



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



化学システム工学専攻
Department of Chemical System Engineering

逆解析こそがマテリアルズ・インフォ マティクスに求められている

東京大学大学院工学系研究科
化学システム工学専攻
船津 公人

2018年1月29日

東大マテリアルズインフォマティクスワークショップ

・量子化学計算

与えた構造、材料の評価はできても、逆に具体的な構造、材料候補の提案は不可能。

順方向予測や解析は可能。逆方向予測は不可能。



まさにこの逆解析がデータ集約型化学に求められる重要項目の一つであると理解され始めてきた。



・量子化学計算 & データ駆動型化学

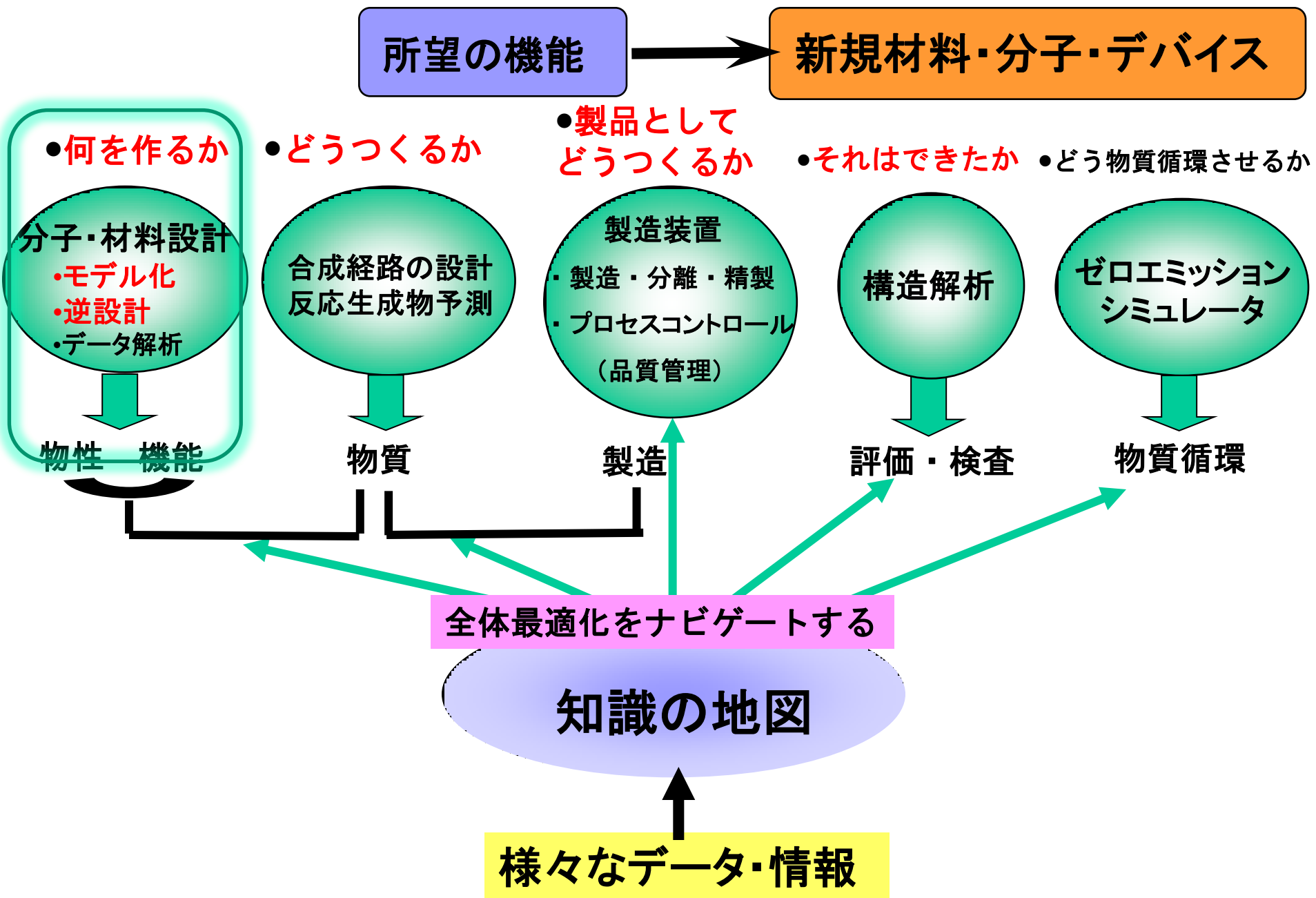
役割が異なるために車の両輪としての利用が必要
つまり設計と評価

ケモインフォマティクス(Chemoinformatics) が目指すこと

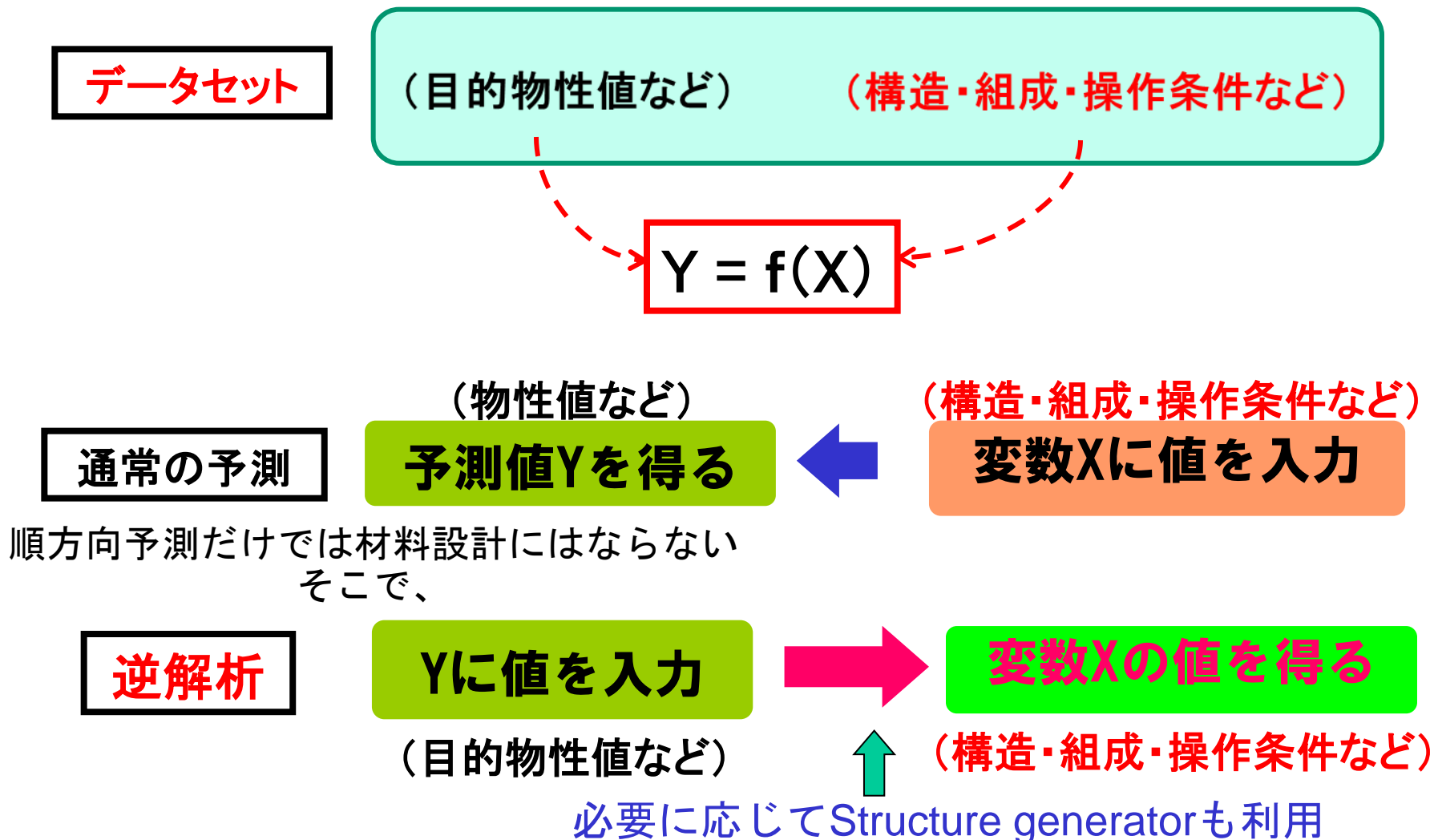
データ・情報から知識へ 知識から設計へ
単なる解析や説明だけではなく、具体的な予測や設計つながる新たな知識をコンピュータの特徴(ex.網羅性)を利用して作り出すことであり、まさに化学の姿勢そのもの

