

特集 製品開発を変えるプロセス・インフォマティクス

現在、材料科学データベースの整備の進展やAI技術の発展、計算機の高性能化に伴い、統計分析やAIを活用した新しい材料開発手法であるマテリアルズ・インフォマティクスの活用が様々な企業で進み始めている。マテリアルズ・インフォマティクスの活用により材料開発の効率化が進み、かつ新しい材料の発見にも繋がっている。

前号では、最近のマテリアルズ・インフォマティクスの動向を特集した。一方、理想的な新材料の発見がなされたとしても、その材料特性が製造方法（プロセス）によって変化することから、「どのように作るか」、「そもそも工業化が可能かどうか」という観点で課題が残る。分野によっては、その材料の目的が異なるため、商業運転までに検討すべき項目が大きく異なる。近年、その課題を解決する手法として、プロセス・インフォマティクスに注目が集まっている。プロセス・インフォマティクスは、狭義では目的材料の合成プロセスに対するインフォマティクスの適用であるが、広義の意味では、従来からの実験科学、理論科学、計算科学と、近年の進展が著しいデータ科学を、統合的・融合的に活用することにより、目的材料の商業化に至るまでのプロセスを効率的かつ統合的に探索する方法と考えることができる。本稿では、日本国内におけるプロセス・インフォマティクスを活用した取り組み事例を紹介したい。

（編集担当：末宗咲子・柏井利之・山田剛史）†

材料開発でのプロセスインフォマティクス活用を促進するマテリアル・プロセスイノベーションプラットフォーム

棚池 修・安岡 正喜・石原 正統

■ 大学の取り組み

ベイズ最適化を駆使したマイクロフロー反応での条件探索	布施 新一郎
プロセス・インフォマティクスのためのポリマースマートラボ設計	内藤 昌信
粉体成膜プロセスにおけるプロセスインフォマティクス	長藤 圭介

■ 企業の取り組み

市場プロセスを活用した材料開発	向田 志保
創薬の様々なプロセスにおけるインフォマティクス活用の潮流	徳山 健斗
機械学習を活用した化粧品の感触設計支援	大久保 堅三郎・藤山 一平
樹脂の成形加工プロセスでのインフォマティクス技術	富山 秀樹
半導体製造におけるインフォマティクス活用	守屋 剛・鈴木 悠介・米道 仁史・茂木 弘典

† Suemune, S. 令和4・5年度化工誌編集委員(7号特集主査)ライオン(株)プロセス技術研究所

Kashiwai, T. 令和4年度化工誌編集委員(同上)ライオン(株)信頼性保証部

Yamada, T. 令和3・4年度化工誌編集委員(同上)(株)ダイセル イノベーション・パーク 生産本部 生産技術センター シミュレーショングループ