

20-4 ポリマーフロンティア 21

主題=スマートラボトリーで加速する高分子の研究開発

<趣旨>

マテリアルズインフォマティクス (MI)・AI の台頭は、先端材料の開発に大きな変革を及ぼしつつあります。さらに、ロボットによるハイスループット化や ICT/IoT 技術を取り入れることで、一步進んだ材料開発サイクル、即ち「スマートラボトリー」による高分子の研究開発の加速と効率化が期待できます。本講演会では、スマートラボトリーで加速する高分子の研究開発の鍵を握るハイスループットな実験・計測、MI・AI 解析、実験条件を提案する逆問題の MI 解析などの要素技術や最新技術への取組みを中心に、企業やアカデミアの研究者から紹介いただきます。

主催 高分子学会 行事委員会
協賛 日本化学会、化学工学会、繊維学会、応用物理学会、日本コンピュータ化学会、日本ゴム協会、有機エレクトロニクス材料研究会 (予定)
会期 2020年11月20日(金) 10:20-17:20
会場 WEB行事 (ライブ配信) に変更となりました (会場での講演はありません)

プログラム

<10:20-11:10>

1. データ駆動型分子設計を基点とする高分子材料の開発 (物質・材料研究機構) 内藤 昌信

データ科学と材料科学を融合したマテリアルズインフォマティクスを高分子材料に応用する試みが進んでいる。本講演では、最近のトレンドを紹介するとともに、データ駆動型高分子材料開発の事例について紹介する。

<11:10-12:00>

2. 深層学習に基づくイオン・電子伝導性高分子の高精度な物性予測 (早稲田大学) 畠山 欽

機械学習の手法を用いた高分子材料の探索に注目が集まっている。本講演では、全固体二次電池の候補部材である Li^+ 伝導性高分子や透明電極として使われる電子伝導性ポリマーを中心に、物性予測や構造探索の実例とともに、必要な技術や得られた成果について紹介する。

<12:00-12:20> 一名刺交換会、参加者・講師のふれあいの場 (オンライン開催の場合中止)

<13:20-14:10>

3. 二軸押出機の AI/IoT ソリューション (日本製鋼所) 福澤 洋平

二軸押出機を用いた樹脂製造プロセスにおいて、スクリュデザインは重要である。本講演では、スクリュデザインを AI 技術によって自動最適化した事例とともに、押出機に対する保全や運転支援とその周辺技術であるデータ収集や集中管理などの IoT ソリューションについて紹介する。

<14:10-15:00>

4. 分子設計・材料設計・プロセス設計における適応的実験計画法および研究事例 (明治大学) 金子 弘昌

データ化学工学研究室 <https://datachemeng.com/> では、様々な高機能材料のデータを用いた分子設計、材料設計や産業プラントのデータを対象としたプロセス設計、プロセス管理・制御を行っている。本講演では特に適応的実験計画法に関する内容について紹介する。

<15:00-15:20> 一名刺交換会、参加者・講師のふれあいの場 (オンライン開催の場合中止)

<15:20-16:10>

5. 画像認識、形態の定量評価、機械学習による順解析と逆解析による統合型材料デザインの試み (名古屋大学) 足立 吉隆

金属材料を主対象とした統合型材料デザインが試みられている。本講演では、顕微鏡画像の機械学習による自動認識、定量形態学及び数学による特徴量の抽出、材料組織と特性間の順解析モデルの構築および逆解析による理想組織像の追求を用いた一貫材料設計法について紹介する。

<16:10-17:00>

6. ハイスループット実験を基盤としたデータ駆動型材料科学研究 (北陸先端科学技術大学院大学) 谷池 俊明

材料科学におけるデータ駆動型研究の限界は、学習可能なデータの欠如・不足にある。本講演ではハイスループット実験によるデータ取得を前提とした近年の研究成果について紹介する。

<17:00-17:20> 一名刺交換会 (中止)