

## マテリアルズ・インフォマティクスからプロセス・インフォマティクスへ

(奈良先端大・物質<sup>1</sup>) ○藤井 幹也<sup>1</sup>

From Materials Informatics to Process Informatics (<sup>1</sup>*Graduate School of Science and Technology, Nara Institute of Science and Technology, Grad*) ○Mikiya Fujii<sup>1</sup>

Digital technologies such as simulation and machine learning in materials development has been attracting attention, and is known as materials informatics. The objectives of this field can be categorized as discovering natural scientific formulas, accelerating materials development, and advancing measurement. Furthermore, since process is also important in materials development, there are some studies of the use of machine learning for process control, which is called process informatics.

In this talk, I will give an overview of materials informatics and process informatics, and introduce our studies of surrogate models for quantum chemical calculations and generation models for materials with desired properties. We have recently been working on the precise synthesis of copolymer copolymerization by flow synthesis and product prediction. In particular, we have demonstrated that the combination of machine learning and quantum chemical calculations can be used to predict the products of new molecules. Furthermore, we have demonstrated that Bayesian optimization can be used to optimize process variables for a desired copolymer. The results will be presented at the symposium.

*Keywords : Materials Informatics, Process Informatics, Quantum chemistry, Flow polymerization, Generative Models*

近年、材料開発においてシミュレーションや機械学習などのデジタル技術の活用が注目されており、マテリアルズ・インフォマティクスやケモインフォマティクスと呼ばれている。特に機械学習を用いた手法は北米を中心に発展しており、GAFAM といった IT 企業までもが材料の研究開発を着手している。この分野の目的は、自然科学的な関係式の発見、材料開発の加速、計測の高度化に大別される。さらに、材料開発においてはプロセスも重要であることから、プロセス制御に機械学習を用いたプロセス・インフォマティクスとして取り組みが始まり、研究者・技術者が暗黙知として行ってきた最適化や効率化を機械的に実現することが可能になっている。

本講演ではマテリアルズ・インフォマティクスやプロセス・インフォマティクスについて概観すると共に、講演者が取り組んできた量子化学計算に対するサロゲートモデルや所望の物性を示す材料の生成モデルの例を紹介する。また、最近のコポリマーの共重合反応にたいしてフロー合成法による精密合成の実施、および生成物予測に取り組んでおり、機械学習手法と量子化学計算を併せて用いることで、新規分子に対しても生成物予測が可能なことを実証した。さらに、機械学習の1つであるベイズ最適化により所望のコポリマーに対してプロセス変数の最適化が可能であることも実証した。当日はこれらの結果についても紹介する。