

第22回エコプレミアムクラブ シンポジウム “GX4/MI”

最先端コンピューティング×AIと
マテリアルズ・インフォマティクスが
拓くサーキュラーエコノミー

2025年8月6日

富士通株式会社

知インダストリーソリューション事業本部

Digital Shifts事業部

溝渕真名武（みぞぶち まなぶ）

溝渕真名武（みぞぶちまなぶ）



富士通株式会社
加インダストリーソリューション事業本部
Digital Shifts事業部

プロフィール

- 富士通グループに入社後、主に研究開発領域（創薬、臨床開発業務）のシステム・パッケージ開発やコンサルティング業務などを約15年にわたってけん引。
- その後DXコンサルティング部門に異動後、スマートホスピタルなどの企画に従事。
- さらに、入社以来培った研究開発領域の豊富な経験をもとに材料領域のマテリアルズ・インフォマティクスのプロダクトマネージャーを担当。2023年4月よりFujitsu Uvanceに参画。
- ナレッジマネジメントの大家である野中郁次郎先生から「実践知リーダー」としての薫陶を受け、環境課題解決につながる研究開発向けソリューションのあり方を考え実践を続けている。

2050年カーボンニュートラルを目指して

再生エネルギーの旗手である「太陽光パネル」の2030年リサイクル問題をどう乗り越えるか



カーボンニュートラル実現へ

アップサイクルによる資源循環加速

サーキュラーエコノミー
取り組み開始

START

Team formation

R7.6.4統合イノベーション戦略推進会議

● 取り巻く課題と国家戦略

課題

資源制約と地政学リスク
(経済安全保障)

気候変動問題
(GX: グリーントランス
フォーメーション)

廃棄物問題と環境汚染

国際的な環境規制の強化

マテリアル革新力強化戦略 概要 (R7.6 統合イノベーション戦略推進会議 決定)

我が国の強みである多様なプレーヤーが役割を明確化しつつ総力を結集し、「知」を受け渡して継続的なイノベーションを創出する好循環「知のバリューチェーン」を構築する。これにより、我が国の基幹産業であり、半導体や量子等幅広い分野のイノベーションを先導するマテリアル分野において、我が国が勝ち続ける。

どこで勝つのか

重点分野を特定した研究開発の加速

新産業・新学術領域の創出、人材育成

短期・中期(重点的に取り組む分野)

- 我が国が現に技術優位性を有する高機能・高付加価値マテリアル
- サーキュラーエコノミーの実現を通じた資源確保、サプライチェーン強靱化の基となるマテリアル
- GX実現に向けたグリーン・エネルギー関連マテリアル
- 経済安全保障上重要なマテリアル
- 高度な材料設計、評価・分析を組み合わせた、革新的なモノづくり技術

中期・長期(フロンティアへの挑戦)

- 価値のフロンティア
社会課題起点のバックキャストと技術起点のフォアキャストから特定される新たな領域への挑戦
- サイエンス・技術のフロンティア
現在のマテリアルの性能・機能の限界への挑戦

どうやって 勝ち続けるのか

我が国の強み(優れた技術力・多様なプレーヤー)を結び付け、優れた知や技術力をイノベーションに繋げる「知のバリューチェーン」を構築する。「知」をバリューに転換する高い技術力等の価値の「見える化」と、バリューチェーンの起点となる「卓越したサイエンス」が重要

取り組むべきアクション

革新的マテリアルの研究開発・社会実装

- 重点的に取り組む分野の研究開発推進
- フロンティアへの挑戦による新たな価値の創出

等

マテリアル・イノベーションの加速

- 我が国の強みであるデータ基盤の活用を軸とした「マテリアルDX」の更なる推進
- 多様なプレーヤーの連携の強化

等

マテリアル・イノベーションの継続的な創出

- 研究者・研究開発マネジメント・エンジニアリング人材の育成
- 卓越したサイエンスの創出
- 魅力的な研究環境の整備、国際プレゼンスの強化

等

赤枠：演者が追記

3/ 20

<https://www8.cao.go.jp/cstp/tougosenryaku/kaigi.html>

より概要版を引用

© 2025 Fujitsu Limited

マテリアルズ・インフォマティクス (MI)

- 第4の科学といわれる「データ科学」を用いた「マテリアルズ・インフォマティクス」

従来型開発

研究者の経験と
勘に頼る

膨大な数と期間で
試行錯誤

マテリアルズ・インフォマティクス (MI)