- ・新しい規則の発見、それによる新規分子構造、材料候補などの創出への期待
- ・先入観による見落としのカバー

データ駆動型化学の守備範囲



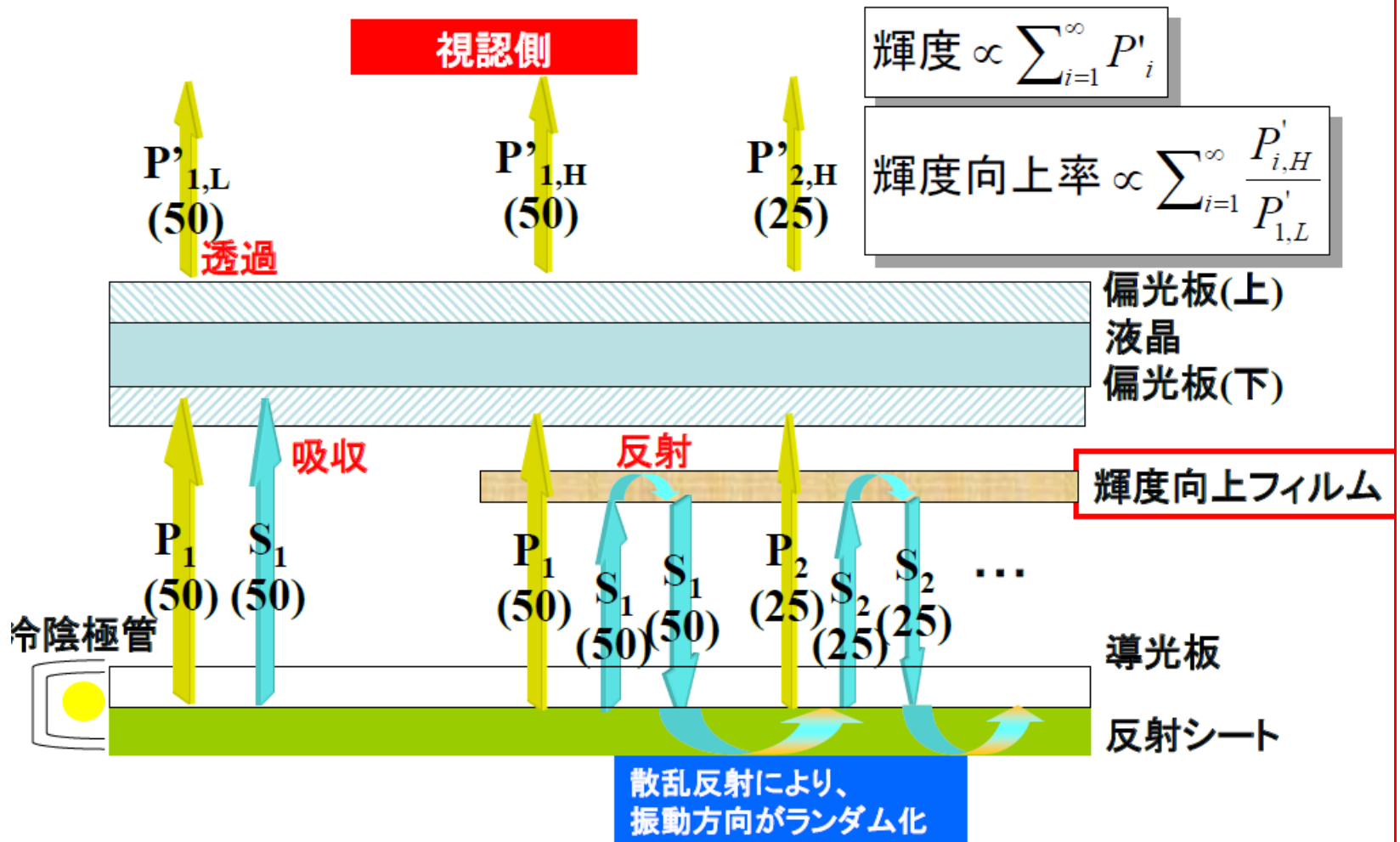
実験データを用いた予測モデル作成



•T.Miyao, M. Arakawa, K. Funatsu, Exhaustive Structure Generation for Inverse-QSPR/QSAR, *Molecular Informatics*, 29, 111-125, (2010).

