

ガラス再資源化協議会 第23回総会

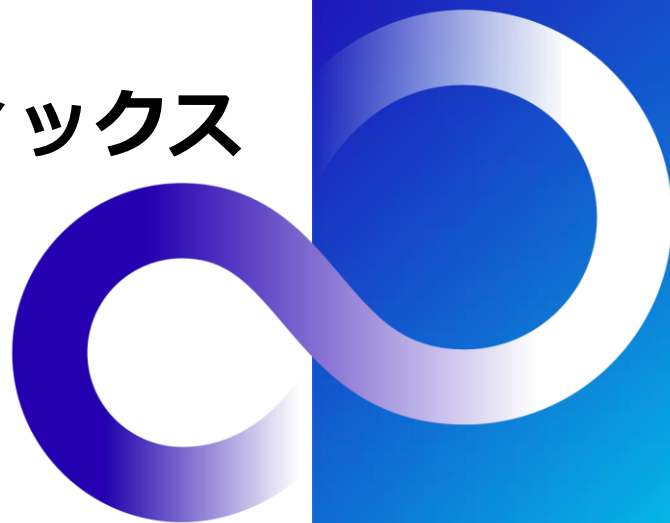
富士通が進める マテリアルズ・インフォマティクス

2022年8月10日

富士通株式会社

MI Value Design部

添田武志



○データ駆動型の材料開発

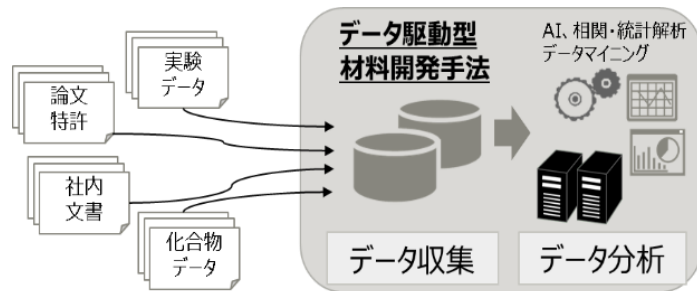
- データ分析や計算科学の力で材料開発のスピードを加速できます

試行錯誤的な材料開発
専門家の経験・勘に依存



高機能・高品質を実現するための
複雑な条件を探し出すのが難しい

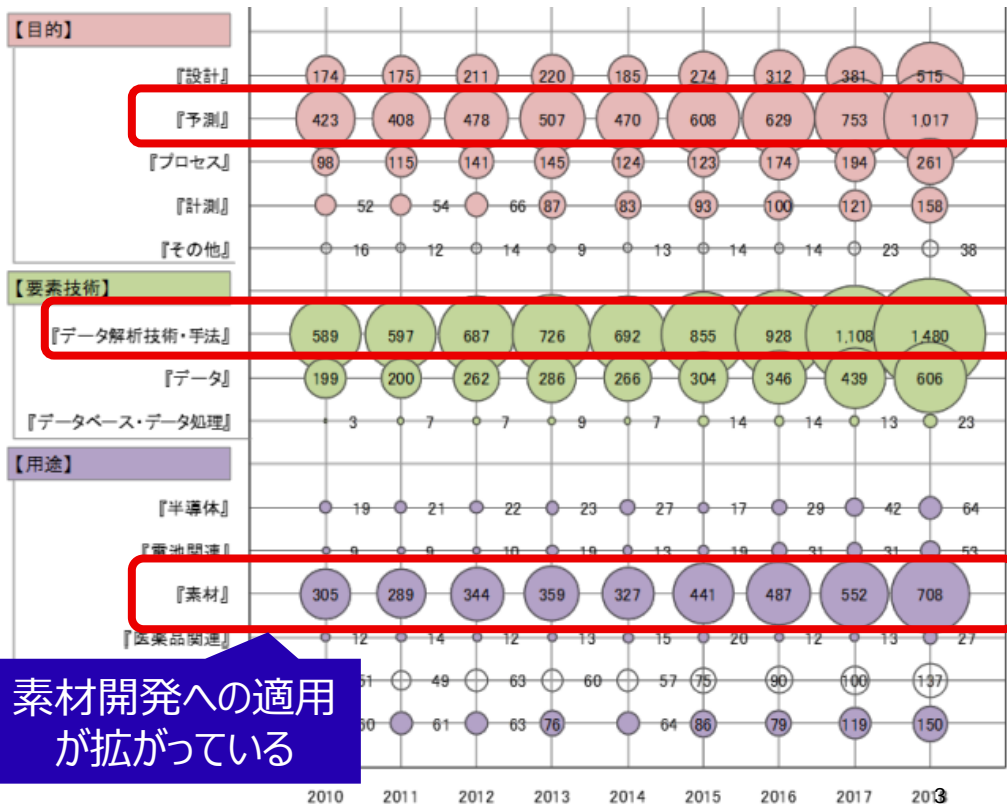
データ駆動型の材料開発
データに基づく予測や探索が可能



より良い材料を、早く見つけれられる

データに基づく材料予測の規模は年々拡大傾向

