

フロー・バッチ合成によるスケーラブルな プロセス・インフォマティクスの確立

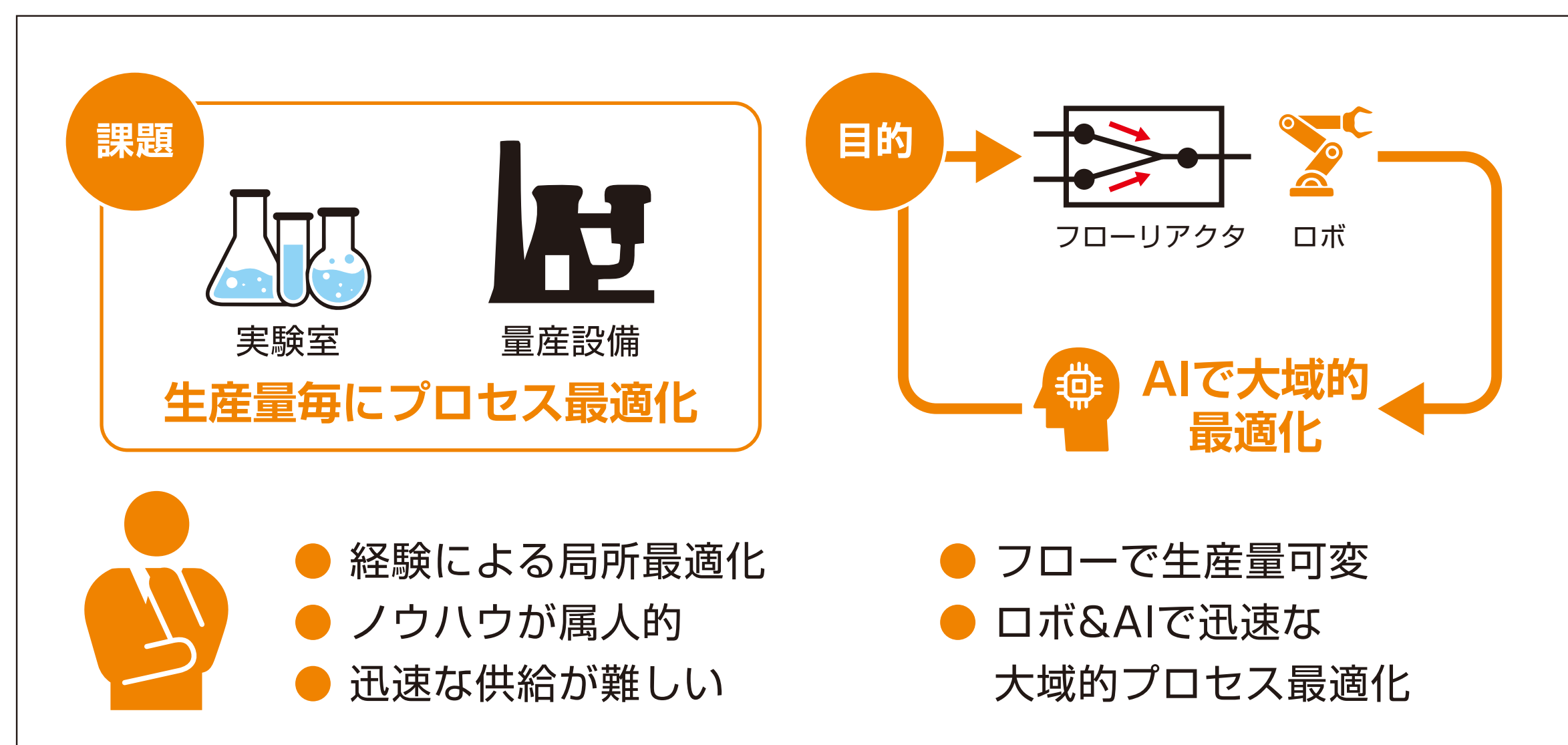
Scalable Process Informatics with Flow-batch Synthesis

プロセス・インフォマティクス / コポリマー / 自律実験 / 量子計算

process informatics / copolymer / autonomous experiments / quantum chemistry

研究開発の概要 Research Highlights

- 化学合成プロセスでのスケールアップでの課題**
 生産する量に合わせて設備や方法を最適化しているため、相似拡大だけでは同じ合成プロセスが再現できません。
- ポリマー精密合成のためのデジタル制御技術**
 スケーラビリティを実現するため、AI及びデジタル技術でコントロールされたフロー・バッチ合成法を開発し、合成プロセスの精密制御を可能にします。
- 反応データベースとプロセス最適化AI**
 共重合反応2500種の活性化エネルギーをデータベース化し、生産プロセス最適化に重要なAI構築を行います。
- 自動制御されたオンデマンド合成装置の開発**
 ロボティクスとオンライン測定で自動制御された、化学品のオンデマンド製造を可能にする合成装置を開発します。



