

一般社団法人ガラス再資源化協議会
第25回総会 発表資料

富士通 マテリアルズ インフォマティクス ご紹介

2024年8月8日

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

Sustainable Transformation事業部

溝渕真名武（みぞぶち まなぶ）

グリーン成長実現のためのアプローチ

- 再生型企业への変革と、信頼できるエコシステムでGXのユースケースを共創・発信

GXのユースケース



気候変動
ESG投資



サーキュラー
エコノミー



需要と供給の
バランス最適化



サプライチェーン
輸送最適化



グリーンエネルギーの
トラッキング

再生型企业への変革



再生型価値の流通



地球環境問題の解決に向けて、グリーン素材開発のニーズに貢献する

カーボンニュートラル・サーキュラーエコシステム実現

生物多様性の回復

カーボンニュートラル
移行支援

脱炭素交通
の実現

グリーン素材開発

環境負荷の軽減

循環型ビジネスへの
移行



触媒改良
水素・アンモニア・eFuel



次世代電池
全固体電池/半導体



生分解性材料

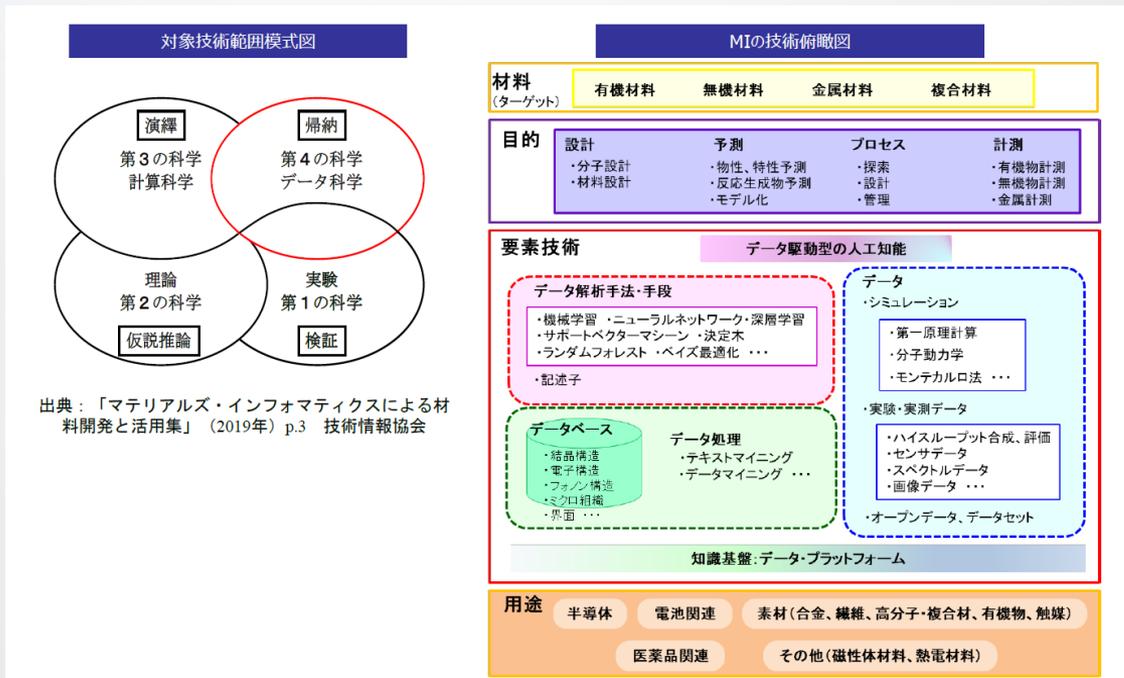


低炭素材料

マテリアルズ・インフォマティクス (MI)