出典:「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と応用」(2019年) p.3 技術情報協会



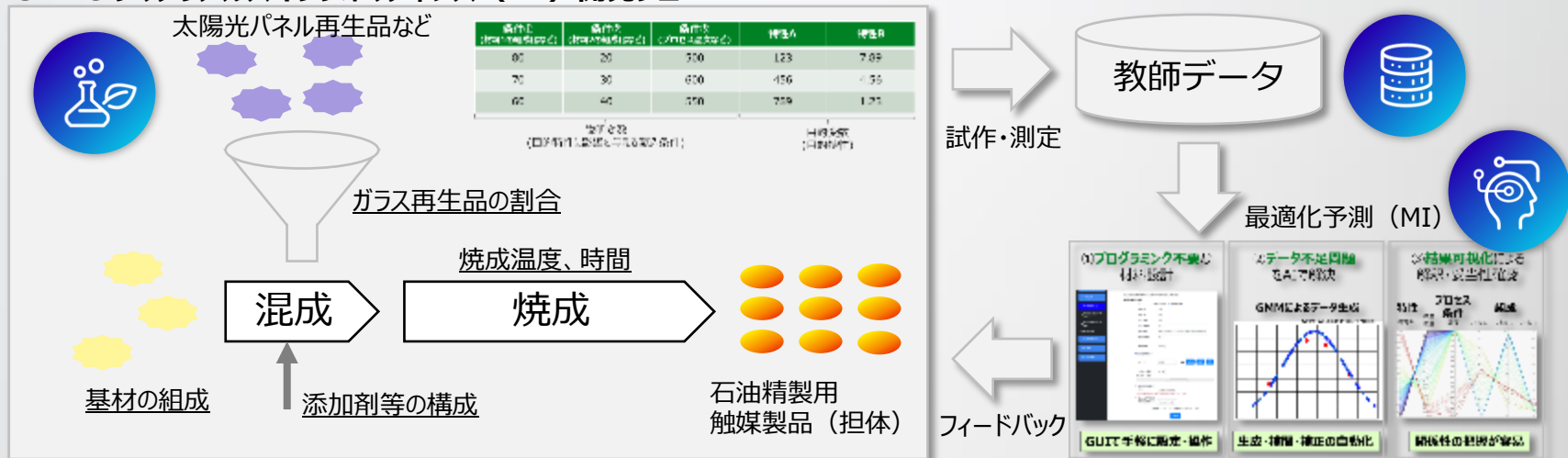
開発短縮とコスト削減・新たな発見の促進 (逆解析)

サーキュラーエコノミーとMI事例

【事例①】 GRCJにおけるアップサイクル

- 再生ガラスの「アップサイクル」開発を実施中
- 石油精製向け触媒の開発“GMRC”(Glass Material Recycle for Catalyst)プロジェクト
- MIの適用による開発の加速・製品の大幅な価値アップを目指す
- 試行錯誤・ノウハウベースからデータ駆動型へのシフトチェンジに向けた課題あり

GMRCのマテリアルズインフォマティクス (MI) 開発フロー



開発のスピードアップ・価値向上

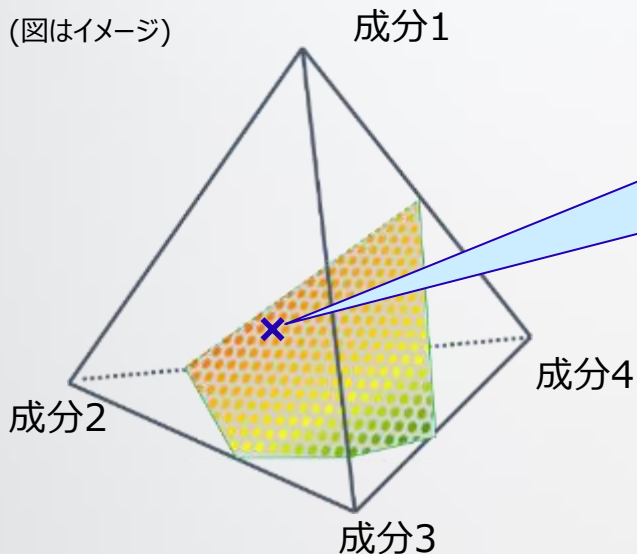
【MI事例】混合ガラスの組成探索

目的：熱膨張係数 $\Rightarrow$ 小、ガラス転移温度 $\Rightarrow$ 低（加工しやすい）

- 説明変数(4成分系)： SiO_2 , B_2O_3 , Na_2O , Al_2O_3
- 入力データ数(混合組成と物性値)：865個（INTERGLAD）