MI関連論文発表件数の推移（特許庁 2020年2月）



素材開発への適用
が広がっている

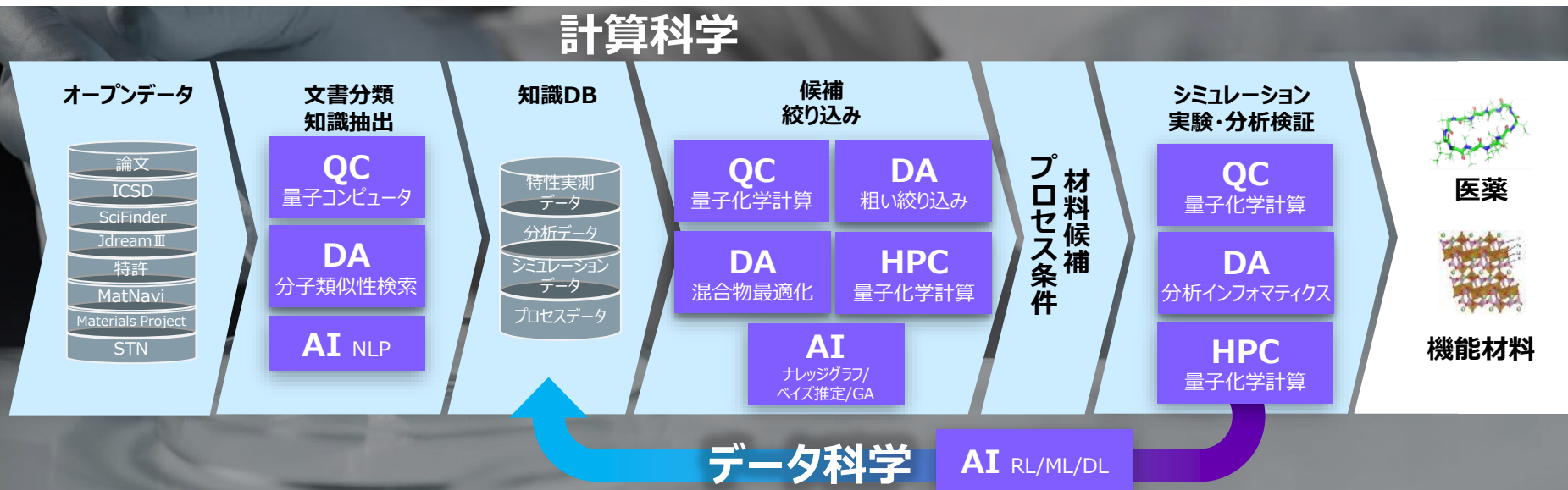
さらに...

ロボティクス＋スパコン＋AIが
材料開発を変える、
これがMIの未来だ

－日経クロステック/日経コンピュータ 2022.6.30

ロボットやスパコンでデータを増やして
素材・材料の予測に繋げる世界が
実現しつつある

- 富士通は独自の**デジタルアニーラ(最適化アーキテクチャ)**や**高性能コンピューティング(HPC)**で材料開発のアプローチを変え、社会課題解決に繋がるイノベーションをお客様と共に実現します



富士通にしかアプローチできない領域まで材料探索の可能性を広げ、研究開発を強化

デジタルアニーラ

- 量子現象に着想を得たデジタル回路で「組合せ最適化問題」を高速に解く新アーキテクチャー



量子コンピュータ (QC)