デジタルデータを駆使したデータ駆動型研究開発が世界的に進展

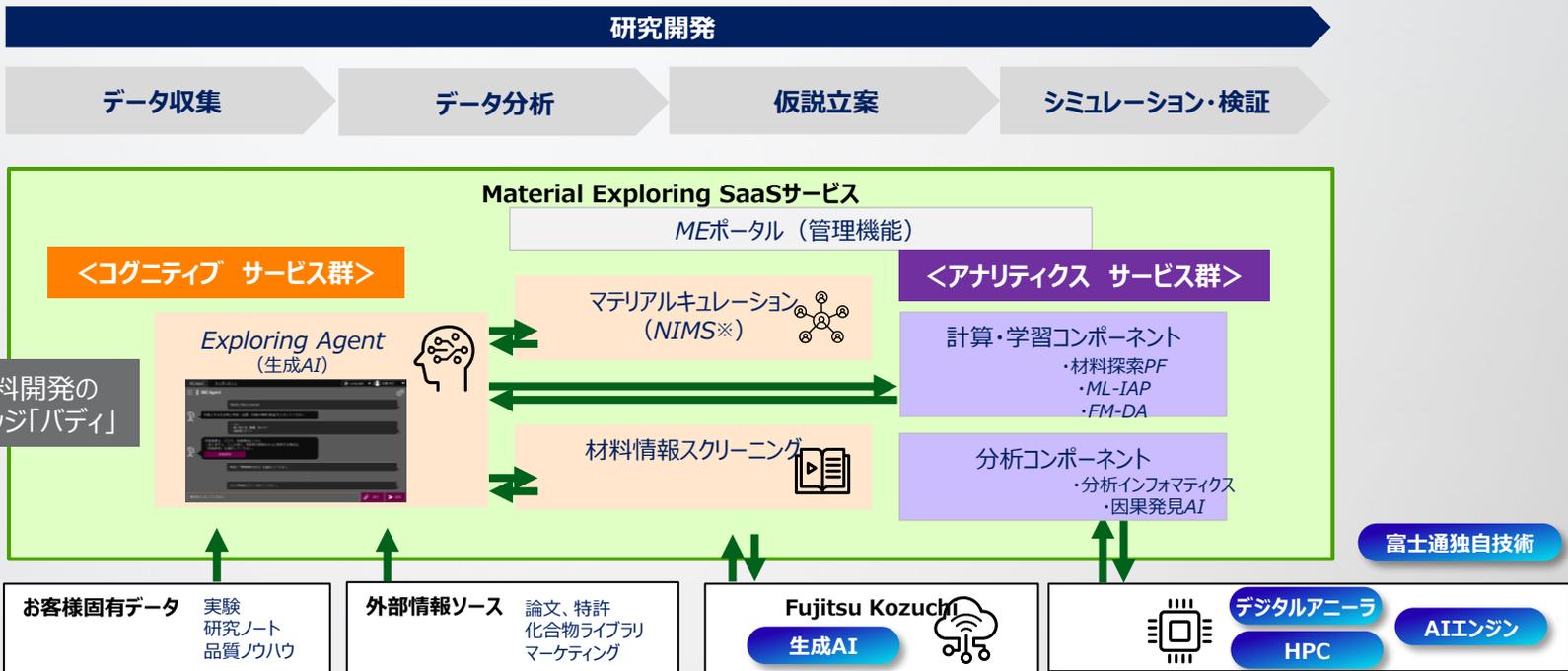
- 実験至上主義的な方法では開発スピードが追い付かない
- 第4の科学といわれる「データ科学」を用いた「マテリアルズ・インフォマティクス」



【資料】
「令和元年度 特許出願技術動向調査等の調査結果」より
特許庁 令和2年4月

人とAIのコラボレーション

自然な対話を通じた研究方針の立案やシミュレーションによる検証
高度な材料研究の専門知識を民主化



※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)

デモ動画（生成AIの例）

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。

デモのみ

Execute

5/11

Made with Streamlit

デモ動画（マテリアルキュレーション）

FUJITSU



Path search: From _____ Contain _____ To _____ Shortest Path + 0 _____ ステージエリ

Network: Keyword _____ Depth 1 _____



デモのみ

Fujitsu
UVance

※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)

生成AIから探索シミュレーションへ連携

The image displays three sequential screenshots of a web application interface, numbered 1, 2, and 3, illustrating a workflow for generating and downloading simulation data.

1 The first screenshot shows a chat interface where a user has entered a prompt. The interface displays instructions for creating a structure and a list of generated materials project names.

2 The second screenshot shows the details of a generated structure. It includes a name, a prompt, a description, and a table of structure data details. The table lists various parameters such as Materials Project ID, chemical formula, and atomic weights.

3 The third screenshot shows the same structure details but with a 'ダウンロード' (Download) button visible. Below the structure visualization, there is a 'ダウンロード' section with multiple dropdown menus and buttons for downloading the structure data in various formats (e.g., json, jsonl, jsonlines, csv).

