

# B1-01 プロセス・インフォマティクスが変える材料開発・製造のあり方

船津 公人(奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター)

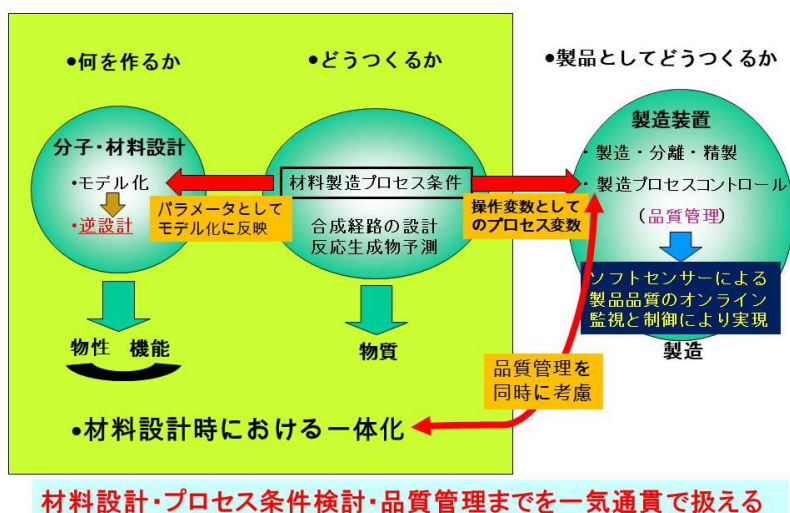
データ駆動型科学の展開が急速に進んでいる。分子・材料設計のためのマテリアルズ・インフォマティクスはもはや当たり前の様相を呈している。加えて、新しい分子構造、材料の研究・開発、さらには生産プロセスの立案およびそのプロセスにおける製品品質維持のためのプロセス監視とその制御のために、データ駆動型科学にこれまでにない強い期待が寄せられている。目的物性・特性を持つ新規分子・材料開発に相当する「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そしてそれを安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応するには、いま多くのデータ、情報の積極的活用が不可欠となってきたとの時代の判断がそこにある。

これについては右図に示したようなプロセス・インフォマティクスに注目が集まっている。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。まさに構造(組成)物性相関モデルにプロセス条件を織り込む必要が出てくる。これができれば、何を作るかを

考える際にどう作るかが自ずと織り込まれた解が得られることになる。また、材料製造における品質管理の際にどのプロセス変数を操作変数としてどのように操作することで製品品質の維持、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<sup>1)</sup>。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、品質管理までを一気通貫で俯瞰して扱えるようになるのである。これをプロセス・インフォマティクスとして提案して数年が経過するが、この概念はもはや材料開発時の基本概念として定着をしたとあって良い。今後はこの概念をもとに合成ロボットとAIが連動して、自動的に材料探索空間を広げ新規材料とその作り方を発見する自動化化学の仕組みが中心となっていくであろう。

1) 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).

## プロセス・インフォマティクスを考える



材料設計・プロセス条件検討・品質管理までを一気通貫で扱える

### PROFILE

船津公人(奈良先端大・データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター 特任教授)

- ①1983年3月九州大学大学院理学研究科科学専攻博士課程修了理学博士・2004年4月東京大学工学系研究科教授、2017年10月奈良先端大教授(兼務) ②データ駆動型化学、マテリアルズインフォマティクス、プロセスインフォマティクス ③アメリカ化学会 Herman Skolnik Award(2019年8月)、日本化学会学術賞(2021年3月) ④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年)、実践マテリアルズインフォマティクス・近代科学社(2020年)、ケモインフォマティクス・丸善(2005年) ⑤日本化学会ケモインフォマティクス部会部会長