

デジタル技術による材料・プロセス最適化 ～フロー合成による共重合反応を中心に～

(奈良先端大物質¹・奈良先端大 DSC²・奈良先端大 CMP³) ○藤井 幹也^{1,2,3}
Optimization of Materials and Processes Using Digital Technology: Focused on Copolymerization Reactions in Flow Synthesis (¹*Graduate School of Science and Technology, NAIST*, ²*DSC, NAIST*, ³*CMP, NAIST*) ○Mikiya Fujii^{1,2,3}

Digital technologies such as simulations and machine learning have gained attention in materials development, particularly in "Materials Informatics" and "Cheminformatics." These fields have advanced significantly, with IT companies like GAFAM also engaging in materials research. Additionally, "Process Informatics," which applies machine learning to process control, has enabled the automation of optimization and efficiency improvements traditionally reliant on tacit knowledge.

This talk introduces examples of surrogate models for quantum chemical calculations and generative models for materials with desired properties. Recent research focuses on precise copolymer synthesis via flow synthesis, combining machine learning with quantum chemical calculations to enable product prediction and process optimization. Multi-objective Bayesian optimization has also been used to analyze trade-offs in copolymer properties, elucidating the origins of the Pareto front. These results will be presented during the lecture.

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

近年、材料開発におけるデジタル技術の活用が注目されており、シミュレーションや機械学習を基盤とする「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」として知られている。これらの分野では、北米を中心に機械学習を用いた手法が発展しており、GAFAMをはじめとするIT企業も材料の研究開発に着手している。さらに、材料開発においてはプロセスも重要であり、プロセス制御に機械学習を活用する「プロセス・インフォマティクス」という取り組みが進展している。これにより、研究者や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となった。

本講演では、講演者が取り組んできた機械学習を用いた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、最近の研究として、フロー合成法を用いたコポリマーの精密合成、生成物予測、およびプロセス最適化に取り組んでおり、機械学習手法と量子化学計算を組み合わせることで、コポリマー合成の予測や制御が可能であることを実証した。さらに、多目的ベイズ最適化を用いることで、複数の所望のコポリマー物性間に生じるトレードオフを示すパレートフロントの物理化学的起源についての解析結果も得られている。当日は、これらの成果について詳細を紹介する。