まだまだ研究段階…

- 量子状態維持が困難
- 接続と拡張に制約



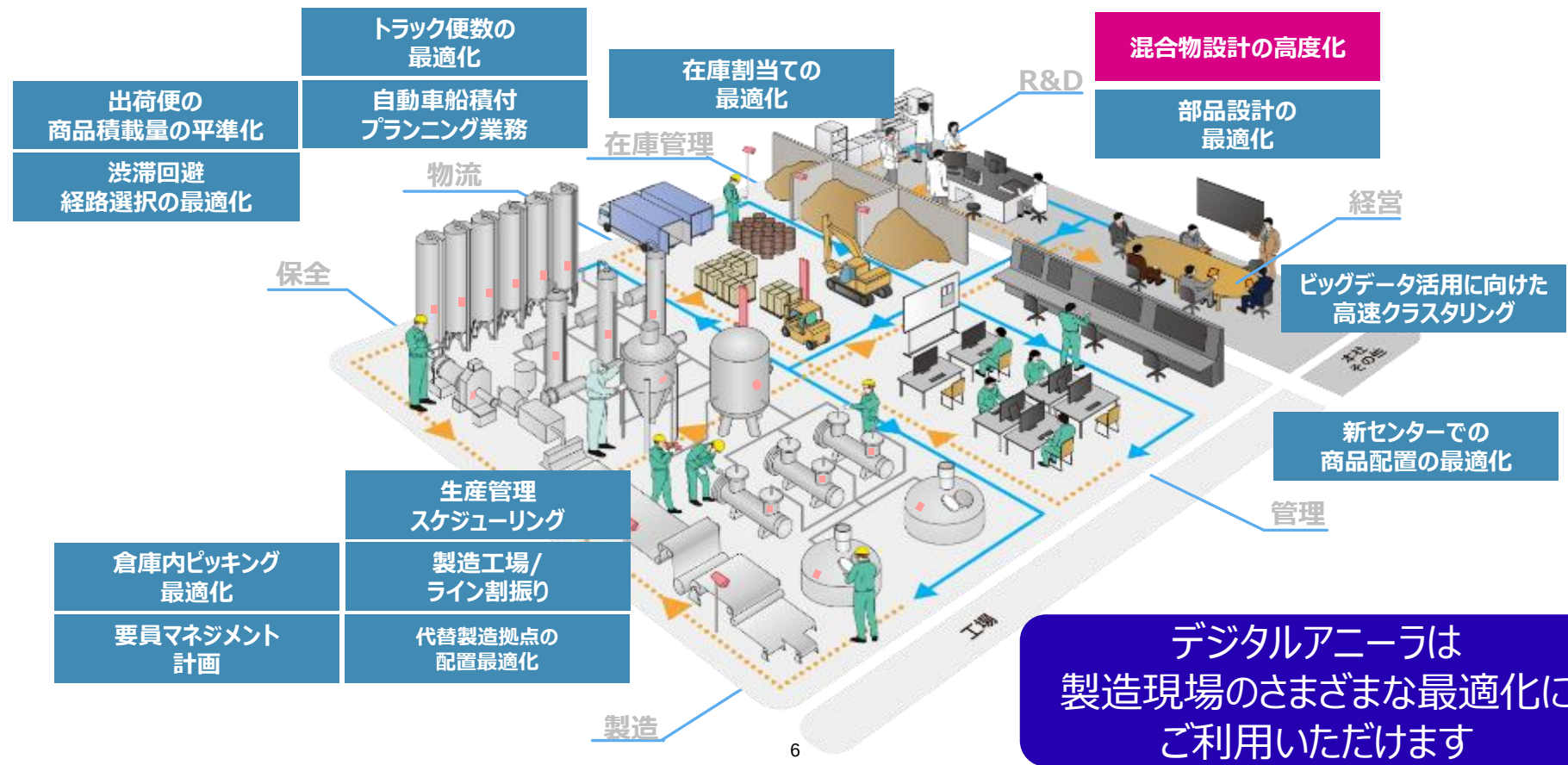
デジタルアニーラ (DA)