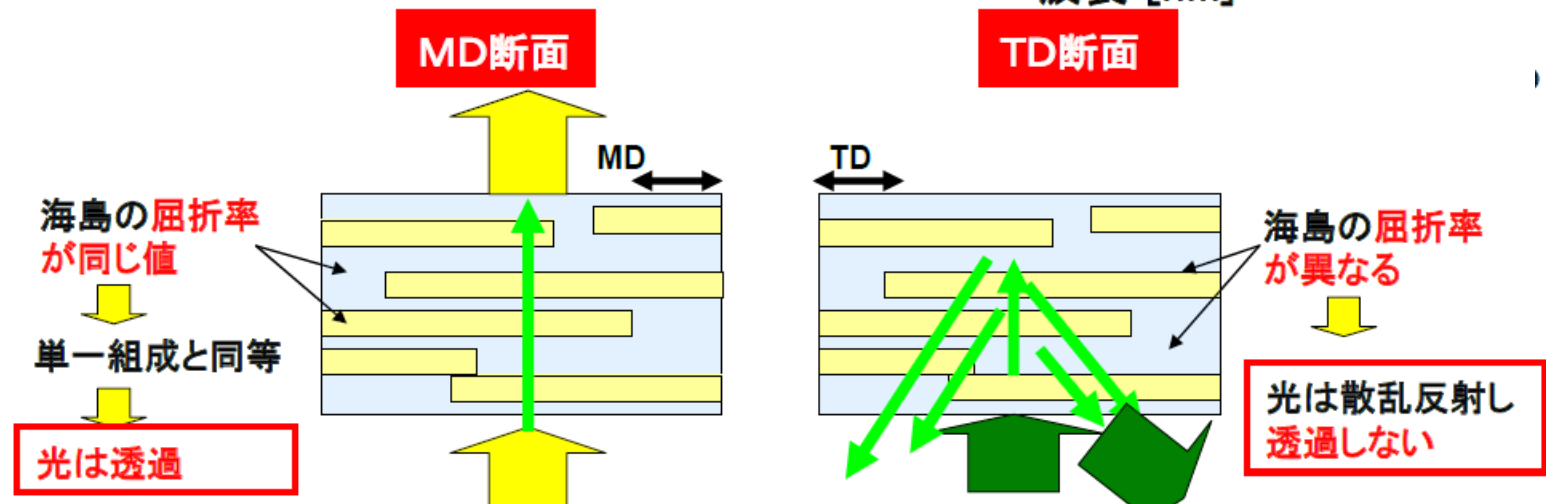
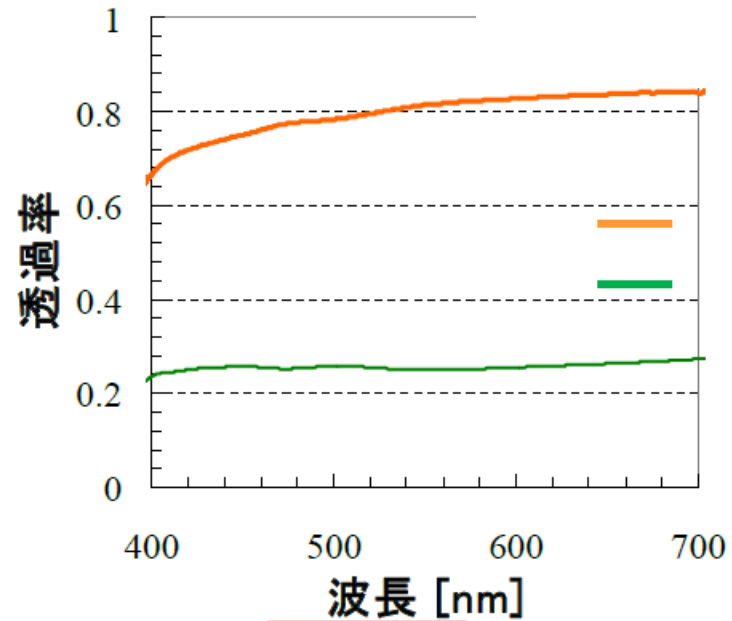
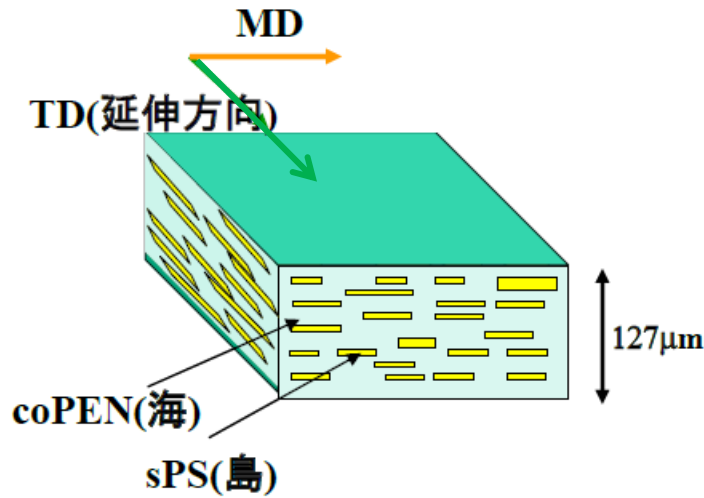
•T. Miyao, H. Kaneko, K. Funatsu, Inverse QSPR/QSAR Analysis for Chemical Structure Generation (from y to x), *Journal of Chemical Information and Modeling*, 56(2), 286-299, 2016.

