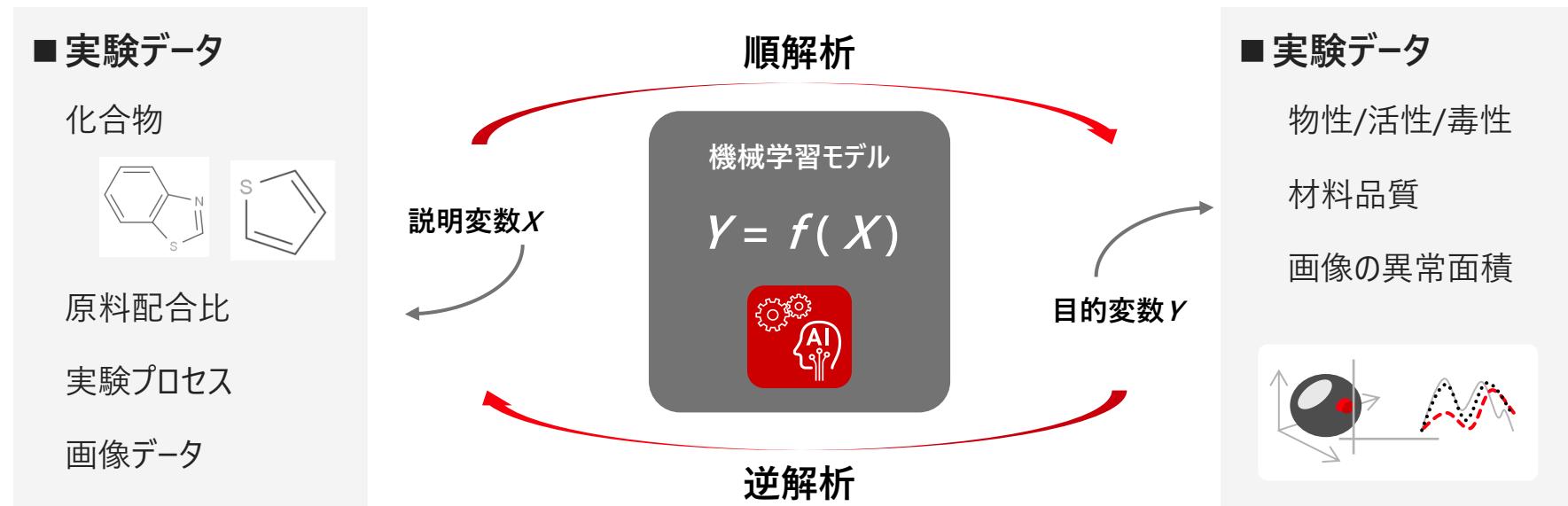


MI関連資料

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



- シミュレーションデータ
- 特許データ



MIとは

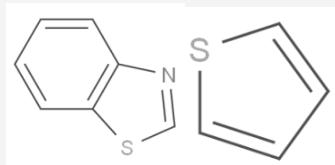
AI（人工知能）やビッグデータなどを活用した統計を情報科学・計算科学の手法を用いて材料開発を効率化する取り組み

