

材料開発を加速する AI 技術応用 ーデータ駆動型マテリアルズインフォマティクスへの展開ー

AI technology application for accelerating material development ーData-driven Materials Informaticsー

浅原 彰規[†] 金澤 拓也[†]
Akinori ASAHARA[†] and Takuya KANAZAWA[†]

[†] (株) 日立製作所

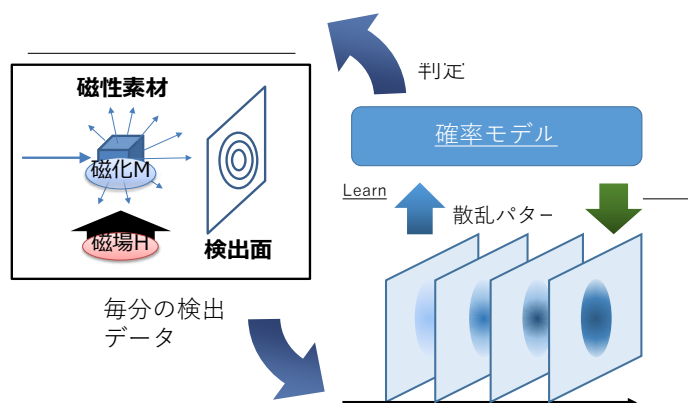
概要

近年、材料科学分野では、ICT の技術を用いて新材料開発を効率化する MI (Materials Informatics) が流行しており、中でも AI (Artificial Intelligence) の技術を用いた取り組みがひととき注目を集めている。そのような中であって、弊社（日立）は 2017 年より「材料開発ソリューション」として、材料開発にまつわる様々な ICT(特に AI 技術)の活用を検討提案し、材料科学者が道具としての ICT を使いこなして効率化ができるように支援するためのソリューション事業を進めている。

本発表では、このソリューション事業における事例を紹介する。AI の技術を活用するには問題設定を明確化することが重要である。MI においても同様であり、システムへの入力、出力、そして使用可能なデータという 3 つのキーポイントを軸として、材料特性の予測による実験効率化と、計測実験の効率化の事例について紹介する。



図 1 材料特性の予測



協力：トヨタ自動車，高エネルギー加速器研究機構
図 2 中性子散乱実験の高速化⁴⁾

Abstract

IT application intended for efficiency of material development, called “MI” (Materials Informatics), is now one of the hot topics in material science field. Of them, AI-based technologies are outstanding. We (Hitachi Ltd.) launched a new service named “Material Development solution” to support MI by material scientists.

This presentation is focused on representative several cases about our solution. Because problem settings are curial for applying AI technologies including MI cases, we discuss them in aspect of three key points: input, output and available data.