輝度向上フィルムの輝度向上原理



従来吸収されていた偏向(Si)のみを反射して再利用→高輝度化

偏光透過/反射のメカニズム



材料組成だけではなくプロセス条件により特性が変化

- 開発目標

- 輝度向上フィルムの特性に関する定量モデルを構築し、より性能の高いフィルムの設計を行う
- その際に、押出条件などの性能に影響するパラメータ(プロセス条件)の最適化を目指したい

目標物性

- 輝度5400以上、MD透過率82%以上、TD透過率20%以下

・解析

– 目的変数(Y): **輝度** [cd/m²]

– **MD透過率** [%]

– **TD透過率** [%]

– 説明変数(X):

材料組成

(PEN [%], PET [%], sPS [%]) (相溶化剤1, 2, 3 [%])

プロセス条件

延伸温度[°C], 押出機機種 (1 or 2), 延伸倍率, 厚み[um]

サンプル数 : 26

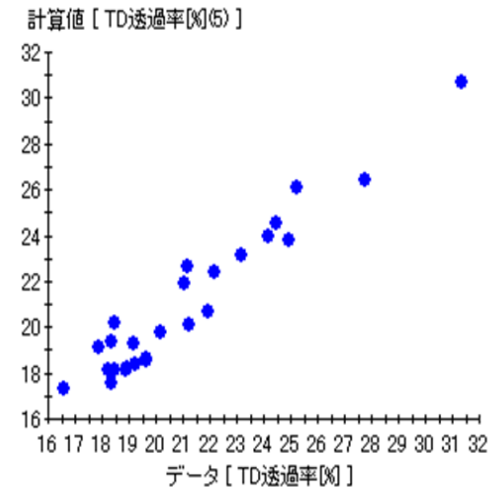
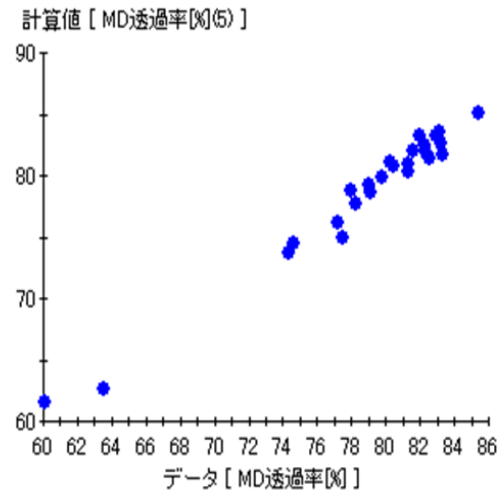
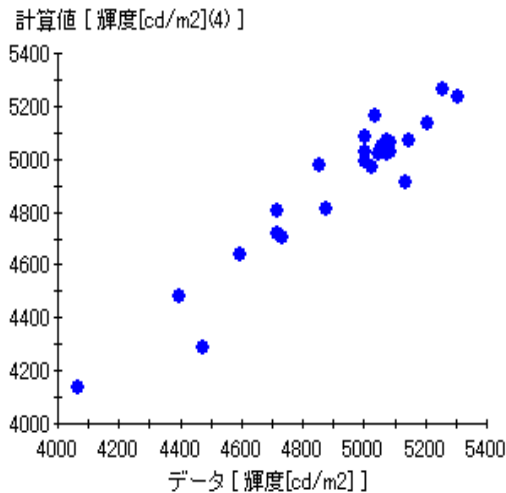
説明変数の数 : 10

