

新たな打ち手「環境新材料探索PF」

短時間で大量の結果から
高精度な材料候補を発見

イシュー・解決策・効果



- ・専門家の勘や経験を頼りに実験で材料設計と評価を繰り返すため、開発期間が長くなり、コスト高
- ・革新的材料を探索するためには、広大な探索空間に範囲を広げるため、材料シミュレーションに膨大な計算コスト要



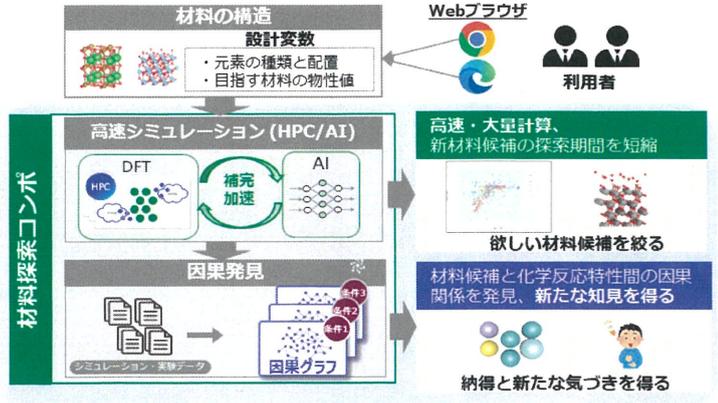
- ①膨大な計算を可能とするコンピューティング技術
- ②人が思いつかない目的に合った材料性質傾向を発見するAI技術



- ①原子分子レベルの量子化学計算を高精度化、探索効率化
- ②現状スパコンで1ヶ月かかる計算を数日～数時間で実現
- ③材料候補と化学反応特性間の因果関係を分析、納得と新たな知見を得ることができる

探索イメージ

■コンピューティング技術と、人が思いつかない目的に合った材料の性質の傾向を発見するAI技術により、新材料を探索



参考：ガラスリサイクルに向けた検討



- ✓ 大規模コンピューティングによる材料組成のシミュレーション
- ✓ 例えば、混合ガラスの最適な組成を探索

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

事例：混合ガラスの組成探索

●目的：熱に強く加工しやすい材料条件を知りたい！

- 熱膨張係数 ⇒ 小、ガラス転移温度 ⇒ 低 (加工しやすい)
- 材料候補：SiO₂, B₂O₃, Na₂O, Al₂O₃
- 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)

バイレックスガラスに近い組成が数分で得られた！

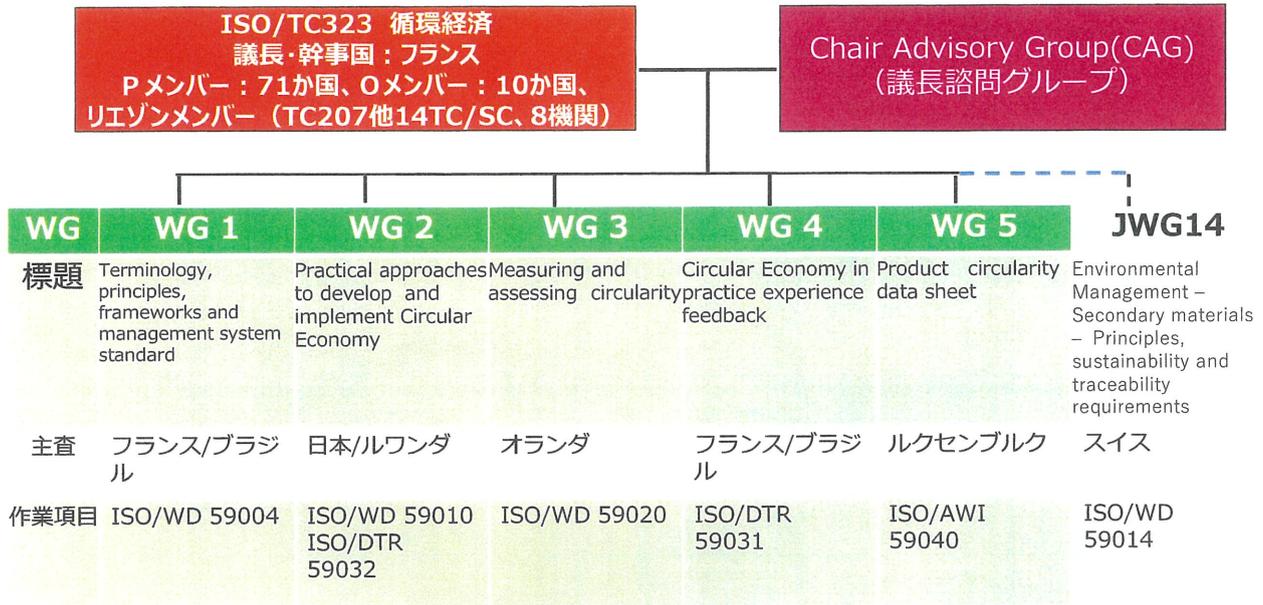
SiO ₂	B ₂ O ₃	Na ₂ O	Al ₂ O ₃
81.6	14.7	2.6	1.1

(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

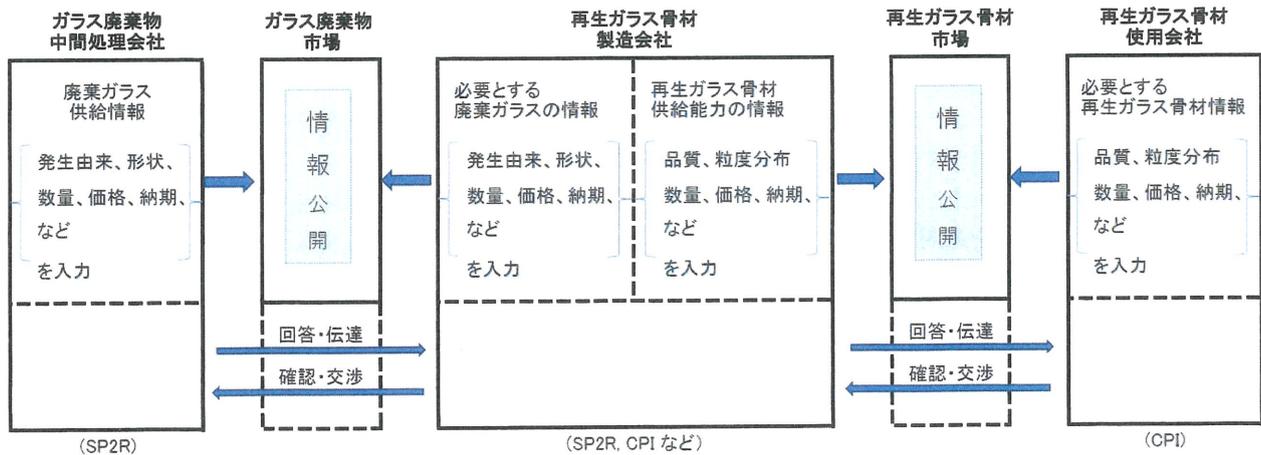
ISO/TC 323の構成

- ・ 議長・幹事国はフランス、傘下にCAGと5つのWG
- ・ 2020年5月に新業務項目提案3件が採択されて以来、計6件が開発中



ガラス再資源化協議会が推進する GMDX(ガラスマテリアルデジタルトランスフォーメーション)概念図

(2023年8月9日)



- ※ GRCJ : ガラス再資源化協議会
- ※ SP2R : 太陽光パネルリユース・リサイクル協会
- ※ CPI : 舗装コンクリートブロック研究会