MIとは

説明変数 X

■ 実験データ

化合物



原料配合比

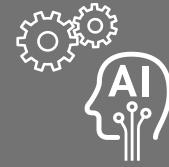
実験プロセス

画像データ

順解析

機械学習モデル

$$Y = f(X)$$



逆解析

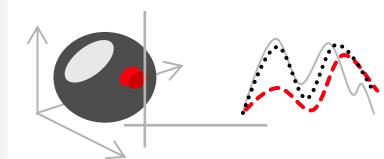
目的変数 Y

■ 実験データ

物性/活性/毒性

材料品質

画像の異常面積

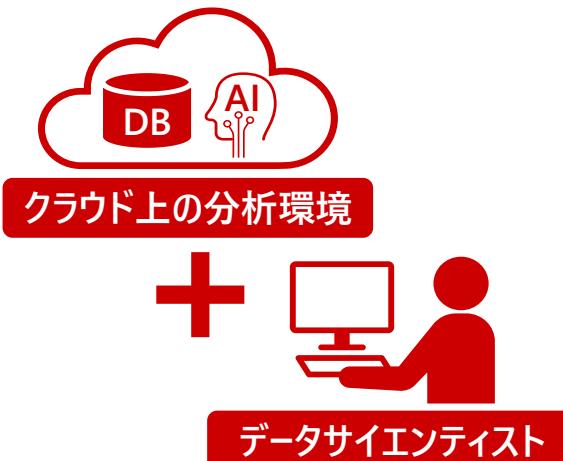


分析支援サービス：日立ハイテクのMIソリューション



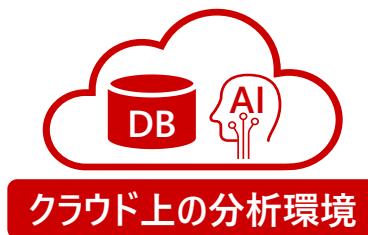
分析支援

- 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

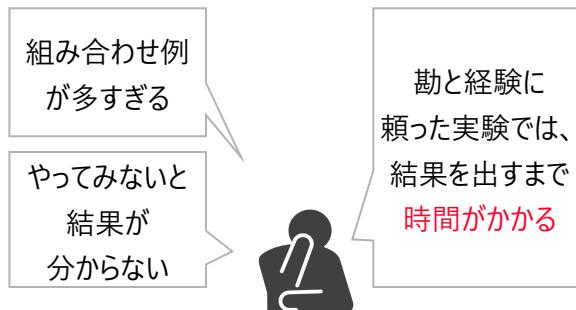


分析環境

逆解析の事例

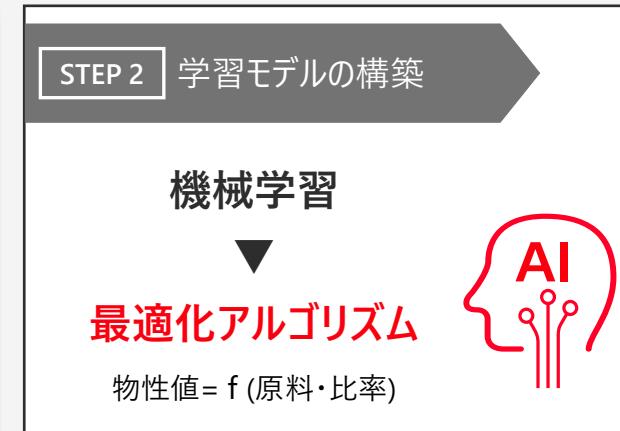
- 原材料と配合比率が膨大
すぎて、最適な探索が難しい

実験候補番号	主成分A 比率	主成分B 比率	主成分C 比率	主成分D 比率	添加剤A 比率	添加剤B 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
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	



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A	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



MIの効果

実験による探索
(1~2か月)

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A	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
:	:	:	:	:	:	:

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A	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
:	:	:	:	:	:	:

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

- 最適な製造条件の探索に
時間がかかっていた

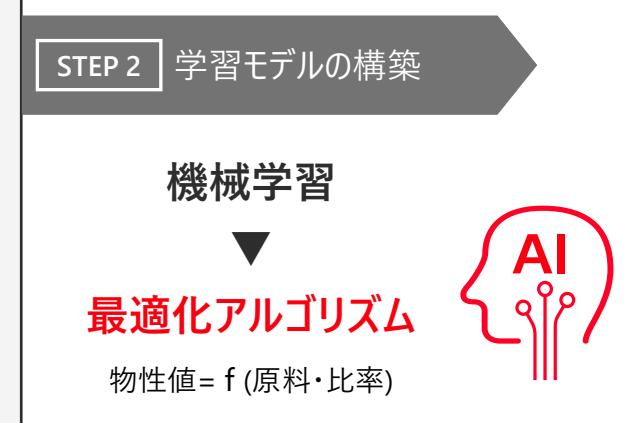
製造条件番号	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度	製造結果の画像に対する良否判定や異物情報	各種性能測定結果(電気特性、光学特性、機械的特性)	
	工程時間	工程温度	工程量	工程速度	工程温度			
1	10	25	20	10	30	..	○	80
2	20	30	30	15	45	..	×	70
:	:	:	:	:	:	:	:	:

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
:	:	:	:	:	:	:



