

〈特集〉

材料設計・プロセス制御のためのデータ駆動型化学
—— 材料設計、品質管理と制御の連動 ——船 津 公 人¹⁾¹⁾ 東京大学大学院 工学系研究科化学 システム工学専攻
(〒 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1 E-mail: funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

概 要

従来、順方向の予測、つまり与えた構造から、材料の評価、物性推算はできて、逆に目的物性をもつ構造、材料候補の提案（逆解析）は難しかった。近年この逆解析こそがデータ駆動型化学に求められる重要項目と理解され始めてきた。「何を作るか」から、それを「どう作るか」、そして安定した品質で生産するための生産プロセス監視と制御に関わる課題に迅速かつ効果的に対応させるために、いまやデータ、情報の積極的活用が不可欠となってきた。これらのことについて事例を通して紹介する。

キーワード：材料設計、プロセス設計、プロセスインフォマティクス、マテリアルするインフォマティクス
原稿受付 2019.2.4

EICA: 23(4) 24-26

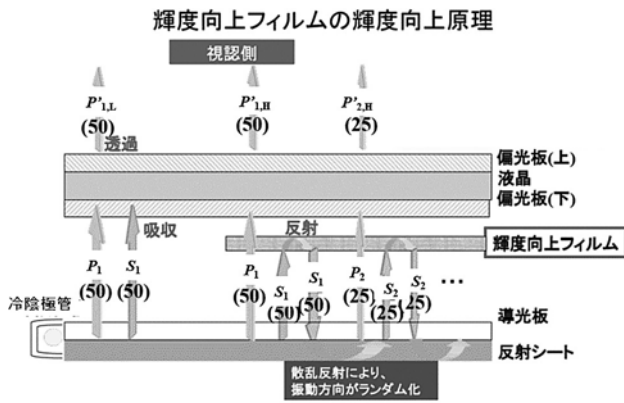
1. 材料設計の現状と課題

現在の我が国の素材研究開発分野は、産業の発展に大きく貢献するとともに、国際的にも優位な位置を堅持していると言われている。ただ、材料開発にはこれまで経験と勘に裏打ちされた実験の手法が中心的な役割を果たしてきたが、これがゆえに、新物質の発見から材料としての実用化（デバイスへの最適組み込みのための周辺技術の開発と最適化も含めて）には非常に長い時間と費用を要しているのも事実である。今後もグローバルレベルで産業競争力を発揮し続けるためには、継続的に分野融合の創造的な取り組みが必要である。そのためには、これまでの材料開発で蓄積された多くのデータ・情報を駆使し、材料開発に要する時間と費用を合理的に短縮する環境整備が重要となってくる。化学におけるコンピュータ利用というとすぐに量子化学計算を連想する方々も多いと思う。しかし、量子化学計算は、与えた構造、材料への評価は得意でも、逆に目的特性をもつ具体的な化学構造、材料候補を提示できる仕組み（逆解析）を本質的にもっていない。つまり順方向予測や解析はできて逆方向予測（逆解析）はできないのである。この背景を受けて、まさにこの逆方向予測（逆解析）こそがデータ駆動型化学に求められる重要項目の1つであると理解され始めてきたのである¹⁻³⁾。

2. プロセスも含めたポリマー材料設計戦略

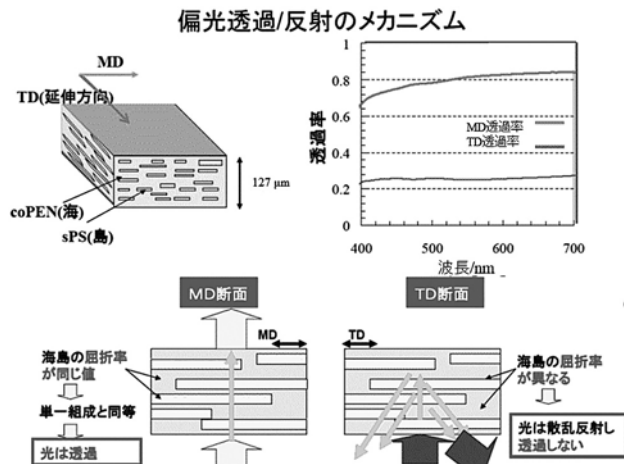
原料が同じでもプロセス条件が異なると、ほとんどの場合、得られる材料の物性も異なる。初めにも述べた通り、まさに「何を作るか」を考える時に「どう作るか」を同時に最適化しなければならないが、これに相当する分かりやすい事例の1つとして、ポリマーアロイである輝度向上性フィルム設計の例を示そう。輝度向上性フィルムの輝度、MD (Machine Direction) 透過率、TD (Transverse Direction) 透過率（成形時の流れ方向 MD、流れに直角の方向を TD という）をとともに目的の性能に向上させることは、お互いの性能のトレードオフの関係から困難が伴う。以下にこの輝度向上性フィルムの総合的な性能向上を目指したインフォマティクスの活用の流れを示す。

