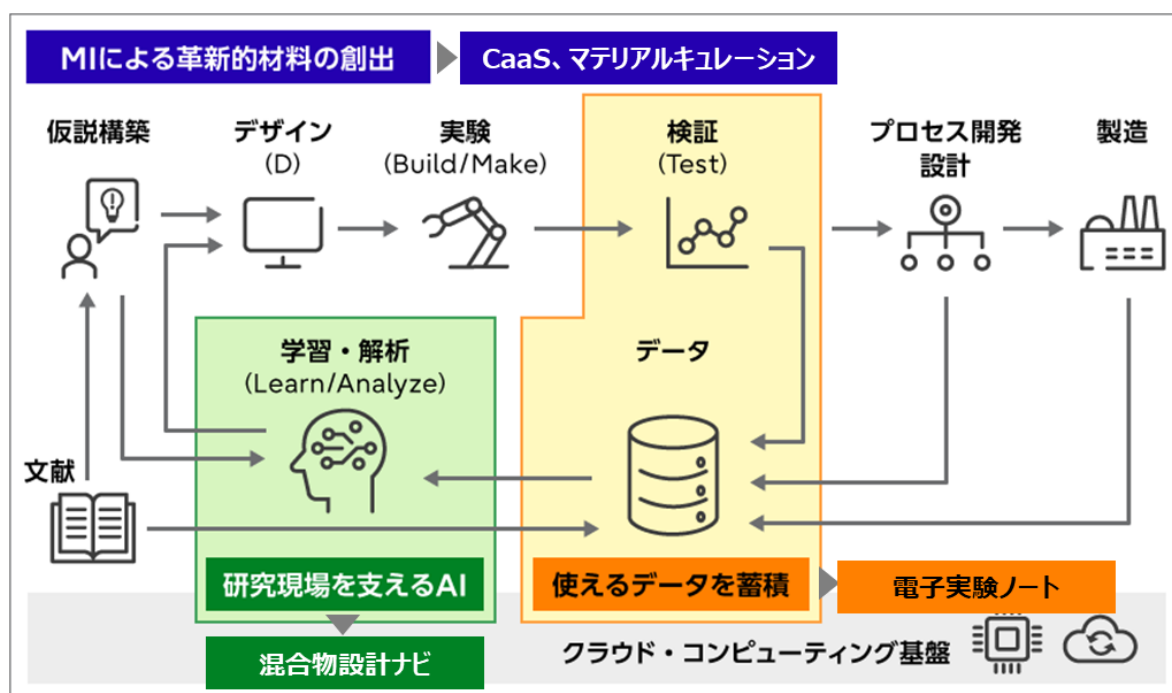


富士通のMIの課題に 対する解決アプローチ

データシート V1.0

材料開発を加速する富士通のMI

富士通のMIは当社独自ツールと外部の優れたツールを組み合わせ、デザイン、実験、検証、学習・解析まで一気通貫のMIソリューションとして提供し、新材料開発のアプローチを変え、MIの課題解決をご支援します。



MIの課題に対する解決アプローチ

MIの課題に対する解決アプローチ

「現場研究を支えるAI」の提供により、MIによるデータサイエンティスト支援にとどまらず、現場の技術者・研究者を直接ご支援します。MIがノーコードで扱えるようになり、開発現場での大幅な実験回数の削減や性能アップにつながることを期待できます。

また、「MIによる革新的材料の創出」として、誰もが簡単に最新のコンピューティング環境を利用できるクラウドサービス群「CaaS」や、常識にとらわれず、従来の延長線上ではない材料探索を支援する「マテリアルキュレーション支援システム」

（製品開発中）により、MIの課題解決をご支援します。

さらに「使えるデータを蓄積」する電子実験ノートを核としたMIのトータルワークフロー実現します。

当データシートでは、今回具体的なソリューションとして、以下3製品をご紹介します。

- ・マテリアルキュレーション支援システム
- ・Signals Notebook
- ・混合物設計ナビ

次ページ以降、ご参照ください。

国立研究開発法人 物質・材料研究機構（NIMS）様と共同開発 MIによる革新的材料の創出 マテリアルキュレーション支援システム(仮称)