分析環境

分析支援

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

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
AI	?	?	?	?	?	90

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



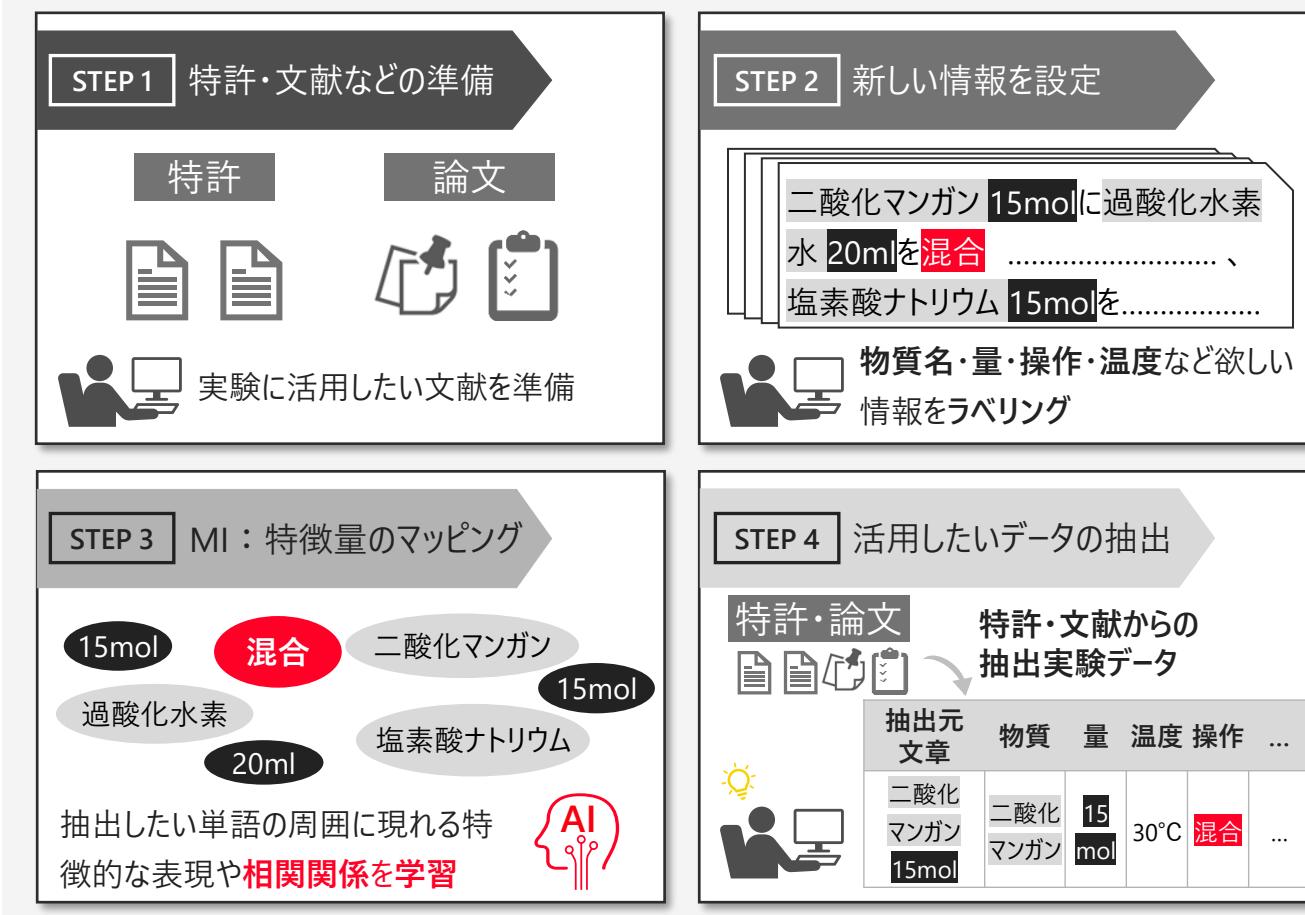
テキストマイニング支援の事例

- 大量の特許・論文をリスト化
するのに時間がかかる

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**



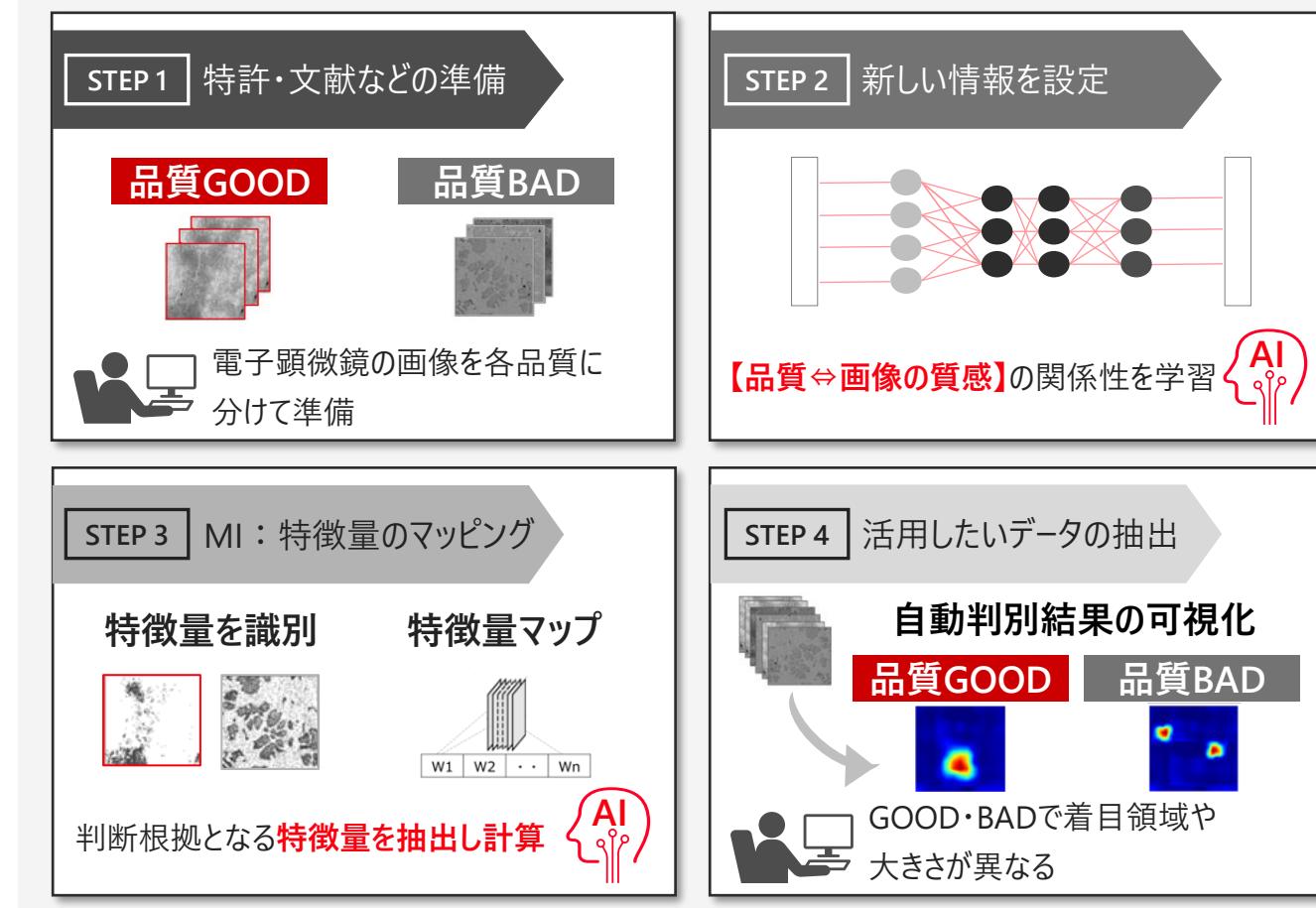
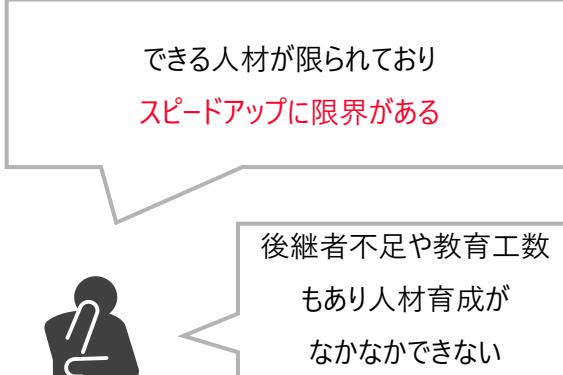
MIの効果