実問題適用が容易



- デジタル回路によって、安定動作、小型化が容易
- 全結合アーキテクチャーにより複雑な問題を簡単にマップ可能

製造業様向け デジタルアニーラ活用シーン



- 複数の要求特性に対して、最適な**混合成分・比率・製造条件**を膨大な組み合わせ候補の中から探索する必要がある

例) 100候補からの5成分混合
1%の刻みで探索すると…

約 10^{14} の組合せ！



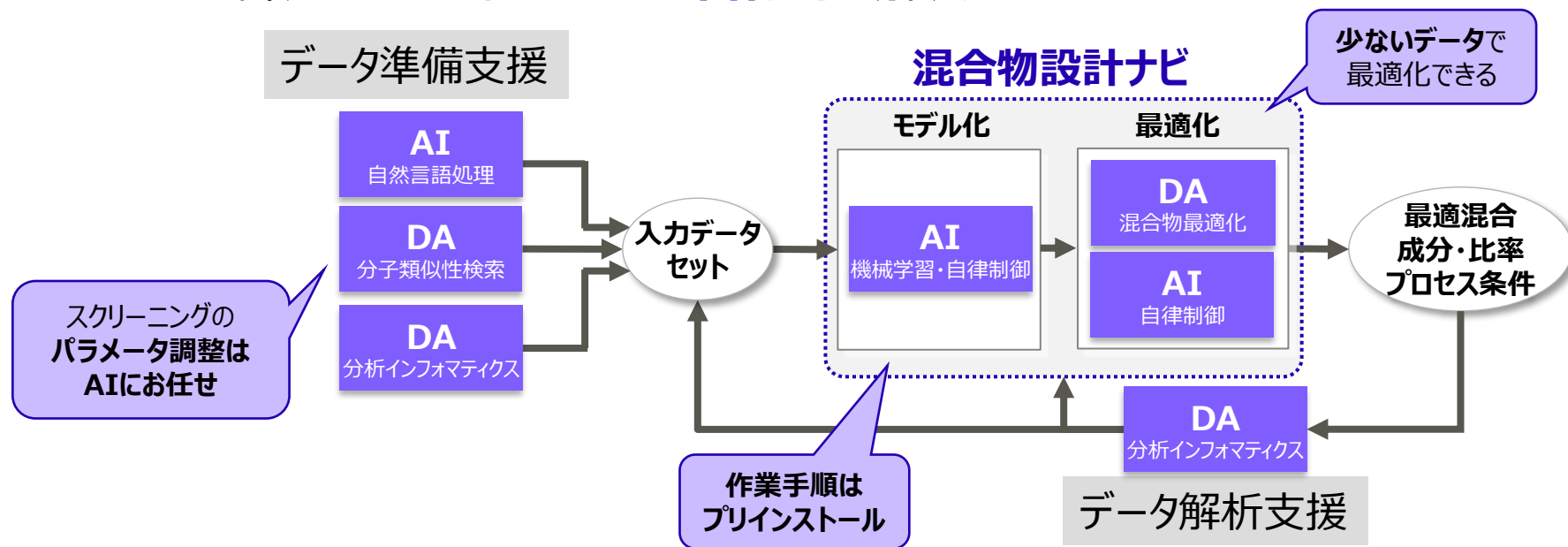
課題

- ・データが**少ない**
- ・データの**取扱**が分からない
- ・AIをどのような**場面**で使えば良いのか分からない

対象分野：**ガラス**, 潤滑剤, セラミックス, 樹脂・ゴム, 電池材料, 洗浄剤, 冷媒, …

富士通が提供する混合物設計支援サービス

- 材料開発に必要なデータの準備から、性能予測・最適化・結果解析・フィードバックまで、エンジニアの課題をデータドリブン型で**自律的に**解決します



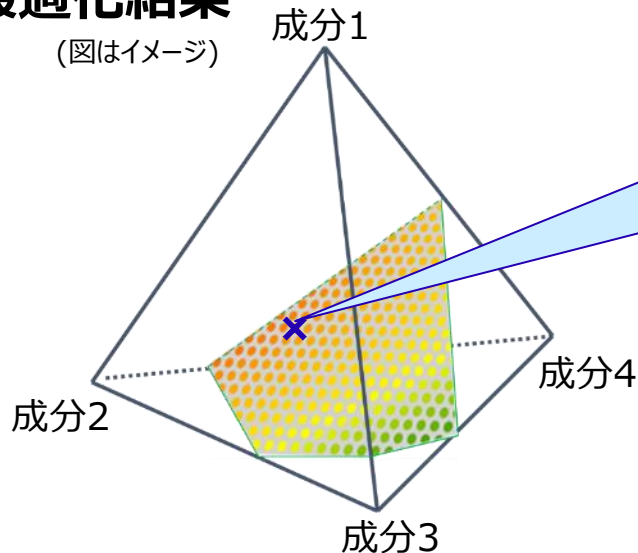
多様化した顧客ニーズ・複雑な要求特性を満たす材料条件を、効率的に探索できます

●目的：熱に強くて加工しやすい材料条件を知りたい！

- 熱膨張係数 $\Rightarrow$ 小、ガラス転移温度 $\Rightarrow$ 低（加工しやすい）