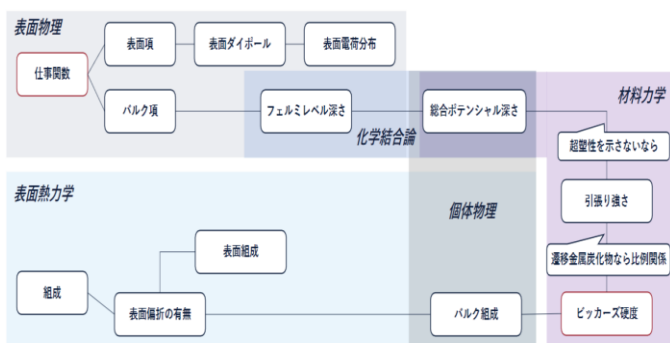
新素材開発で大きなブレークスルーを起こすには、常識にとらわれず、従来の延長線上ではない材料を探索することが必要となります。マテリアルキュレーションは分野横断的な知識探索を行い、素材開発に専門分野外の知見を活用するための手法です。科学原理に基づいて物性間の関連性をたどることで、自分の専門分野の物性と他の分野の物性とのつながりを見つけ出せます。本システムを使用することで、誰でも他分野の知見を材料開発に活用可能になります。

活用シーン

① 他分野の知見を活用した材料設計

科学原理をさかのぼって材料情報をつなぎ、分野横断的かつデータに
捉われない物性間情報を探索できます。

(例)「仕事関数」と「ビッカース硬度」の相関発見



「仕事関数」と「ビッカース硬度」の相関

画面イメージ

専門分野の物性と他分野の物性のつながりを確認可能。他分野の知見を材料開発に活用できます。



マテリアルキュレーション支援システム
画面イメージ

②機械学習 代替データ探し

機械学習のデータがない場合に、代替データを探すことができます。例えば、伝導率を予測したいがそのデータがない場合、熱伝導率と比例関係にある電気伝導率のデータを使って熱伝導率の予測モデル作成が可能です。

③その他

- ・機械学習予測機モデルの解釈支援
- ・自分分野の知見を他分野に活用(用途探索)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構(NIMS)様と共同開発

マテリアルキュレーション支援システム(仮称)は、国立研究開発法人 物質・材料研究機構(NIMS)様と富士通が共同で開発しています。

使えるデータを蓄積 Signals Notebook

Signals Notebookは実験に関わるすべての情報を一元管理できる、シンプルなクラウド型電子実験ノートです。MIで活用するデータを蓄積するためのデータ管理基盤を提供します。

快適な操作性

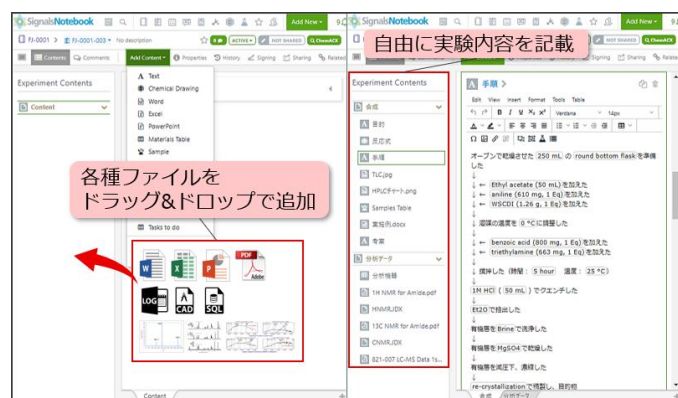
誰にでも使いやすいインターフェースで直感的に操作でき、レスポンスは高速でストレスなく利用可能です。

低コストで導入も簡単

Webブラウザベースのシステムのため、簡単かつ迅速に低コストで導入できます。サーバ構築・管理不要で、インターネット接続とブラウザがあれば利用可能です。

柔軟な実験内容の記述

白紙の実験ページに自由にデータを登録可能です。ドラッグ&ドロップで簡単にデータを添付できます。また、定型の実験ページをテンプレート化して利用することも可能です。定型・非定型のどちらの研究業務でも柔軟に対応して利用できます。