図1に輝度向上性フィルムの仕組みを示した。従来偏光板・液晶に吸収されていた偏光（S波）のみを輝度向上性フィルムで反射することで高輝度化を図ろうとするものである。また、図2に示すように、輝度向上性フィルムのMD断面では海島の屈折率が同じであるためにP波は透過していく。しかしながらTD断面では逆に海島の屈折率が異なるために光は乱反射し透過しない。この透過の程度は輝度向上性フィルムを製造する際の延伸温度、延伸倍率、フィルムの厚みというフィルム製造時のプロセス条件に依存する。したがって、輝度向上性フィルムの各目的特性を実現するにあたっては、成分ポリマーの組成比はもちろんであるが、製造プロセス条件も考慮しなければならない。



従来吸収されていた偏光(S₀)のみを反射して再利用→高輝度化

Fig. 1 Brightness Improved Film.



材料組成だけではなくプロセス条件により特性が変化

Fig. 2 Mechanism of Polarizing Transmittance/Reflection

このことから、目的の輝度、TD 透過率、MD 透過率の同時向上を実現する輝度向上性フィルムの候補を提案するにあたっては、成分ポリマーの組成比だけではなくこれらのプロセス条件も説明変数 X として加えた構造-物性相関モデルの構築が必要となる。

以上のことを考慮して、輝度向上性フィルムの輝度、MD 透過率、TD 透過率に対する構造-物性相関モデルを、図 3 に示した説明変数を使って構築することにした。説明変数には成分ポリマーの種類とその割合はもちろんであるが、延伸温度、延伸倍率、厚みなどのプロセス条件が用いられている。また、押出機 1, 2 は同じ仕様をもつ押出機であるが、スクリーンが鋳物であるために微妙な違いが生じる。したがって、使用する押出機によってそれぞれの特性値に違いが出てくるためにどちらを利用したかを区別する必要がある。この区別のために用いた説明変数には、押出機 1 を使った場合には 0 を、2 を使った場合には 1 を入れることで対応している。モデル化には線形モデル化手法の 1 つである、PLS (Partial Least Squares) を用いた。PLS は誤差やノイズを含む化学データのモデル

・解析

- 目的変数(Y): 輝度/cd m²
- 10² MD透過率
- 10² TD透過率

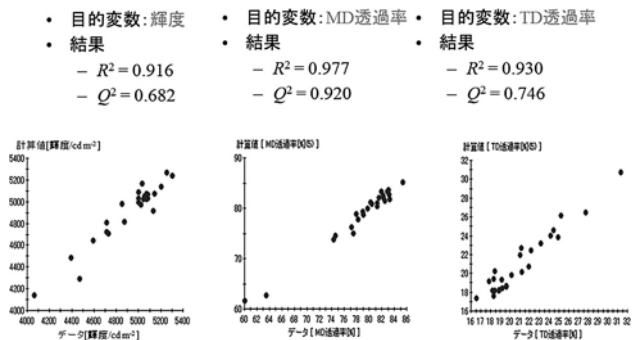
- 説明変数(X):

- 材料組成
- [10² w(PEN), 10² w(PET), 10² w(sPS)]
- [10² w(相溶化剤) = 1, 2, 3]
- プロセス条件
- 延伸温度/°C, 押出機種種 (1 or 2),
- 延伸倍率, 厚み/μm

サンプル数 : 26

説明変数の数 : 10

Fig. 3 Objective and Explanatory Variables



- ・目的変数: 輝度
- ・結果
- R² = 0.916
- Q² = 0.682
- ・目的変数: MD透過率
- ・結果
- R² = 0.977
- Q² = 0.920
- ・目的変数: TD透過率
- ・結果
- R² = 0.930
- Q² = 0.746

Fig. 4 Results of PLS Analysis

化に最もよく用いられる手法で、サンプル数よりも説明変数の数が多い場合でも安定したモデルが構築できる利点がある。

このモデル化で重要な点は、延伸温度、延伸倍率、厚みなどのプロセス変数を直接そのまま説明変数として利用してモデル化を行っていることである。設計の目的に合わせて自在に変数を導入して行くのもデータ駆動型化学の利用の姿である。