 - 材料候補： SiO_2 , B_2O_3 , Na_2O , Al_2O_3
 - 用意したデータ数(混合組成と物性値)：865個（INTERGLADデータベースより）

●最適化結果

(図はイメージ)



パイレックスガラスに近い組成が
数分で得られた！

SiO_2	B_2O_3	Na_2O	Al_2O_3	
81.6	14.7	2.6	1.1	(wt%)

複数の要求特性に対して、
膨大な組み合わせ候補の中から
最適な混合組成を探索できます

こんな問題にも適用可能です

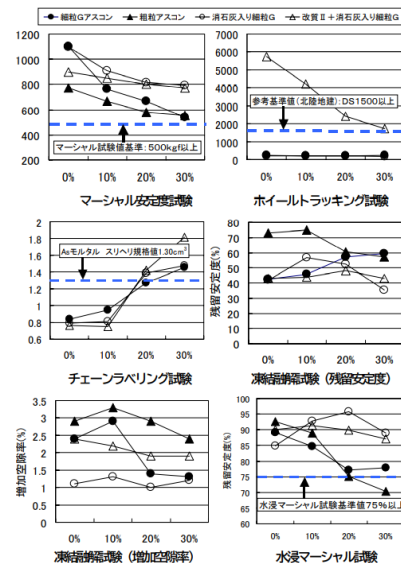
● ガラスカレット入りアスファルト混合物の設計

表-4 ガラス混合物の配合設計

	0%	10%	20%	30%
碎石6号	31.2	32.0	30.2	28.1
碎石7号	13.0	9.0	4.5	0.0
ガラスカレット7号	0.0	4.3	9.4	14.2
ガラスカレット8号	0.0	4.4	9.4	14.2
粗砂	7.0	5.0	0.9	0.0
細砂	31.8	28.6	29.1	27.3
石粉	10.7	10.5	10.4	10.2
アスファルトバインダー	6.3	6.2	6.1	6.0

出典：
北海道開発土木研究所 吉井様
土木学会第56回年次学術講演会（平成13年10月）

目的特性(目的変数)



