

## 22-3 ポリマーフロンティア 21 (オンライン開催)

主題=MI で加速する高分子の研究・開発 ～実験・計算科学・MI 技術の融合～

<趣旨> 情報科学の進歩を契機として、実験・計算科学・マテリアルズインフォマティクス (MI) を融合させた材料開発のデジタルトランスフォーメーション (DX) に注目が集まっています。既に無機材料・創薬分野では方法論が確立され開発現場で MI は普及しつつあります。一方で、構造の自由度が大きい高分子にはさらに多面的なアプローチが必要であり、データ駆動型の材料開発を実現するために新たな手法開発・事例検証が進められています。本講演会では、MI を利用した高分子の研究・開発事例について最新の成果・今後の展望をご紹介します。

主催 高分子学会 行事委員会

協賛 (予定) 日本化学会、情報処理学会、プラスチック成形加工学会、日本複合材料学会、有機合成化学協会

日時 2022 年 9 月 12 日 (月) 10:20-17:00

### プログラム

<10:20-11:10>

#### 1. データを活用した高速マテリアル研究開発を推進していただくために

(文部科学省) 江頭 基

社会・経済活動のデジタル化が進む中、材料研究開発の世界でもデータを活用した効率的な研究開発の取組が進んでいます。質の高いデータを集め、我が国の産業界、アカデミアの研究者、技術者がデータを活用した高速、効率的な材料研究開発が進められるよう、政府は新たに策定した国家戦略に基づき、大胆な施策を講じています。講演では政府の主な施策の紹介と産学の研究者、技術者の方々へのメッセージをお伝えします。

<11:10-12:00>

#### 2. 化学産業における MI と R&D の DX

(旭化成) 河野 禎市郎

MI は企業の R&D を劇的に加速・強化する手法として脚光を浴びているが、その活用にはデータの充実はもちろん、研究設備、人材、開発戦略などを含めた R&D 全体の変革が必要である。本講演では旭化成におけるこれらの取り組みについて紹介する。

<13:20-14:10>

#### 3. マテリアル DX を活用した高分子開発

(三井化学・信州大学) 向田 志保

企業で取り扱う高分子は基本的に複合樹脂であり、複雑多岐に渡る。昨今は、マテリアル DX を活用した自動化、遠隔化、無人化などの流れが起きている。様々な観点から開発を加速化するためのデータの作り方、実験の進め方について提案する。

<14:10-15:00>

#### 4. 有機合成のデジタル化—その意味と実現性

(京都大学) 松原 誠二郎

分子を作る仕事を担当する有機合成は、近年のデータ駆動型化学の流れを受け、「デジタル化」の実現を問われるようになった。長年、アナログ技術で対応してきたこの分野で、何が可能で、何が必要なのか、現状を再考する。

<15:20-16:10>

#### 5. 粉体成膜プロセスインフォマティクス ～ベイズ最適化を用いたハイスループットパラメータ探索～

(東京大学) 長藤 圭介

燃料電池や蓄電池の電極の製造プロセスは、マイクロで高速な粉体成膜現象からなり、そのパラメータ候補は膨大である。本講演では、プロセスインフォマティクスの一例として、自律実験を用いた粉体成膜プロセスのパラメータ探索の事例を紹介する。

<16:10-17:00>

#### 6. 企業でのマテリアルズインフォマティクスの適用と課題

(本田技術研究所) 岡山 竜也

近年、AI・機械学習を活用したマテリアルズインフォマティクス (MI) による材料開発が注目されている。本講演では、材料ユーザー側企業での MI 活用について概要説明するとともに、無機系での実施例を示す。また、有機系の MI との比較を行い、双方の今後の課題について考察する。

**参加要領** 1) 定員 100 名 2) 参加費 (税込) ①企業 22,000 円②大学・官公庁 11,000 円 ③学生 1,100 円 3) 申込方法 高分子学会ホームページ (<https://member.spsj.or.jp/event/>) からお申込みの上、参加費を 9 月末日までにご送金下さい。 4) 振込先 銀行振込<三菱 UFJ 銀行 銀座支店 (普通) 1126232 名義 公益社団法人 高分子学会> 郵便振替<00110-6-111688 名義 公益社団法人高分子学会> 振込み手数料はご負担くださいますようお願いいたします。 5) 演題・講演者は予告なく変更になる場合がございます。予めご了承下さい。

**問合先** 〒104-0042 東京都中央区入船 3-10-9 新富町ビル 公益社団法人 高分子学会 22-3 ポリマーフロンティア 21 係 TEL 03-5540-3771 FAX 03-5540-3737