G1-14 ポリマーインフォマティクスで加速するサーキュラー高分子材料開発

内藤昌信（NIMS）

2050 年カーボンニュートラルの実現に向け、プラスチックのサーキュラーエコノミーの構築が世界的に求められている。マテリアルリサイクルは環境負荷の低い循環技術として期待されている一方、リサイクル材料は原料、添加剤、加工履歴、使用・劣化履歴などが複雑に影響するため品質のばらつきが大きく、高付加価値用途への展開が課題となっている。さらに、デジタルプロダクトパスポート（DPP）の導入が進む中、材料の情報を適切に取得・管理・活用することが重要となり、材料開発だけでなく、回収、選別、品質保証までを含めたデータ駆動型研究への期待が高まっている。
近年のポリマーインフォマティクスでは、化学構造に加えて、X 線回折（XRD）、赤外分光（IR）、ラマン分光、質量分析、顕微鏡画像など、多様な分析データを活用した材料研究が急速に発展している。従来は分析データを人が解釈することが中心であったが、近年では AI や機械学習を用いて材料構造と物性との関係を解析する研究が数多く報告されている。また、分析データをそのまま入力するのではなく、材料科学的な意味を持つ特徴量へ変換することで、高い予測性能と解釈性を両立する手法も提案されている。さらに、ベイズ統計や説明可能 AI などの導入により、物性予測だけではなく、材料構造を理解し、新たな知見を発見するためのツールとしてポリマーインフォマティクスは進化しつつある。
一方で、近年は分析データだけでなく、製造工程で取得されるプロセスデータを品質評価へ活用する研究も進展している。例えば、混練工程で取得される溶融粘度データを機械学習によって解析し、追加の測定を行うことなく機械特性を推定する手法が提案されている。このようなプロセスデータの活用は、インライン品質管理やリサイクル材料の品質保証に加え、DPP との連携によるトレーサビリティの高度化にもつながることが期待される。
本講演では、サーキュラーエコノミー時代に求められるポリマーインフォマティクスについて概説するとともに、分析データ、製造データ、自動・自律実験（Self-Driving Laboratory）を融合した最新の研究動向を紹介する。また、今後、マルチモーダル AI や大規模材料データ基盤の整備により、材料開発だけでなく、リサイクル、品質保証、資源循環までを一体的に支える新たな材料情報科学へと発展していく将来像について展望する。

References
1) Hammura, K.; Hitomi, K.; Nagata, K.; Naito, M. Replica-exchange Bayesian mixture regression reveals cluster-dependent XRD descriptors of tensile modulus in recycled polypropylene. Science and Technology of Advanced Materials: Methods 6 (2026), 2662046.
2) Hibi, Y. et al. Nearly Zero-Cost Lot-by-Lot Inspection of Recycled Polypropylene Using Deep Learning of Melt-Viscosity Profiles. ACS Sustainable Resource Management 2 (2025), 673–680.

PROFILE

内藤昌信（物質・材料研究機構高分子・バイオ材料研究センター　センター長）
① 学歴：東京工業大学大学院生命理工学研究科博士後期課程修了（2001）②専門分野：機能性高分子材料開発・データ駆動型材料開発・スマートラボ開発、役職：STAM・STAM methods 編集委員長補佐③主な受賞歴：スガウェザリング技術振興財団科学技術賞（2026）④主な著書：有機機能材料　基礎から応用まで，講談社（2014）⑤ https://www.nims.go.jp/group/Data-driven_Polymer_Design/index.html

Copyright(c); 2026, The Chemical Society of Japan