各種材料の何をどのように混ぜれば、性能やコストが両立するかを導き出せます

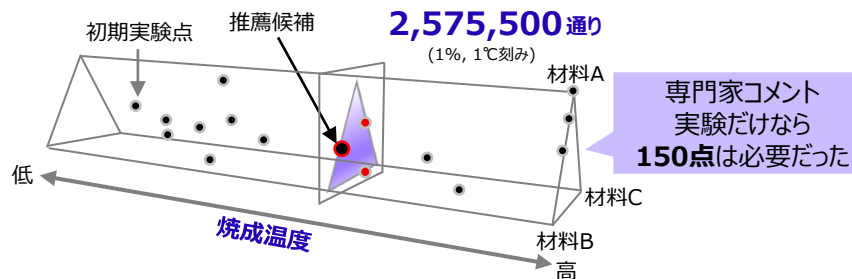
製造条件の最適化

●事例：Li電池用固体電解質の探索

●高い導電率かつ合成可能な組成 & 焼成温度を発見

実証済み、論文化予定
関連特許出願済み

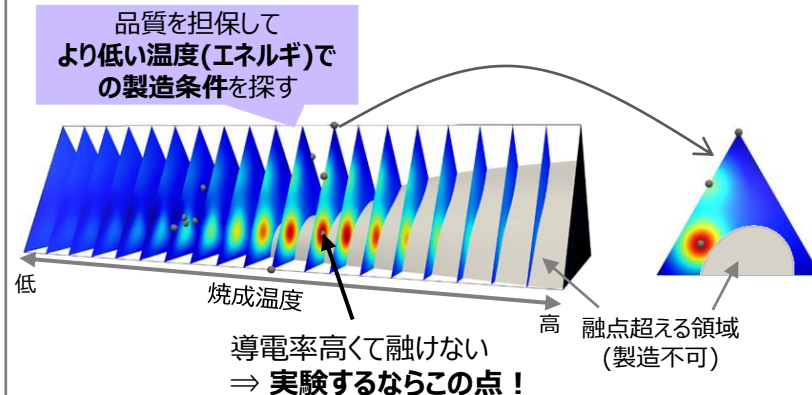
ポイント① 膨大な探索空間から効率的に探索



1回のナビゲーション (初期実験：25点、1回の推薦：6点)で
従来の**約3倍の導電率**となる**製造条件**を発見

実験回数：約1/5

ポイント② 確度の高い推薦点と同一のプロセス条件で複数推薦

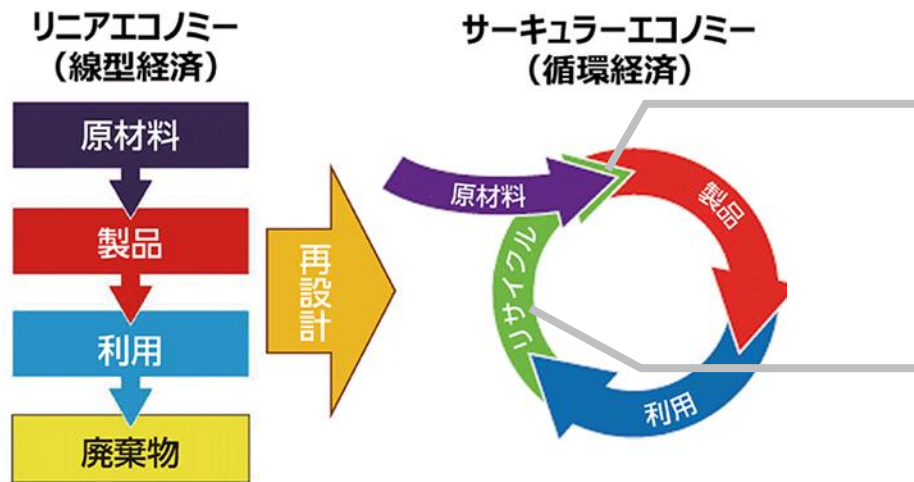


トータル実験時間：約44%減

※同時に3サンプル焼成できる装置の場合

ガラス製造や回収物の分別で、品質を担保しつつ、処理エネルギーを最小化できます

- サーキュラエコノミでキモとなる**再利用に向けた最適設計**と**リサイクル品の材料同定**をMIでご支援します

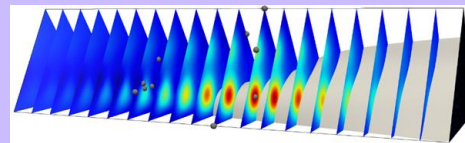


資料：オランダ「A Circular Economy in the Netherlands by 2050 -Government-wide Program for a Circul

出典：環境白書(R3年版)

■ 混合物設計ナビ

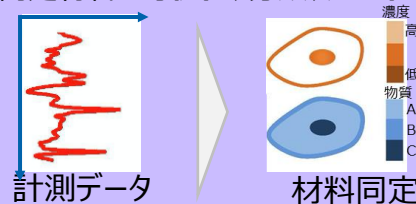
- ・高性能と低コストの両立（最適設計）
- ・品質を担保したエネルギー最適化



再利用に向けた最適設計

■ 分析インフォマティクス

- ・検量線レスの材料同定
- ・同定材料の可視化、分類、定量化



材料同定の高度化

Sustainable Manufacturing



人と地球が共存するマニファクチャリング
－ 持続可能な成長を支える

富士通は、自らが**DX企業として実践してきた業務知識**、長年マニファクチャリング業界の皆様を支えてきた**ICTベンダとしてのノウハウ**、そしてAIやHPC(*)などの**デジタルテクノロジー**を活用してサプライチェーン全体をつなげ、ボーダーレスで多様な世界において、**人と地球の共存を実現します**。

*High Performance Computing

富士通のMIで、ガラス再資源化のご支援ができれば幸いです

Thank you