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

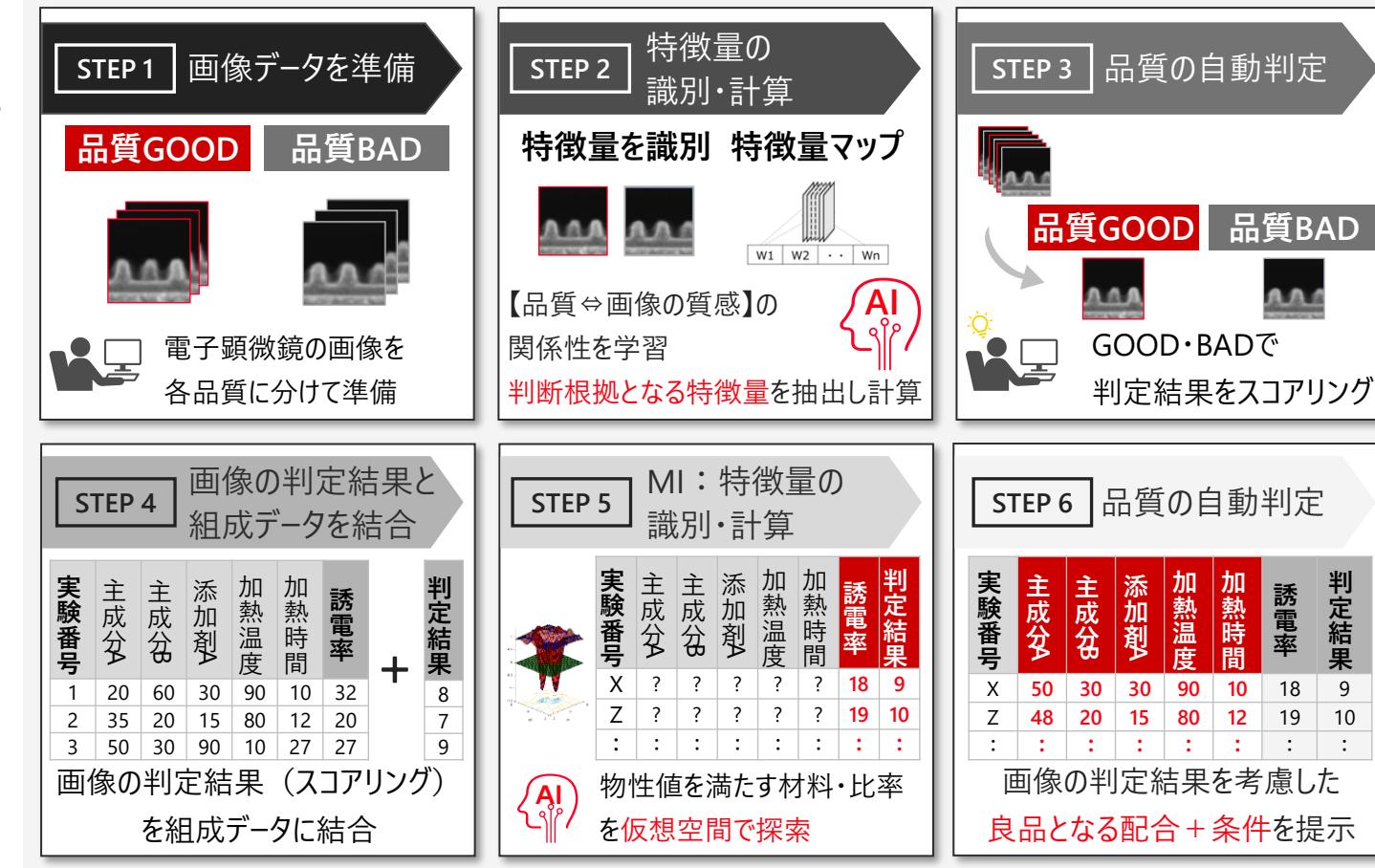


MIの効果
スキルのデジタル化
による
品質安定・開発の
スピードアップと
効率化



画像解析 × 逆解析の事例

- 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



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