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る

【MI事例】電池事例

試作回数を減らすプロセス条件の探索

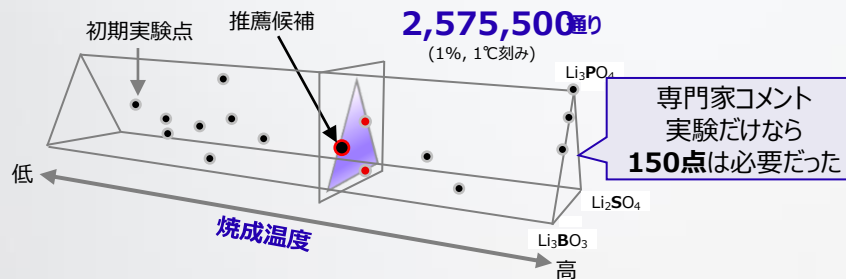
○高い導電率かつ合成可能な組成 & 焼成温度を発見

ChemRxiv論文：

<https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-1whvw>

※東海大学様との共同研究

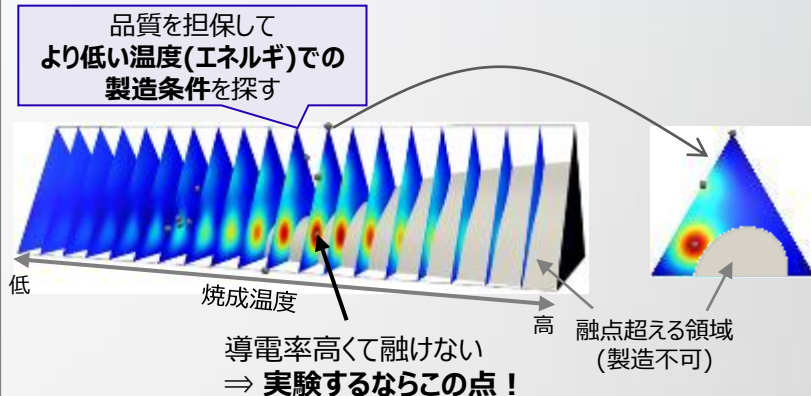
ポイント① 膨大な探索空間から効率的に探索



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

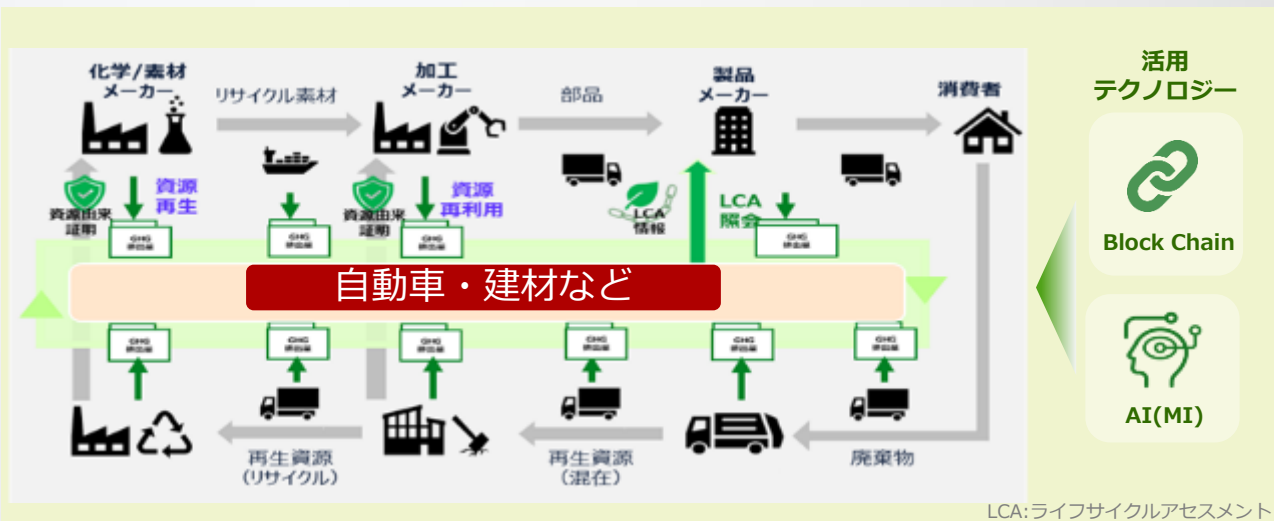
※同時に3サンプル焼成できる装置の場合

量産品質を担保するプロセス条件、製造エネルギーを抑えたプロセス条件を探索できます

【事例②】 リサイクル設計と価値の高度化

- より環境価値が高い製品の市場投下と循環型経済への移行
 - 長寿命化設計: 材料の劣化メカニズムをシミュレーションし、耐久性の高い材料を開発。
 - 解体容易性設計 (Design for Disassembly): 解体しやすい構造や、リサイクル時に分離しやすい異種材料の組み合わせを予測・設計。
 - LCAの統合: ライフサイクルアセスメントのデータを設計段階に組み込み、環境負荷をトータルで最小化する設計を探索。

概念 イメージ図



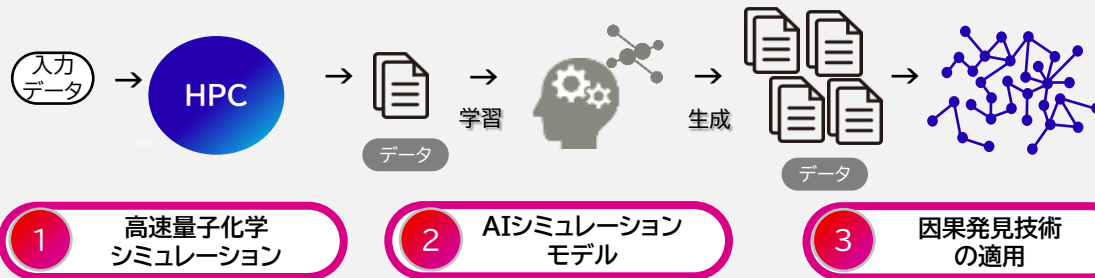
Fujitsu Track and Trust 代表的な適用領域



【事例③】 希少資源の代替・削減

- ゼロエミッション材料探索
 - 次世代アンモニア合成触媒の探索
 - アイスランドのベンチャー企業 「Atmonia社」と共同研究

探索空間を数千倍に拡大



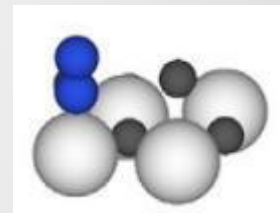
材料探索プラットフォーム

コンピューティングとAIを融合

酸化モリブデン(MoO_2)の一部をタングステン(W)で置換した