実験データが少ない状態から出発して

目的物性を満足する候補を得る手法も別途開発

PLS(線形モデル化手法)による解析結果

- 目的変数: **輝度**
- 結果
 - $R^2 = 0.916$
 - $Q^2 = 0.682$
- 目的変数: **MD透過率**
- 結果
 - $R^2 = 0.977$
 - $Q^2 = 0.920$
- 目的変数: **TD透過率**
- 結果
 - $R^2 = 0.930$
 - $Q^2 = 0.746$



- 上の3つのモデルを同時に**逆解析**
- トレードオフを考慮した**多目的最適化**
(パレート最適解の探索)

多目的最適化

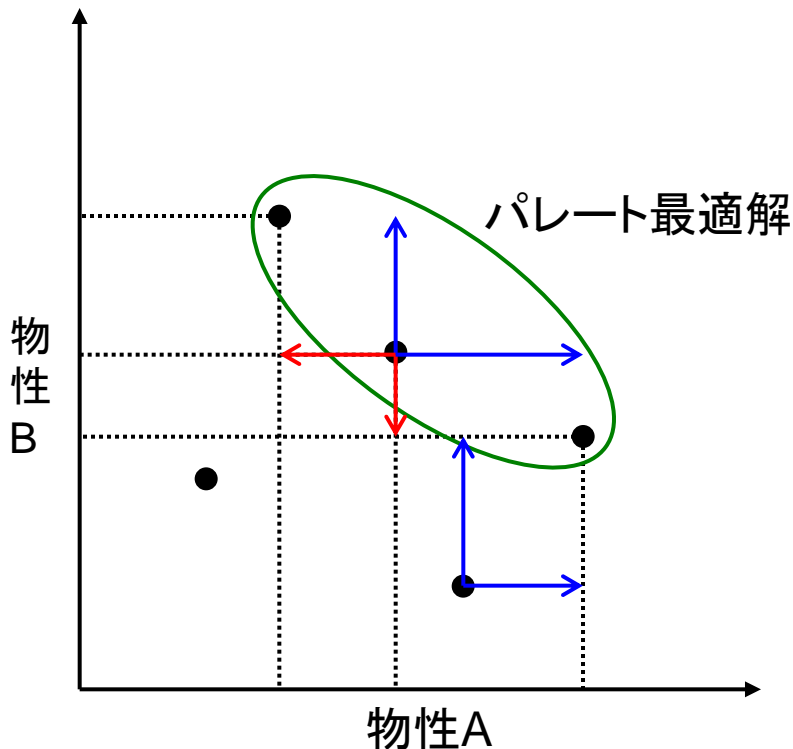
一般に物性間にはトレードオフの関係が存在する場合が多い

目的とする物性を同時に最適化することはできない

パレート最適の概念を用いた多目的最適化を行なう

✧ パレート最適とは

他の目的変数の値を減らすことなしには、どの目的変数の値も増加させることができないような状態



その他の応用事例

- 共重合ポリエステル樹脂の組成設計
および新規モノマー設計
- 自動車用各種プラスチック部品の組成設計
および操作条件最適化

(実際に成分ポリマー・カタログとアクセスをし、コスト面でも良好なポリマーアロイを短時間で設計する仕組みを開発し日常的に利用)
- 導電性有機材料開発
- プロピレンオキシド製造用触媒
- 無機材料など

・棚田東作、荒川正幹、西村竜一、船津公人、ケモメトリックス手法を用いた材料開発支援プログラムの開発、*J. Comput.-Aided Chem.*, 1, 35-46, (2000).

・後藤俊、荒川正幹、船津公人、ポリマー設計のための物性推算法と逆解析手法の開発、*J. Comput.-Aided Chem.*, 10, 30-37 (2009).

