

「研究開発DXソリューション」ご提案資料

MI関連資料

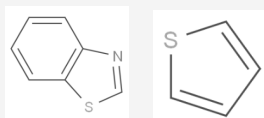
HITACHI

MIとは

- 実験データを活用して実験条件から実験結果を予測する仮想実験AIを構築します
- 実験結果のシミュレートや実験条件の最適化によって、実験精度の向上や関連コストの削減を実現します

■ 実験データ

化合物



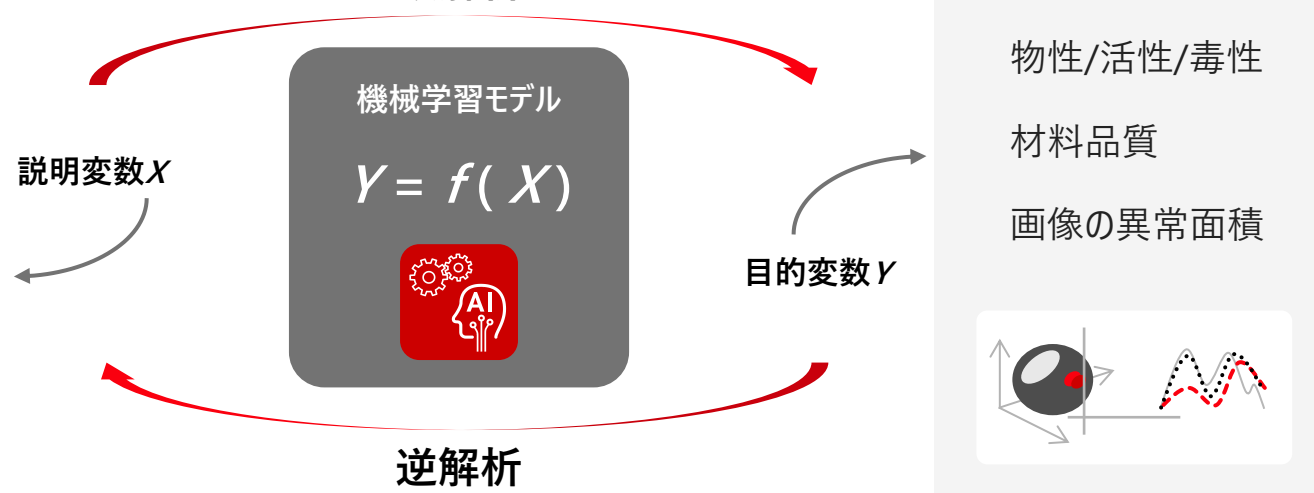
原料配合比

実験プロセス

画像データ

- シミュレーションデータ
- 特許データ

順解析

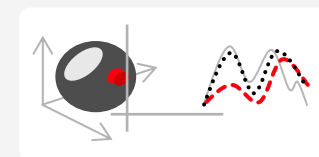


■ 実験データ

物性/活性/毒性

材料品質

画像の異常面積



MIとは

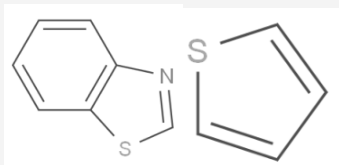
AI（人工知能）やビッグデータなどを活用した統計を情報科学・計算科学の手法を用いて材料開発を効率化する取り組み

MIとは

説明変数 X

■ 実験データ

化合物



原料配合比

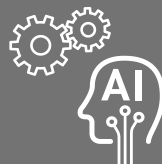
実験プロセス

画像データ

順解析

機械学習モデル

$$Y = f(X)$$



逆解析

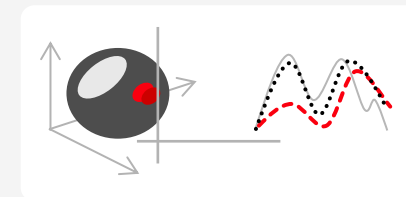
目的変数 Y

■ 実験データ

物性/活性/毒性

材料品質

画像の異常面積

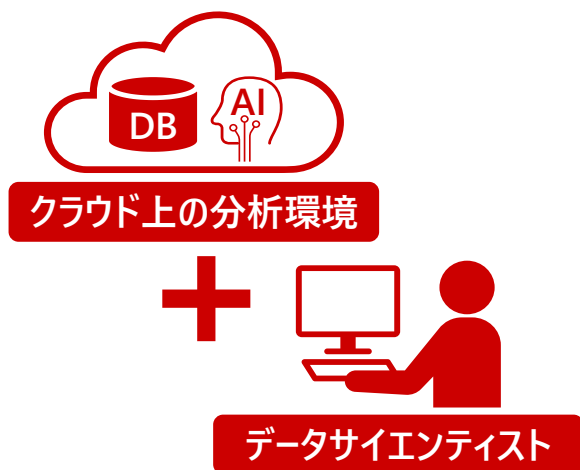


分析支援サービス：日立ハイテクのMIソリューション

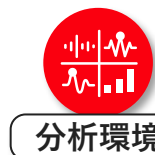


分析支援

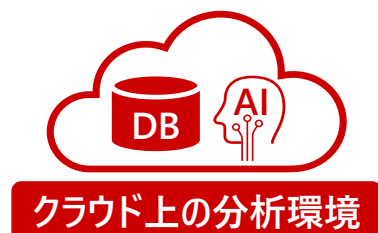
- 弊社データサイエンティストが分析
- テーマごとの個別契約が可能（PoC）
- 分析知識不要



