

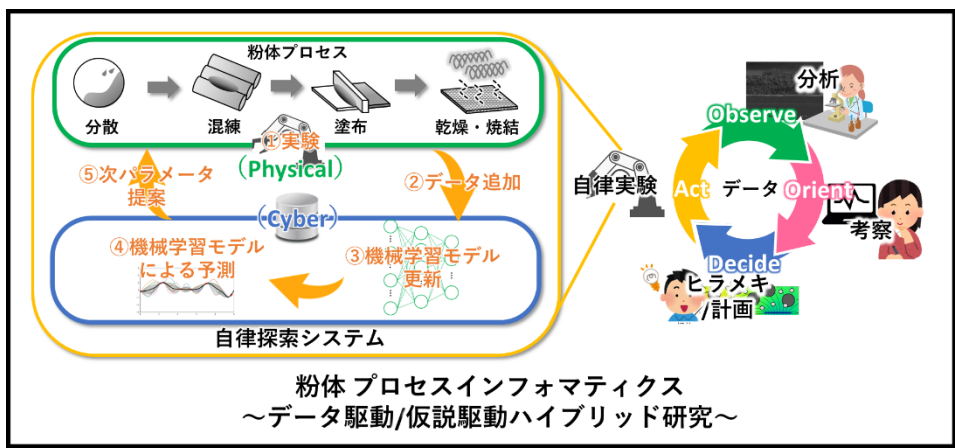
B1-07

ハイスループット粉体プロセス開発のためのプロセス・インフォマティクス～データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究に向けて～

長藤 圭介(東京大学 大学院工学系研究科)

日本のものづくり産業を支える材料開発およびプロセス開発には、海外の研究開発スピードの猛進に対して、さらなる強化が求められている。2012年以降、世界的なマテリアルズインフォマティクスの流れの中で計算科学やマルチスケール解析技術が発展してきた中で、近年、実験ベースのマテリアル探索手法の研究が活発に行われており、触媒材料¹⁾、有機材料²⁾、無機材料³⁾において実証がなされている。マテリアル探索において、その試作のためのプロセスは欠かせないのに加え、マテリアル開発の下流に位置するプロセス開発は、量産化・製品化につなぐ重要な位置にある。またプロセスは多岐にわたり、プロセス手法の選定とプロセスパラメータの探索は、マテリアルのそれに比べてはるかに場合の数が多い。よってハイスループットプロセス開発のためには、これまでの人依存の研究手法から脱却し、データ駆動型手法を取り入れた新しい手法が求められている。

下図は、蓄電池、燃料電池、水電解装置など、これから日本の基幹産業として期待されるデバイスの生産技術の基盤である粉体プロセスを例に、自律探索システム^{4,5)}を取り入れたデータ駆動/仮説駆動ハイブリッド研究の概念を示したものである。たとえば、ベイズ最適化を用いたプロセスパラメータ探索システム⁵⁾は、ハイスループット探索手法として期待される。一方で、前述したように、無限ともいえるパラメータ空間から最適値を得るには、それらデータ駆動手法を用いるだけでなく、従来の人中心の仮説駆動手法のループにそれを取り込んだ新しいハイブリッド型研究開発手法が必須であり、粉体のみならず様々なプロセスに適用・実践し、日本の研究開発の共通基盤技術として推進していく必要がある⁶⁾。



- 1) B. Burger *et al.*, Nature 583, 237-241 (2020).
- 2) B.P. MacLeod *et al.*, Sci Adv. 13, eaaz8867 (2020).
- 3) R. Shimizu *et al.*, APL Materials 8, 111110 (2020).
- 4) To be submitted
- 5) 長藤圭介ほか「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, 2020年7月号, 511-516.
- 6) JST CRDS「材料創製技術を革新するプロセス科学基盤～プロセス・インフォマティクス～」戦略プロポーザル, 2021年6月 (CRDS-FY2021-SP-01).

PROFILE

長藤圭介(東京大学・工学系研究科)

2009年 東京大学大学院工学系研究科産業機械工学専攻博士課程修了, 同年 同研究科機械工学専攻助教, 2012年 講師, 2016年 准教授。専門分野は生産技術, マイクロ・ナノ加工, 表面機能創成, レーザ加工, 粉体加工, 燃料電池。主な所属学協会は日本機械学会, 精密工学会, 自動車技術会, 日本応用物理学会。2021年6月 JST 未来社会創造事業「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」本格研究開始。座右の銘は、「好きこそ物の上手なれ」, 「先ず隗より始めよ」。