# プロセス・インフォマティクス ～匠の技を中間データに用いたデータ駆動型ハイスループット粉体プロセス開発～

**Process Informatics ―Data-Driven High-Throughput Process Development using Craftsmanship as Intermediate Data―**

**東大工 [1]　○長藤 圭介 [1]**

**Univ. Tokyo [1], ○Keisuke Nagato[1]**

**E-mail: nagato@hnl.t.u-tokyo.ac.jp**

「よい」粉体材料を「よい」製品に仕立てられるかどうかは「プロセスレシピ次第」であることは，高級小麦粉で美味しいお好み焼きを作ろうとすることを想像すれば容易に同感できるであろう．蓄電池や燃料電池など粉体からなる製品の生産プロセスも，その現象の複雑さゆえ，物理現象モデリングと論理的設計が困難であり，日本人の勘コツ・すり合わせの能力の高さにマッチして，いまだに競争力があると言える．しかし，マテリアルズ・インフォマティクス（MI）で「よい」材料の開発がハイスループット化する中で，その下流に位置する材料合成プロセスに対してもデータ駆動型でのハイスループット化 [1)] が国際的に活発になりつつあり，AI・絨毯爆撃的実験の組合せは，欧米・中国のほうが上手（うわて）である可能性がある．

我々の研究グループは，現象が複雑にもかかわらず，日本人の勘コツ・すり合わせ技術（技能というべきか）で実績を上げてきた強みをさらに強化するプロセス・インフォマティクス（PI）に取り組んでいる．[2,3)] たとえば紛体プロセスの基本である分散・混錬・塗布・乾燥のうち，乾燥プロセスにおける温度履歴を決定するとき，通常ヒトは表面の光沢やひび割れなどを粉体自体・粉体同士・粉体と溶媒の微視的現象を想像しながら検知し，その後の微構造分析やイオン伝導度などの性能と紐づけている．これを，「なんとなく」ではなくデータとして吸い上げ，プロセスパラメータと性能とを紐づけるための「中間データ」として用いた高効率な機械学習システムでプロセスパラメータ探索のハイスループット化を図る．近年のディジタルツインの思想に近いが，粉体 PI の実現は，物理現象を象徴する特徴量を中間データとしてセンシングする「勘コツ」，それらを機械学習システムにどう組み込むかを見極める「すり合わせ」の能力にかかっている．

参考文献

1) 船津公人：「特集 「マテリアルズ・インフォマティクス」の企画にあたって」，日本化学会情報化学部会誌, 34, 4 (2016) p.95.
2) 科学技術振興機構 未来社会創造事業「共通基盤」領域 令和元年度採択課題（https://www.jst.go.jp/mirai/jp/uploads/saitaku2019/JPMJMI19G3_nagato.pdf）
3) 長藤圭介，井上元，荒木拓人，黒田義之，辻口拓也，長隆之「粉体成膜プロセス研究のハイスループット化のためのデータ駆動型粉体プロセス・インフォマティクス」機械の研究，72 巻 7 号(2020)，養賢堂

© 2020年 応用物理学会