環境提供サービス：日立ハイテクのMIソリューション

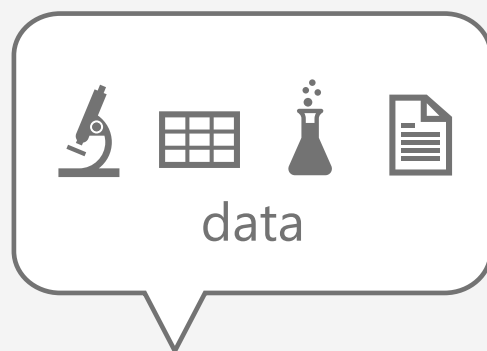


- 研究者が自由に分析
- サブスクリプション型契約 (SaaS)
- プログラミング知識不要



STEP 1

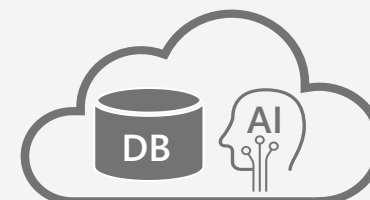
データをご提出



お客さま

STEP 2

日立のデータサイエンティストが
分析環境を使って分析



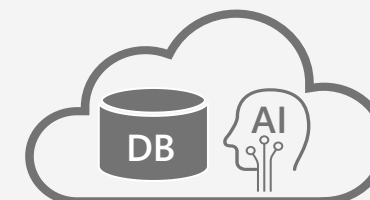
クラウド上の分析環境



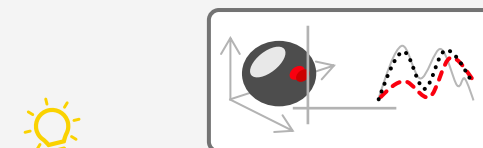
お客さま

STEP 3

分析レポートの確認



クラウド上の分析環境



お客さま


逆解析の事例

- 原材料と配合比率が膨大
すぎて、最適な探索が難しい

実験候補番号	主成分A	主成分B比率	主成分C	主成分D比率	添加剤E	添加剤F比率	添加剤G	添加剤H比率	加熱温度	加熱時間	..	物性値
1	y	25	b	30	z	10	D	20	80	30	..	86
2	a	30	x	30	z	20	W	10	70	20	..	78
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:

組み合わせ例
が多すぎる

やってみないと
結果が
分からない



勘と経験に
頼った実験では、
結果を出すまで
時間がかかる



分析環境



分析支援

STEP 1 実験データの準備

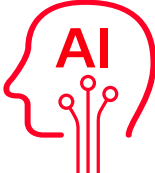
実験番号	主成分A	主成分B	添加剤C	加熱温度	加熱時間	物性値
1	20	60	30	90	10	88
2	35	20	15	80	12	60
3	50	30	30	90	10	72

STEP 2 学習モデルの構築

機械学習

最適化アルゴリズム

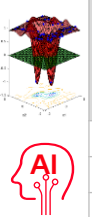
物性値 = f (原料・比率)



STEP 3 目標値の条件設定

物性値を満たす材料・比率を**仮想空間**で探索

実験番号	主成分A	主成分B	添加剤C	加熱温度	加熱時間	物性値
Y	?	?	?	?	?	76
Z	?	?	?	?	?	70
:	:	:	:	:	:	:



STEP 4 【未知】
配合比率の予測

実験番号	主成分A	主成分B	添加剤C	加熱温度	加熱時間	物性値
Y	50	30	30	90	10	76
Z	48	20	15	80	12	70
:	:	:	:	:	:	:

MIの効果

実験による探索
(1~2か月)

↓

仮想実験と
実験による探索
(1~2日)



PI（プロセス・インフォマティクス）の事例



分析環境



分析支援

-最適な製造条件の探索に
時間がかかっていた

製造条件番号	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度	..	製造結果の画像に対する良否判定や異物情報	各種性能測定結果 (電気特性、光学特性、機械的特性)
1	10	25	20	10	30	..	○	80
2	20	30	30	15	45	..	×	70
:	:	:	:	:	:	:	:	:

MIを通して最低な配合条件を探索することができたが、安定して生産/製造することができない



製造に関するパラメータが膨大で、
最適な製造条件の探索に**時間がかかる**

STEP 1 実験データの準備

製造番号	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度	測定結果
1	20	60	30	30	90	88
2	35	20	15	15	80	60
:	:	:	:	:	:	:

STEP 3 目標値の条件設定

製造条件を**仮想空間で探索**

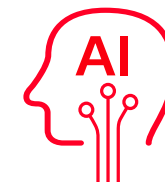
製造番号	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度	測定結果
?	?	?	?	?	?	90

STEP 2 学習モデルの構築

機械学習

最適化アルゴリズム

物性値 = f(原料・比率)



STEP 4 最適な製造条件を予測

製造番号	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度	測定結果
1	10	80	30	20	60	92
2	15	10	30	5	70	91
3	30	50	30	30	70	90

PIの効果

製造条件に対する
データ駆動型
フィードバックによる
ロスコストの低減



テキストマイニング支援の事例



分析支援

- 大量の特許・論文をリスト化するのに時間がかかった

MIのデータ保管のために
特許や論文等の公開情報を
実験データに追加したい...



