

# マテリアルズ・インフォマティクスを駆使した 「材料開発ソリューション」

材料の開発競争がグローバルに激化し、より短期間・低コストでの材料開発が求められています。日立は膨大な材料データを分析し、開発の指針を見いだすマテリアルズ・インフォマティクス(以下、MI)を駆使した「材料開発ソリューション」を提供中。機械学習やAI<sup>\*1</sup>を活用し、材料開発における効率的な材料選定および性能検証を支援します。

※1 Artificial Intelligence

## 新材料のスピーディーな開発が課題に

素材産業にとって新材料の開発は、企業競争力の源泉といえます。近年は国際的にも開発競争が激化しており、短期間・低コストでの材料開発が、企業のみならず国を挙げた重要なテーマともなっています。

これまで材料開発は、専門家の知見・経験や理論に基づき、実験を繰り返す手法が一般的でした。しかし、ベテラン研究者の知見や分析結果を共有するための仕組みづくりが十分でないこと、期間やコストが膨むことが大きな課題となっていました。

また、高度なITを使ったデータ分析に

よって、材料開発の指針を見いだすMIが注目されていますが、その活用には膨大なデータ資産を高速に分析するシステム基盤が必要なため、手軽に取り組むことができないことも問題のひとつとなっていました。

## 日立の材料開発ソリューションで材料開発の効率化を支援

そこで日立は、2017年11月からMIを駆使した「材料開発ソリューション」の提供を開始。化学メーカーをはじめ多数の導入実績を有しています。以下に主なサービスメニューをご紹介します。

### ■材料データ分析支援サービス

日立が各種材料データを預かり<sup>\*2</sup>、機

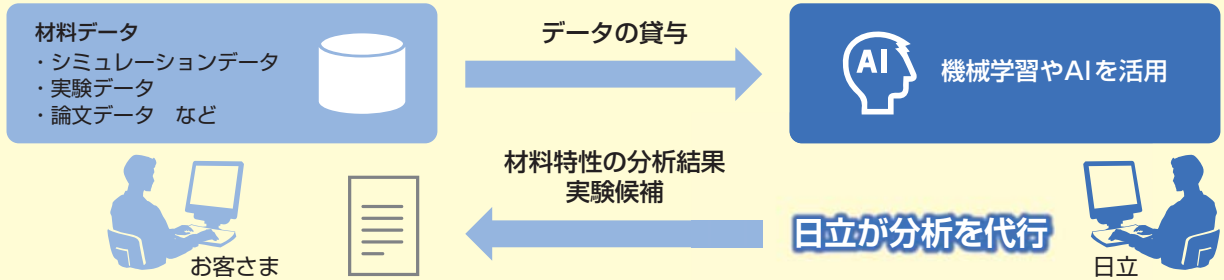
械学習やAIなどを活用してデータ分析を代行し、分析結果をレポートするサービスです。形や構造がある程度決まっている無機材料のみならず、組み合わせの自由度が高い有機材料の分析も可能です。機械学習やAIの適用では、機械学習アルゴリズムを、単純にお客さまの材料データに合わせて学習させるだけではありません。お客さまの研究開発に適した機械学習プログラムを日立が開発し、預かったシミュレーションデータや実験データ、さらに他種データも用いて多角的に材料特性を推測します。

また、期待する材料特性を実現するための条件を探索し、今後の実験候補を提示することも可能です。この実験候補をもとに、お客さまが実験をス

## 材料データ分析支援サービス

日立がお客さまの材料データを預かり、データ分析を代行して結果をレポート

- ・ 無機材料・有機材料の分析が可能
- ・ 蓄積された実験データを統計確率モデルに当てはめ、材料特性を予測
- ・ 材料特性の目標値を与え、「目標に最も近い条件」「実現値を改善する未探索条件」の候補を提示



「材料開発ソリューション」の主なサービス

スピーディーなサイクルで回すことで、よりよい実験結果の創出と試行錯誤の短期化が図れます。

さらに機械学習やAIの活用によって、従来の研究内容から視点を変えた分析を提供できるため、効果的な実験計画を立案・実行することが可能となります。

※2 日立とお客さまとの間でNDA(秘密保持契約)を締結

### ■材料データ分析環境提供サービス

お客さまが膨大なシミュレーションデータや実験データを高速に分析し、3次元表示やグラフ化するシステムを利用できるサービスです。材料データは膨大な件数・容量のため、従来は時間短縮のために平均値などの大まかな

統計量を利用した分析が一般的でした。しかし本システムは、材料データの高速処理が可能なデータベース、データ統合・分析基盤「Pentahoソフトウェア」<sup>※3</sup>、「GeoMation 地理情報システム」<sup>※4</sup>、OSS<sup>※4</sup>などの活用により、膨大なデータを迅速に処理・可視化することが可能です。

さらに材料データ分析支援サービスで開発した、お客さまの研究開発に適した機械学習プログラムを本システム上で利用できるほか、研究内容やデータ様式に合わせてシステムをカスタマイズすることも容易です。Webブラウザ上で材料特性の変化や知見を効率的に見いだすことが可能となり、分析者間の円滑な情報共有にも貢献しま

す。また、本システムはクラウド(SaaS)で利用できるためシステム導入にかかる期間とコストが削減可能です。

※3 株式会社日立ソリューションズが開発・販売する地理情報システム

※4 Open Source Software

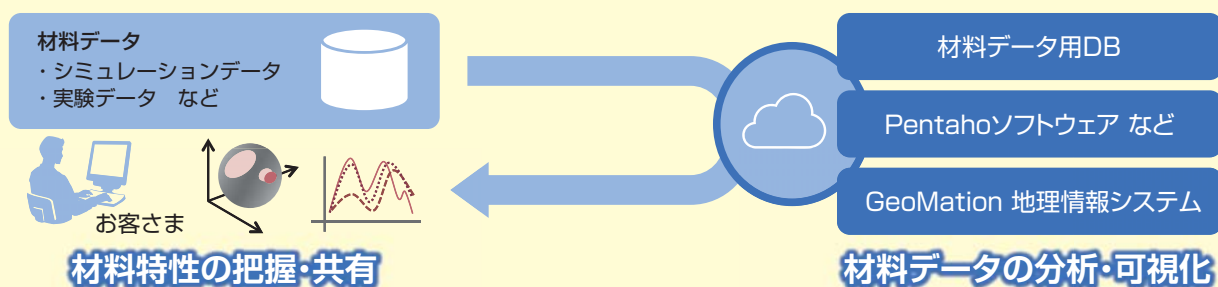
### 日本企業の競争力向上に貢献

材料開発ソリューションは、お客さまのデータから価値を見だし、イノベーションを実現する<sup>ルマダ</sup>Lumadaソリューションのひとつとして提供されます。今後も日立は、AIやビッグデータ分析などを活用したMI関連サービスを拡充・強化することで、日本企業の競争力向上に貢献していきます。

## 材料データ分析環境提供サービス

シミュレーションや実験データを3次元表示やグラフ化できるシステムをクラウド上で提供

- ・ 材料特性の変化を容易に把握。材料特性や知見を効率的に見いだすことが可能
- ・ Webブラウザから容易に分析結果を確認。お客さま内の円滑な情報共有が可能



### お問い合わせ先

(株)日立製作所 公共システム営業統括本部 カスタマ・リレーションズセンター  
<http://www.hitachi.co.jp/pchannel-inq/>

### ■ 情報提供サイト

<http://www.hitachi.co.jp/app/mi/>