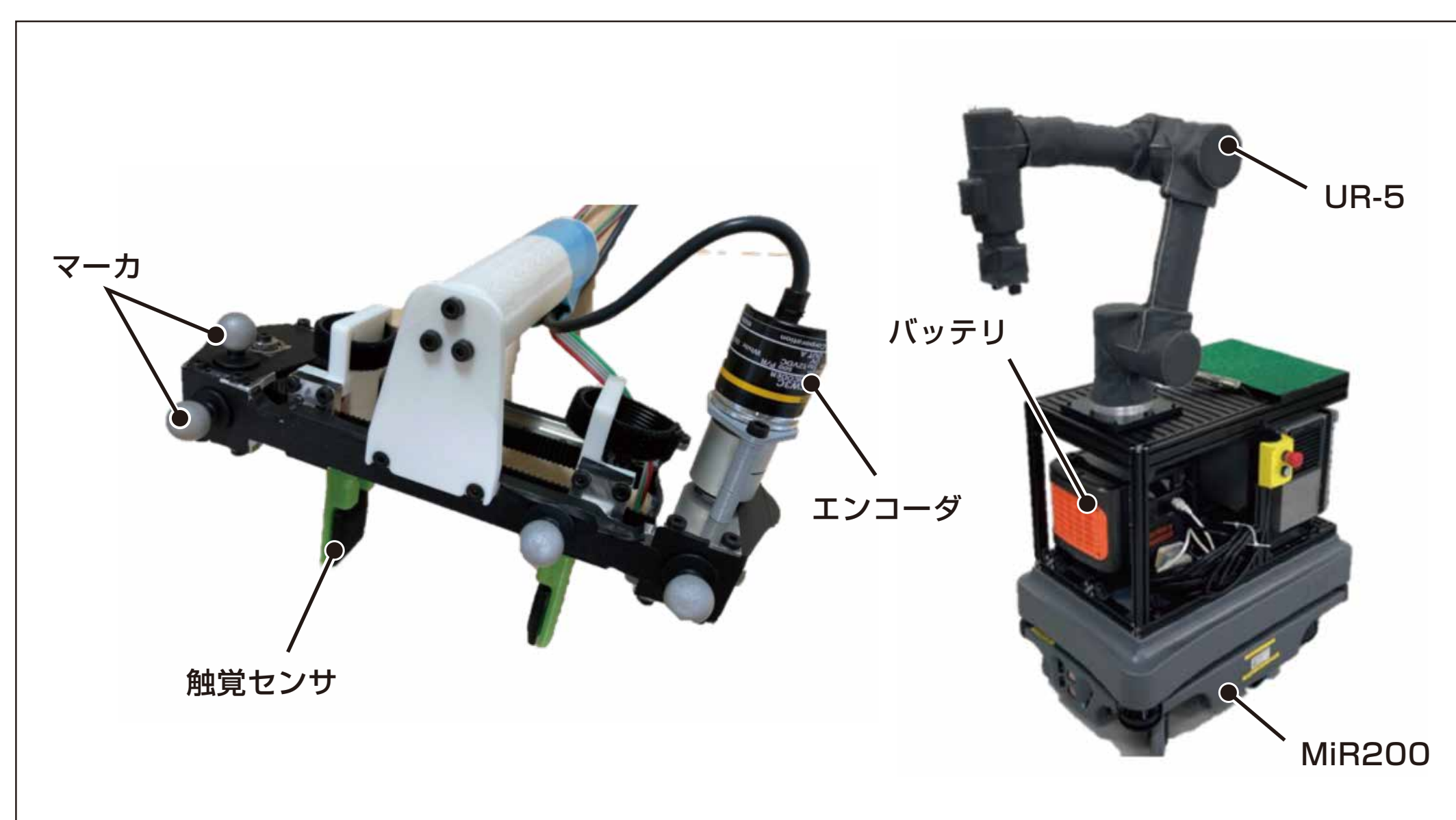
研究開発の課題と目的
Difficulty and Objective



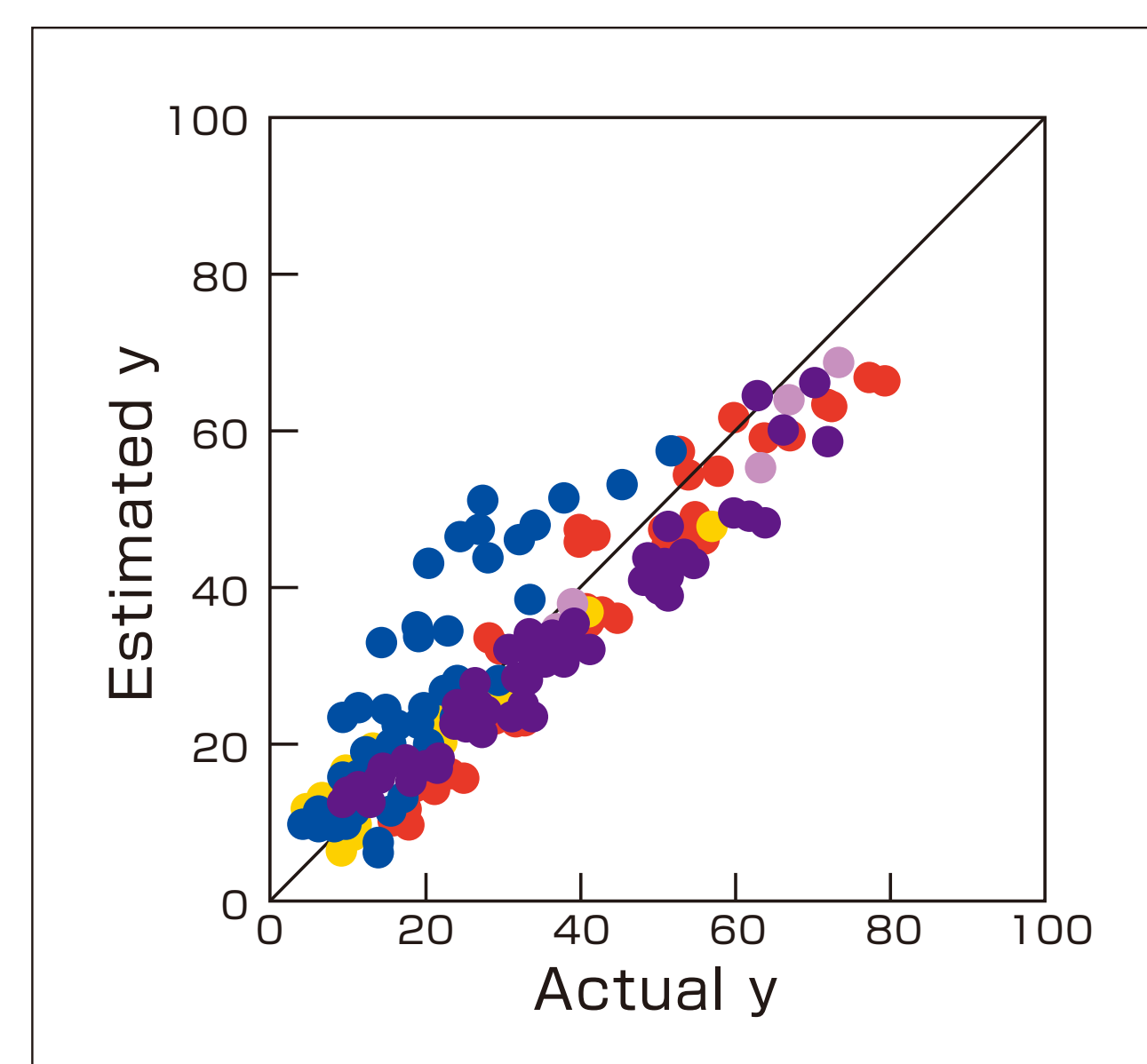
フロー・バッチ合成装置
flow-batch synthesis

来場者に向けて For Visitors

本技術はデジタルとリアルの融合を特徴とし、機能性高分子の精密重合での実績をあげています。今後は実用化へ向けて連携先を拡大していきたいと考えています。本技術およびデジタルとリアルの融合にご興味のある方はぜひご相談ください。



人間の動きをロボットの動作に変換して学習させるシステム
Robotic experimental system



生成量のAI予測による見積りと検証
AI prediction validation of product

関連サイト

機械学習・AI 奈良先端大 マテリアルズ・インフォマティクス研究室
<https://sites.google.com/view/naist-mi>

ロボティクス 奈良先端大・ロボットラーニング研究室
<https://isw3.naist.jp/Research/ai-rl-ja.html>

フロー合成 奈良先端大・ナノ高分子材料研究室
<https://mswebs.naist.jp/LABs/ajiro/index-j.html>

機械学習・AI データ駆動型化学研究室
http://www-dsc-vm.naist.jp/data-driven_chemistry/

重合反応 JSR株式会社
<https://www.jsr.co.jp/>

計算化学 慶應義塾大学・理論化学研究室
<https://chem.keio.ac.jp/hatanaka-lab/index.html>

NEDOプロジェクト名称 NEDO先導研究プログラム / マテリアル革新技術先導研究プログラム

実施期間 2021年度 ~ 2023年度

問い合わせ先 奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 物質創成科学領域 マテリアルズ・インフォマティクス研究室