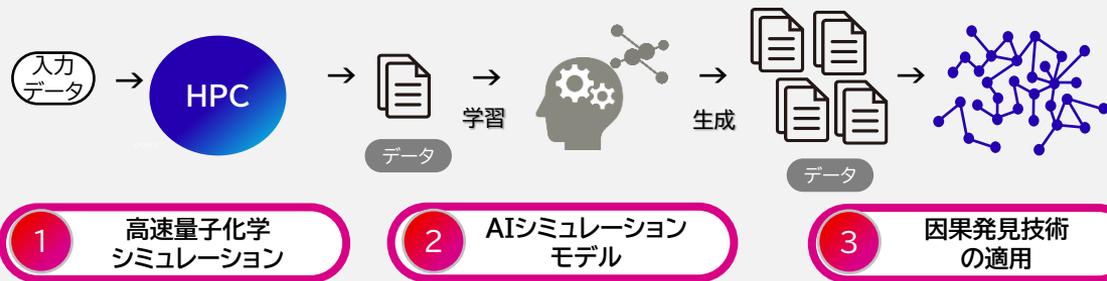
① チャット形式で入力データの構造作成の指示を行う
② Materials Projectから検索し、構造データを生成
③ 任意のファイル形式でDL
(※) データベースクエリ/コードはマテリアルズプロジェクト×ASE (パイソンライブラリ)

AIとデータによる再生型価値の創出

ゼロエミッション材料探索

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



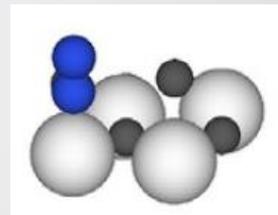
材料探索プラットフォーム

コンピューティングとAIを融合

酸化モリブデン(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

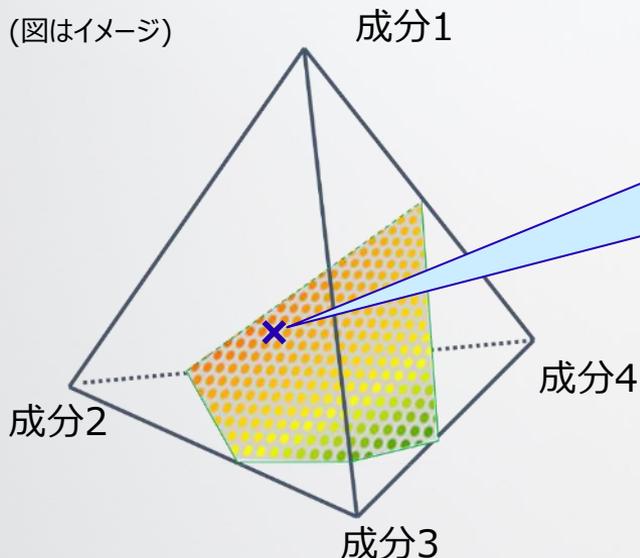
【MI事例】混合ガラスの組成探索

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)：SiO₂, B₂O₃, Na₂O, Al₂O₃
- 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 ₂ O ₃	Na ₂ O	Al ₂ O ₃	(wt%)
81.6	14.7	2.6	1.1	