データ駆動型化学の守備範囲

所望の機能

新規材料・分子・デバイス

• 何を作るか

• どうつくるか

• 製品として
どうつくるか

• それはできたか • どう物質循環させるか

分子・材料設計

- モデル化
- 逆設計
- データ解析

合成経路の設計
反応生成物予測

製造装置

- 製造・分離・精製
- プロセスコントロール
(品質管理)

構造解析

ゼロエミッション
シミュレータ

物性 機能

物質

製造

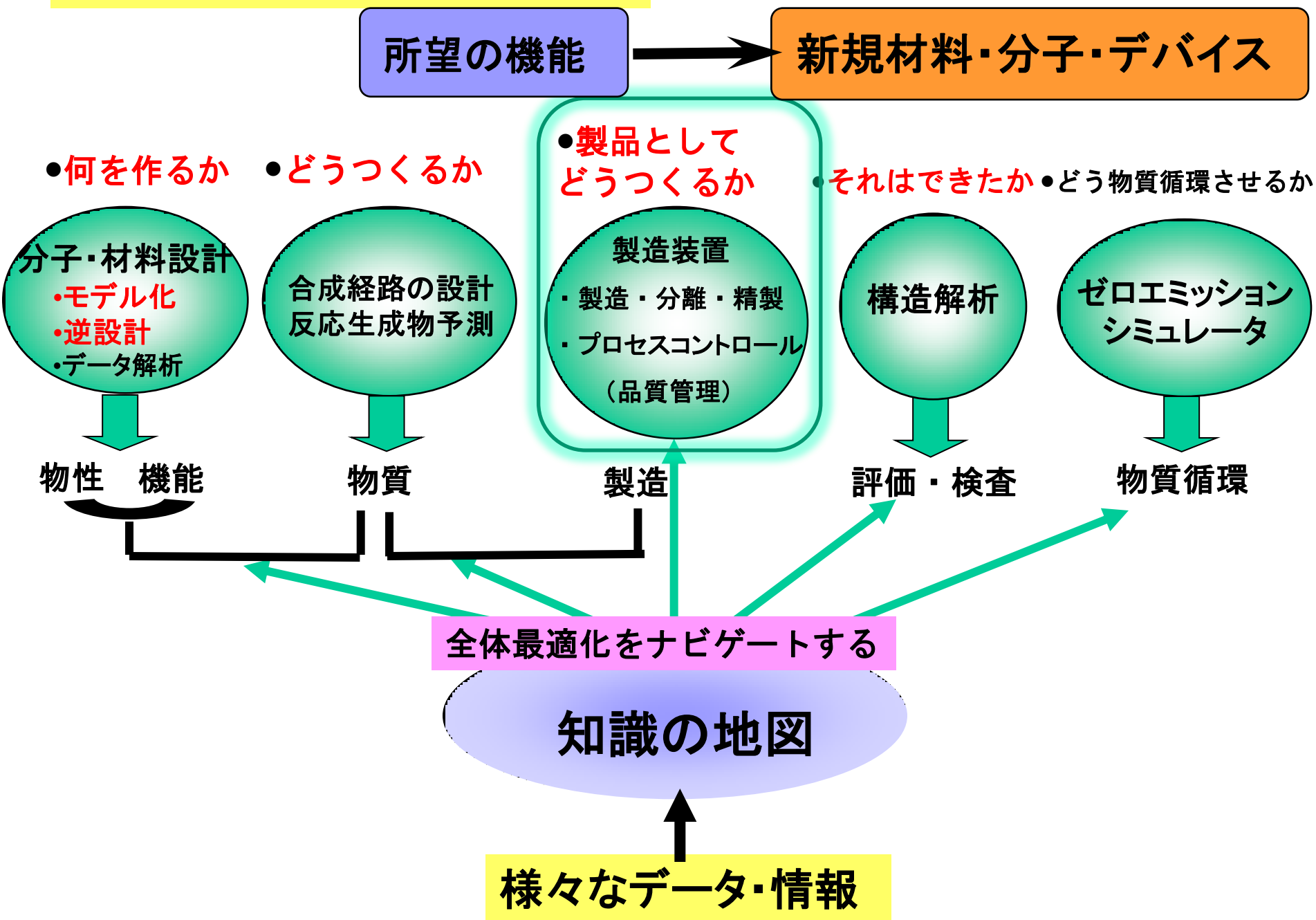
評価・検査

物質循環

全体最適化をナビゲートする

知識の地図

様々なデータ・情報



ソフトセンサー手法の開発と 生産プロセス管理への応用

観測が容易な温度・圧力・近赤外スペクトルなどのデータから、オンライン観測が困難な生産品の濃度・特性など品質をリアルタイムに予測しながらプラントを監視・制御する。

生産の効率化および安全確保の観点から確かなソフトセンサー手法が求められている。生産支援技術として注目

対象： ポリマー重合リアクター、薄膜製造、蒸留塔、
製剤連続生産プロセスなど

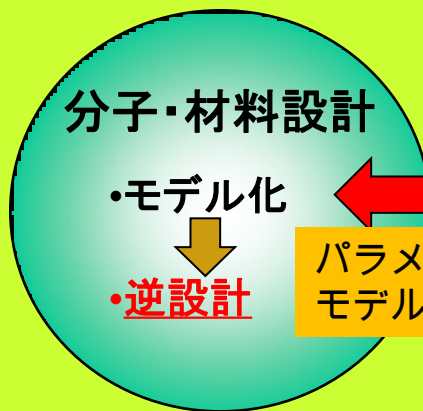
船津公人、ソフトセンサー入門、コロナ社、2015年

プロセス・インフォマティクスを考える

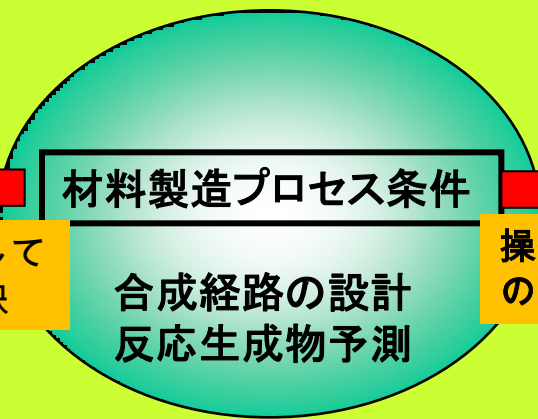
•何を作るか

•どうつくるか

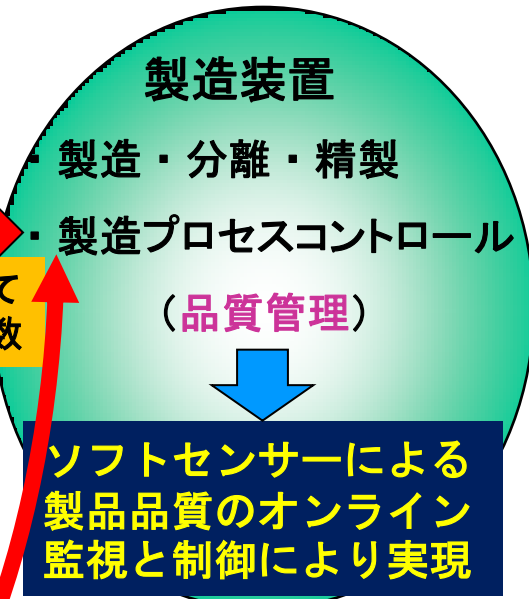
•製品としてどうつくるか



パラメータとして
