

マテリアルインフォマティクスと ポリマーへの応用

ポリマーアロイ設計に向けた記述子化と成分組成、プロセス条件の最適化

新しい分子構造や材料の研究・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を維持するためのプロセス監視と制御に向けて、**データ駆動化学**にこれまでにない強い期待が寄せられている。目的の物性・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・制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応するには、いまや多くのデータや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。

これには、**プロセスインフォマティクス**の概念が重要となる。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あり、単に物性と構造（組成）の相関モデルだけでは良好な物性推算モデルは得られない。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よいか不明なままである。まさに**構造（組成）と物性の相関モデルにプロセス条件を織り込む必要**が出てくる。これが可能になれば、材料製造における品質管理の際に、どのプロセス項目をどのように操作することで製品品質の維持、すなわち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。**データの集約的活用により、材料設計、プロセス条件検討、品質管理までを俯瞰して扱えるようになるのである。**

期待される効果

- データ駆動によるポリマーアロイ設計のためのノウハウを学べる
- プロセスインフォマティクスとプロセス監視の関係性の習得

講師

船津 公人（ふなつきみと）講師

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
センター長／特任教授

- 1983年3月：九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了 理学博士
- 1984年3月：豊橋技術科学大学工学部物質工学系助手
- 1988年4月：同上 知識情報工学系助手
- 1992年4月：同上 助教授
- 2004年4月：東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授
- 2017年10月：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・研究ディレクター(兼務)
- 2021年3月：東京大学定年退職(2021年6月同大学名誉教授)
- 2021年4月：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・センター長・特任教授