しかし大量の特許・文献から「文意」を理解し、
実験データを抽出するのは**負担が多い**



STEP 1 特許・文献などの準備

特許

論文



実験に活用したい文献を準備

STEP 2 新しい情報を設定

二酸化マンガ 15mol に過酸化水素
水 20ml を **混合** 、
塩素酸ナトリウム 15mol を.....



物質名・量・操作・温度など欲しい
情報をラベリング

STEP 3 MI：特徴量のマッピング



抽出したい単語の周囲に現れる特
徴的な表現や**相関関係を学習**



STEP 4 活用したいデータの抽出

特許・論文
抽出元
文章

特許・文献からの
抽出実験データ



抽出元 文章	物質	量	温度	操作	...
二酸化 マンガ 15mol	二酸化 マンガ	15 mol	30℃	混合	...

MIの効果

大量のテキストから
自動データ抽出に
よる業務効率化



画像解析支援の事例

- 画像から不良品検知できる
「人」が限られている



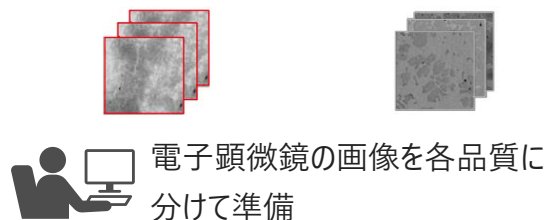
できる人材が限られており
スピードアップに限界がある

後継者不足や教育工数
もあり人材育成が
なかなかできない

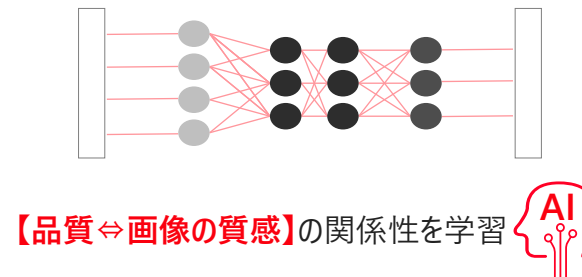
STEP 1 特許・文献などの準備

品質GOOD

品質BAD



STEP 2 新しい情報を設定



STEP 3 MI：特徴量のマッピング

特徴量を識別

特徴量マップ



判断根拠となる**特徴量を抽出し計算**

STEP 4 活用したいデータの抽出

自動判別結果の可視化

品質GOOD

品質BAD



MIの効果

スキルのデジタル化
による
品質安定・開発の
スピードアップと
効率化



画像解析 × 逆解析の事例



分析支援

- 良品となる半導体用
フォトレジストの最適な組成
の組み合わせを知りたい
- ※良品判定は画像



できる人材が限られており
スピードアップに限界がある



STEP 1 画像データを準備

品質GOOD 品質BAD

電子顕微鏡の画像を
各品質に分けて準備

STEP 2 特徴量の
識別・計算

特徴量を識別 特徴量マップ

【品質⇄画像の質感】の
関係性を学習

AI

判断根拠となる特徴量を抽出し計算

STEP 3 品質の自動判定

品質GOOD 品質BAD

GOOD・BADで
判定結果をスコアリング

STEP 4 画像の判定結果と
組成データを結合

実験番号	主成分A	主成分B	添加剤	加熱温度	加熱時間	誘電率	判定結果
1	20	60	30	90	10	32	8
2	35	20	15	80	12	20	7
3	50	30	90	10	27	27	9

画像の判定結果（スコアリング）
を組成データに結合

STEP 5 MI：特徴量の
識別・計算

実験番号	主成分A	主成分B	添加剤	加熱温度	加熱時間	誘電率	判定結果
X	?	?	?	?	?	18	9
Z	?	?	?	?	?	19	10
:	:	:	:	:	:	:	:

AI

物性値を満たす材料・比率
を仮想空間で探索

STEP 6 品質の自動判定

実験番号	主成分A	主成分B	添加剤	加熱温度	加熱時間	誘電率	判定結果
X	50	30	30	90	10	18	9
Z	48	20	15	80	12	19	10
:	:	:	:	:	:	:	:

画像の判定結果を考慮した
良品となる配合 + 条件を提示

MIの効果

スキルのデジタル化
による
品質安定・開発の
スピードアップと
効率化