新たな触媒材料の有力候補を発見 (2023.10.3)

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2023/10/3.html>

<https://www.fujitsu.com/jp/about/research/technology/ai/fujitsu-ai-platform/>



触媒構造の例

最先端コンピューティング×AIによる マテリアルズ・インフォマティクス

AIとコンピューティングの融合で革新をもたらす

富士通は、AIとコンピューティング技術を強化するとともに、この2つの技術を融合する研究開発を推進

- **特化型AIエージェント** | 製造や物流など様々な業務における複雑な課題に対応する特化型AIエージェントを開発
- **マルチAIエージェント技術** | AIエージェント同士が互いに学習し、技術やタスクを分業する技術などの研究開発を強化
- **Computing Workload Broker** | GPU と CPU の利用効率を高める AI コンピューティング ブローカーなどコンピューティングリソースを最適化する技術を開発
- **AIコンピューティング** | AIとコンピューティングを融合し、10万を超える原子から構成される素材の反応メカニズムのシミュレーションなど、より高度なシミュレーションを可能にする技術を開発
- **量子コンピューティング** | 量子デバイスからアプリまでの全領域で世界トップクラスの研究機関や企業と協調し、イノベーションに貢献



量子コンピューティング

理研RQC-富士通連携センターにて開発された、世界最大級となる256-qubitの量子コンピュータを発表

AIエージェントと取り組む素材開発

- Leeは、カーボンニュートラルなバイオマス素材¹をテーマに掲げ、合成繊維と比較して課題であった耐久性・耐熱性の強化に向け、新たな素材開発に挑戦
- AIエージェント「Nova」は、新素材開発の課題を分析し、新たな製法に関する方向性を提案
- Novaは評価指標を検討、環境性能・耐久性向上に伴うコストインパクトを試算するマトリクスを作成
- LeeとNovaは、このマトリクスをベースに新素材の候補と製法を評価
- LeeとNovaはプロジェクトを通じて互いに成長

