

一般社団法人ガラス再資源化協議会  
御中

# 日本セラミックス協会 第37回秋季シンポジウム 向け講演資料

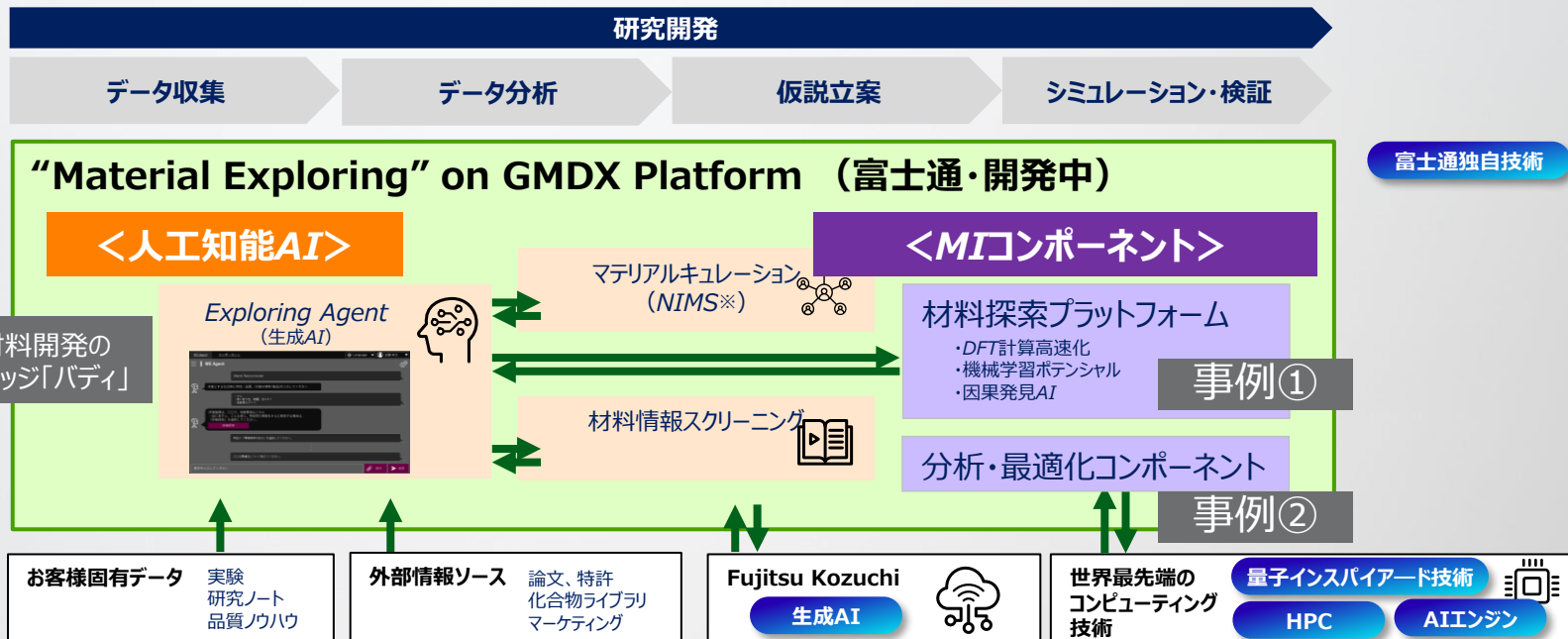
2024年9月1日

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  
Sustainable Transformation事業部

FUJITSU

# マテリアルズ・インフォマティクス (MI)

- 生成AIと研究者の自然な対話により、幅広いデータ・知見の取得と研究方針を立案
- 世界最先端コンピューティング技術を用いたシミュレーションやAIを連動させる
- 材料研究が飛躍的に高速化・高度化され、MIが革新的材料創出を支援する時代に



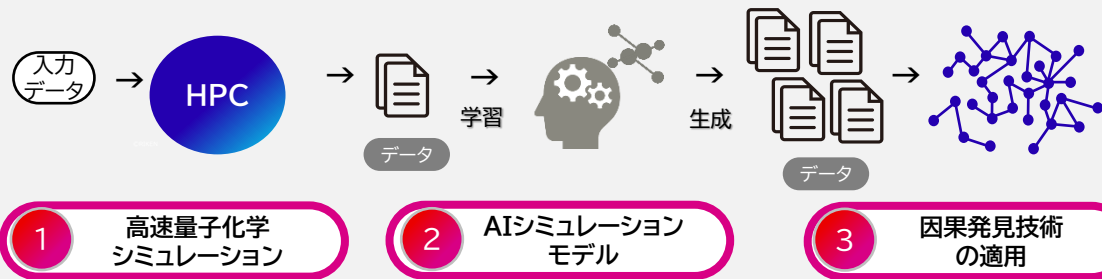
※NIMS = 国立研究開発法人物質・材料研究機構  
(マテリアルキュレーションはNIMSの特許・商標、システムは富士通と共同開発)

# マテリアルズ・インフォマティクス 事例①

## ゼロエミッション材料（触媒インフォマティクス）

次世代アンモニア合成方法の開発を行う、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



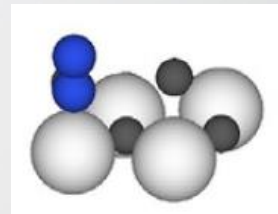
材料探索プラットフォーム

コンピューティングとAIを融合

酸化モリブデン( $\text{MoO}_2$ )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

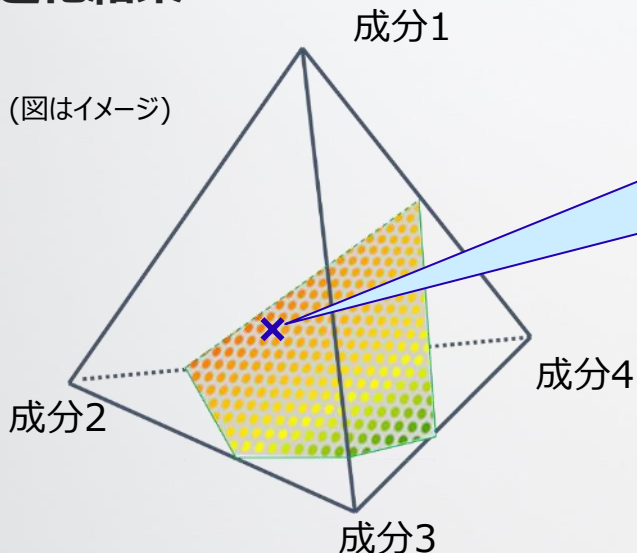
# マテリアルズ・インフォマティクス 事例②

## 混合ガラスの組成探索・最適化

**目的：熱膨張係数 ⇒ 小、ガラス転移温度 ⇒ 低（加工しやすい）**

- 説明変数(4成分系)： $\text{SiO}_2$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$
- 入力データ数(混合組成と物性値)：865個 (INTERGLAD)

### 最適化結果



**パイレックスガラスに近い組成が  
数分で得られた！**

| $\text{SiO}_2$ | $\text{B}_2\text{O}_3$ | $\text{Na}_2\text{O}$ | $\text{Al}_2\text{O}_3$ |       |
|----------------|------------------------|-----------------------|-------------------------|-------|
| 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**

**Thank you**

