス条件によって変化することがほとんどで、単に物性と構造（組成）の相関モデルだけでは物性推算モデルの精度は上がらない。また、そのモデルの逆解析によって得られる、目的物性を満足するとされる構造（組成）だけではプロセス情報が反映されていないために目的物性をどう実現すれば良いか曖昧なままである。

プロセスインフォマティクスを考える

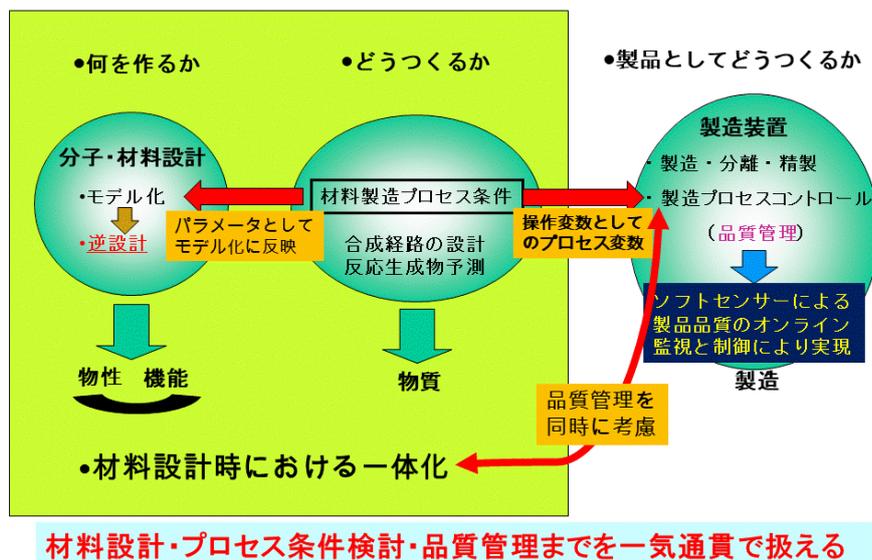


図1 プロセスインフォマティクスの概念

構造（組成）物性相関モデルにプロセス条件を導入することによってはじめて、材料組成、プロセス条件、そして物性が関連付けられるのである。まさに材料設計時に作り方まで織り込むという考え方である。これができれば、材料製品製造における品質管理の際にどのプロセス変数をどのように操作すれば製品品質の維持、つまりプロセス制御が可能になるかも自ずとはっきりしてくる。ここではソフトセンサーを用いたプロセス監視とそれを用いたプロセス制御が大きな役割を担う。ソフトセンサーとは、オンラインで簡単に計測できる温度、圧力、流量のようなデータから、オンラインで測定が難しい製品物性などを、過去の運転データから構築した統計モデルによって推定する統計モデルのことである。設定した製品物性から外れそうな場合には、このソフトセンサーを逆解析すれば、温度あるいは圧力などのプロセス変数をどのように操作すれば良いかが求められる。

データの集約的活用により、まさに材料設計、プロセス条件検討、品質管理までを逆解析という視点から俯瞰して扱えるようになりつつある。

【参考文献】

- 1) T. Miyao, M. Arakawa, K. Funatsu, *Molecular Informatics* **2010**, 29, 111.
- 2) K. Funatsu, M. Arakawa, T. Miyao, *Current Computer-Aided Drug Design* **2011**, 7, 1.
- 3) T. Miyao, K. Funatsu, *J. Chem. Inf. Model.* **2016**, 56(2), 286.
- 4) 棚田東作, 荒川正幹, 西村竜一, 船津公人, *J. Comput.-Aided Chem.* **2000**, 1, 35.
- 5) 後藤俊, 荒川正幹, 船津公人, *J. Comput.-Aided Chem.* **2009**, 10, 30.
- 6) 船津公人, 金子弘昌, ソフトセンサー入門 - 基礎から実用的研究例まで -, コロナ社, **2014**.