1) バイオマス素材：植物などの再生可能な有機資源を原料とする素材

Lee

バイオマテリアル社で新素材開発プロジェクトを推進する研究開発部門のチームリーダー

デモ動画

Options

Temperature:

0.10

0.00

2.00

Clear Latest Conversation

Clear All Conversations

Copy conversation history



[Download conversation history](#)



MetricRecommender

設定

対象とする化合物を入力してください。

Target compound is

実現したい特性・品質の状態を入力してください。

Characteristics/Qualities to be improved/achieved are

対象となる業界や製品があれば入力してください(任意)。

Target industries/products are

Execute

Deploy



FUJITSU

MI Tools Agent

Model:

- ☐ GPT-3.5 turbo
☒ GPT-4

Available tools: 10

Tool	Description
☒ arxiv	A wrapper around Ar
☒ python_repl	A Python shell. Use t
☒ Name2SMILES	Input a molecule nar
☒ Mol2CAS	Input molecule (nam
☒ PatentCheck	Input SMILES, return
☒ MolSimilarity	Input two molecule S
☒ SMILES2Weight	Input SMILES, return
☒ FunctionalGroups	Input SMILES, return

Select tools:

arxiv x

Name2SMILES x

Mol2CAS x

PatentCheck x

MolSimilarity x

SMILES2Weight x

FunctionalGroups x

ControlChemCh... x

SafetySummary x

Your message

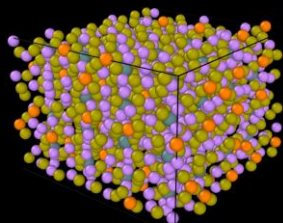


シミュレーションを活用した材料開発プロセス

シミュレーション

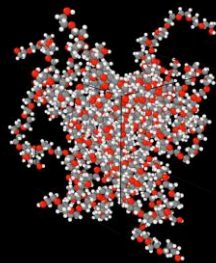
ターゲット材料の化学反応をシミュレート

無機 固体電解質材料 (LGPS) 有機 ポリエチレングリコール 有機 ナフィオン

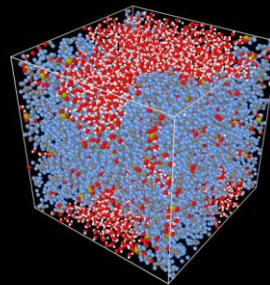


業界

自動車・電池・重工・金属



半導体材料・インク・製薬・化粧品



プラスチック・繊維・樹脂・フィルム

メカニズム解析・施策立案

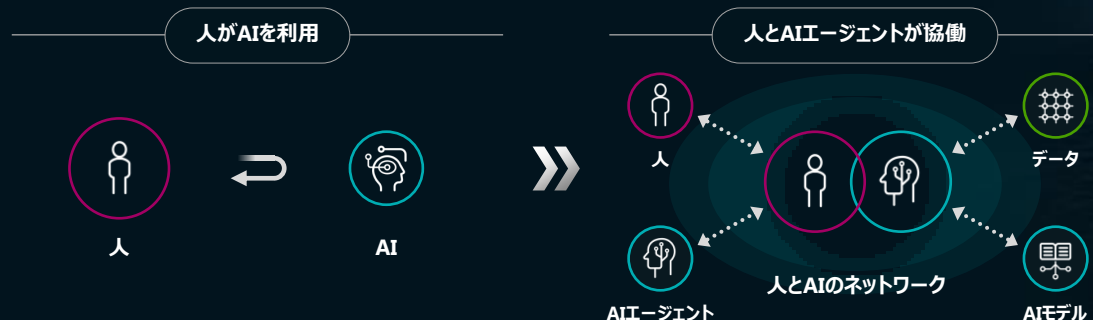
反応メカニズムを特定し 施策立案

特性UP!



人の可能性を解き放つ

- AIEージェントは、人が決めた目標や裁量の範囲内で自律的に行動し、人を定型的な業務から解放
- AIEージェントは多様な知見を持つ人や様々なデータ、AIモデル、さらに他のAIEージェントがつながるネットワークを形成
- このような人とAIのネットワークを基盤に、人は自身の可能性を解き放ち、創造性を発揮しながらイノベーションに挑戦



富士通の目指すSX サステナビリティ・トランスフォーメーション



富士通は、企業・社会の事業継続におけるリスクの最小化と
お客様が取り組むサステナブルな社会の実現に向けた事業創出に貢献します

Thank you