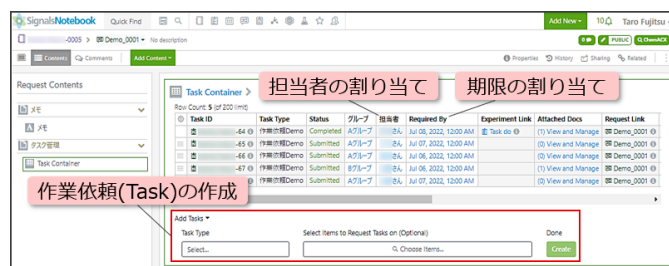
Signals Notebook画面イメージ

多種多様な実験データの一元管理

テキスト、MS Office文書、PDF、画像など様々な種類の電子ファイルを登録できます。化学構造型・反応式や拡散配列・アミノ酸配列にも対応しています。

プロジェクトの進捗状況を管理できる 「Tasks and Requests」機能

作業依頼(タスク)の作成、タスクの進捗状況を管理可能です。



Signals Notebook画面イメージ

強力な検索機能

全文文字検索はもちろん、構造型・反応式検索も可能です。

Signals Research Suiteとの統合

データ統合参照プラットフォーム Signals Inventa、アッセイデータ管理・解析プラットフォーム Signals VitroVivoと組み合わせることで、データの蓄積、可視化、分析、活用までをシームレスにつなぎ、研究開発の効率化、加速化を実現します。

研究現場を支えるAI 混合物設計ナビ

混合物設計ナビは、材料開発で重要な「混ぜる」業務をマテリアルズ・インフォマティクス(MI)で支援する一気通貫型の材料設計ソリューションです。最適な特性値となる材料配合比を予測し、混合物設計をナビゲートします。

プログラミング不要な材料設計

GUIベースで操作可能なため、材料開発の専門知識を持つ現場研究者自身がMIに取り組み、混合物の配合比を最適化することができます。

入力データから混合成分比提示まで一気通貫の設計システム

入力データセットに対して、モデル化・最適化を行い、最適な混合成分・比率・プロセス条件を出力する一連のフローをプログラミング不要で実行できます。



混合物設計ナビ画面イメージ

手持ちの実験データを最大限活用

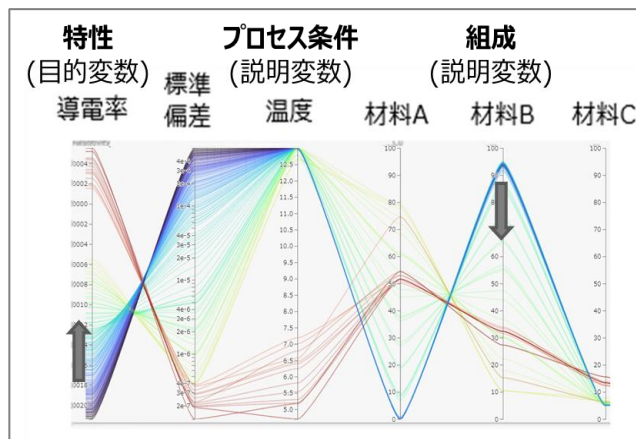
少量・断片的・不均一なデータでも、AIを用いて補足・補正することで、最大限活用できます。

AutoMLによる機械学習モデル作成の自動化

複数の機械学習の手法の中から最適な手法を自動選択できます。選択した手法に対するパラメータの最適化も自動実行できます。

組成・プロセス条件と特性の関係を可視化する多次元チャート

結果の解釈の際に多次元チャートを用いることで、組成・プロセス条件と特性の間の関係を一目で把握することができます。



多次元チャート

開発状況・方針に応じた最適化

多くの候補の中から最適な成分と比率を探索したい、限られた成分の中で最適な比率を追求したい、など、開発状況や方針に応じた最適化手法をご用意しています。

富士通株式会社

ソーシャルソリューション事業本部 Life Science事業部

<https://www.fujitsu.com/jp/dlp/>

お問い合わせ先

富士通コンタクトライン（総合窓口）0120-933-200

受付時間: 平日9時～12時および13時～17時30分（土曜・日曜・当社指定の休業日を除く）