輝度、MD 透過率、TD 透過率のそれぞれの目的変数に対して、図 3 に示した 10 個の説明変数を用いて PLS によりモデルを構築した。

図 4 は、輝度、MD 透過率、TD 透過率の実測値に対して、それぞれのモデルによる計算値をプロットしたものである。いずれのモデルも大変に良好なモデルの精度 (R²) と予測能力 (Q²) を有していることがわかる。これら 3 つのモデルを同時に逆解析することで、輝度と MD 透過率を最大化しつつ、TD 透過率を最小化する候補の探索が可能となる。ただし、各目的変数間にはトレードオフの関係があるために、双方の値を最大化する候補解を得るにはパレート最適解を得る操作を行う必要がある。パレート最適解とは、ある目的変数の値を大きくするには、他方の目的変数の値を小さくせざるを得なくなる解のことである。結果と

して、期待の性能を実現する輝度向上性フィルムの成分ポリマー組成比、相溶化剤の種類とその量、そして延伸温度、延伸倍率、厚みというプロセス条件をセットとした複数の有望候補が提案されたが、これらの候補は実際に実験によりその候補の有効性が検証されている。この事例のほか、筆者はこれまで共重合ポリマーを対象とした成分モノマーの配合割合を対象とした、ポリマー材料設計に関する取り組みをいくつか行ってきたが、その一部は文献をご覧いただければと思う⁴⁻⁶⁾。

ここで示した事例はポリマーアロイであるが、プロセス条件も含めてモデル化するという考え方は他の様々な材料設計にも通じることである。

3. プロセスインフォマティクスの展開

目的物性・特性をもつ新規分子・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と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、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。これについては図5に示したようなプロセスインフォマティクスが今後必要になる。

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、単に物性と構造（組成）の相関モデルだけでは物性推算モデルの精度は上がらない。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良いか曖昧なままである。構造（組成）物性相関モデルにプロセス条件を導入することによってはじめて、材料組成、プロセス条件、そして物性が関連付けられるのである。まさに材料設計時に作り方で織り込むという考え方である。これができれば、材料製品製造における品質管理の際にどのプロセス変数をどのように操作すれば製品品質の維持、つまり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。ここではソフトセンサーを用いたプロセス監視とそれを用いたプロセス制御が大きな役割を担う⁷⁾。ソフトセンサーとは、オンラインで簡単に計測できる温度、圧力、流量のようなデータから、オンラインで測定が難しい製品物性などを、過去の運転データから構築した統計モデルによって推定する統計モデルのことである。設定した製品物性から外れそうな場合には、このソフトセンサーを逆解析すれば、温度あるいは圧力などのプロセス変数をどのように操作すれば良いかが求められる。

これまで見てきたように、データの集約的活用により、まさに材料設計、プロセス条件検討、品質管理までを逆解析という視点から俯瞰して扱えるようになってきたのである。

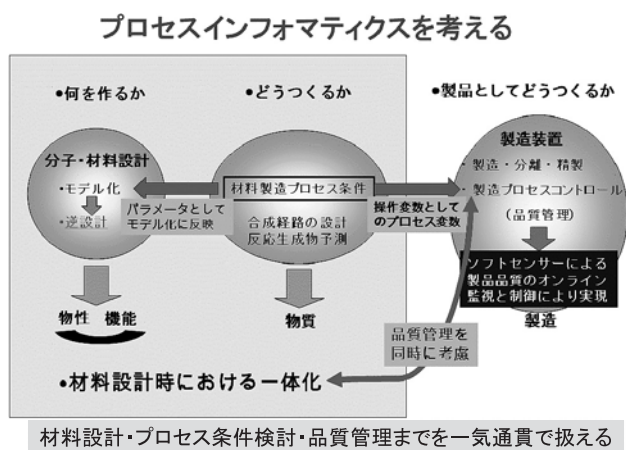


Fig. 5 Concept of Process Informatics

参考文献

- 1) T. Miyao, M. Arakawa, K. Funatsu, *Molecular Informatics* 2010, 29, 111.
- 2) K. Funatsu, M. Arakawa, T. Miyao, *Current Computer-Aided Drug Design* 2011, 7, 1.
- 3) T. Miyao, K. Funatsu, *J. Chem. Inf. Model.* 2016, 56(2), 286.
- 4) 棚田東作, 荒川正幹, 西村竜一, 船津公人, *J. Comput. -Aided Chem.* 2000, 1, 35.
- 5) 後藤俊, 荒川正幹, 船津公人, *J. Comput. -Aided Chem.* 2009, 10, 30.
- 6) 船津公人, 金子弘昌, *ソフトセンサー入門 —— 基礎から実用的研究例まで ——*, コロナ社, 2014.