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

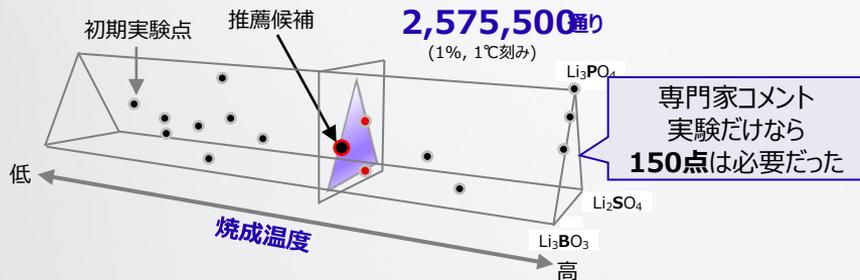
○高い導電率かつ合成可能な組成 & 焼成温度を発見

ChemRxiv論文：

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

※東海大学様との共同研究

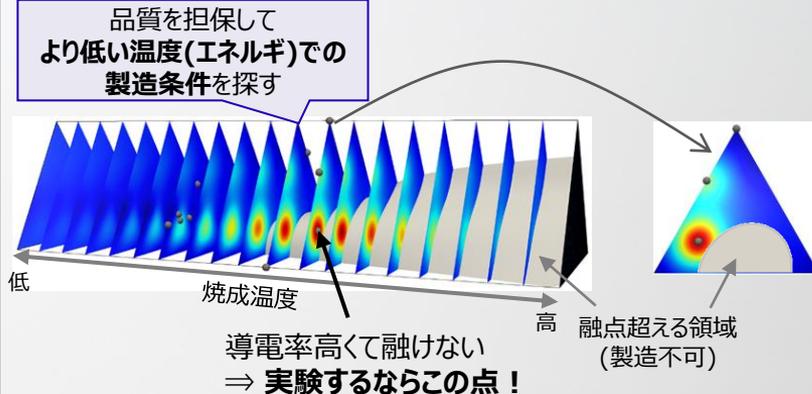
ポイント① 膨大な探索空間から効率的に探索



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



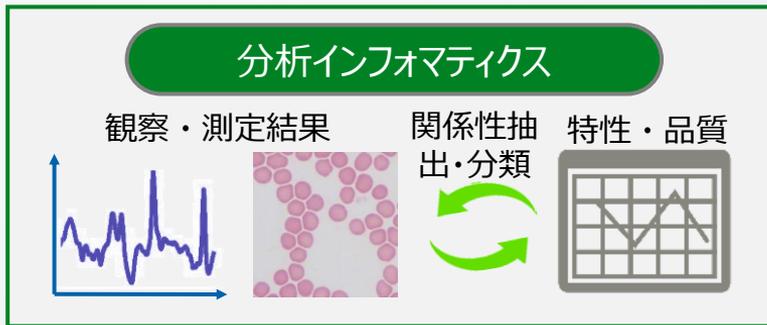
トータル実験時間：約44%減

※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

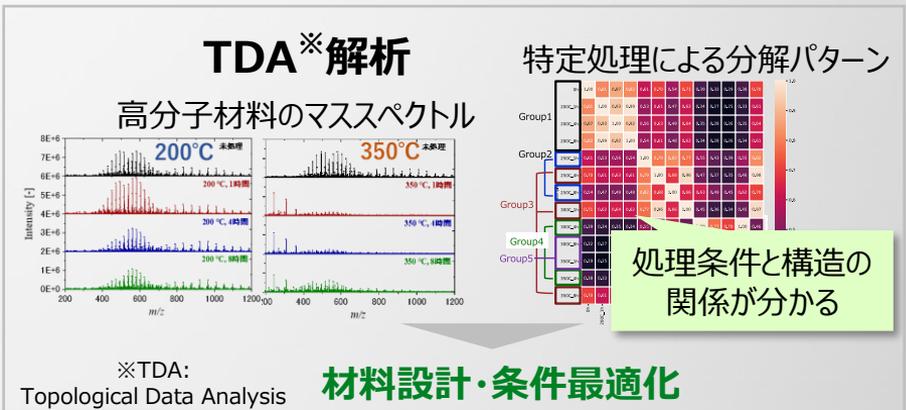
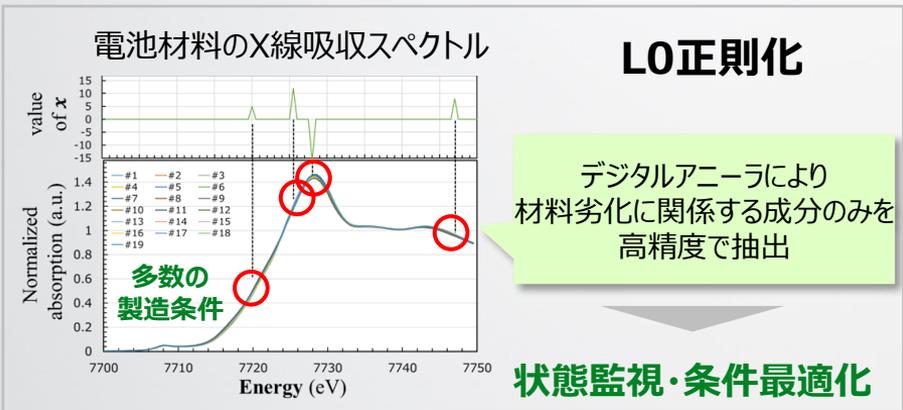
分析インフォマティクスによる影響因子の特定

特性や品質のわずかな違いを、計測結果（画像・スペクトル）から読み取り、設計やプロセス改善につながる指針を得る



特許出願済

特許出願済



サンビーム年報・成果集 vol.11 2021

https://sunbeam.spring8.or.jp/top/seika/annual_report/vol11/vol11_2021.pdf (p.31)

横浜国立大学(藤井麻樹子准教授)との共同研究成果。日本分析化学会第70年会(2021.09.22-24)で発表。

Thank you