モデル化に反映



操作変数としての
プロセス変数



品質管理を
同時に考慮

物性 機能

物質

製造

•材料設計時における一体化

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

マテリアルズ・インフォマティクスを根付かせるには

- 日常的なデータの取り扱いを議論・検討する、部門を超えた若手の集まりを組織すること
- 積極的にデータ・情報活用を推進し、たとえわずかでも利用可能なものは積極的に活用していこうとする意識改革が必要

往々にして人はこのようなデータ解析結果や予測システムに対しては完璧性を求めがちで、完璧でないものは使えない、使わないという極端な発想を持つことが多い。しかし、どんなものにもscopeとlimitationがあるように、データ活用による予測・設計にもデータの偏りや測定誤差などに起因する予測精度の不十分さが付きまとうことがある。

- 対象に応じてどこまで予測できれば良いのか、どこまで使えるのか、何が欠けているのかを正しく見極められる人材育成が必要

そして

- 材料開発、それに基づくデバイス開発、そして生産などで得られる**データ・情報**は次の新たなものを生み出すための**土壌**のようなものである。
- **土壌やその耕し方を他に依存するのは、切り花を買ってくるようなもの**でしかない。そのような花はすぐ枯れる。
- 世界的にもはや**データ駆動型化学**の意識が後戻りすることはない。我々が意識すべきは、**土壌の日常的な充実とその土壌を耕す技術の蓄積**である。
- まさにこのための**継続的な人材育成**が求められる。