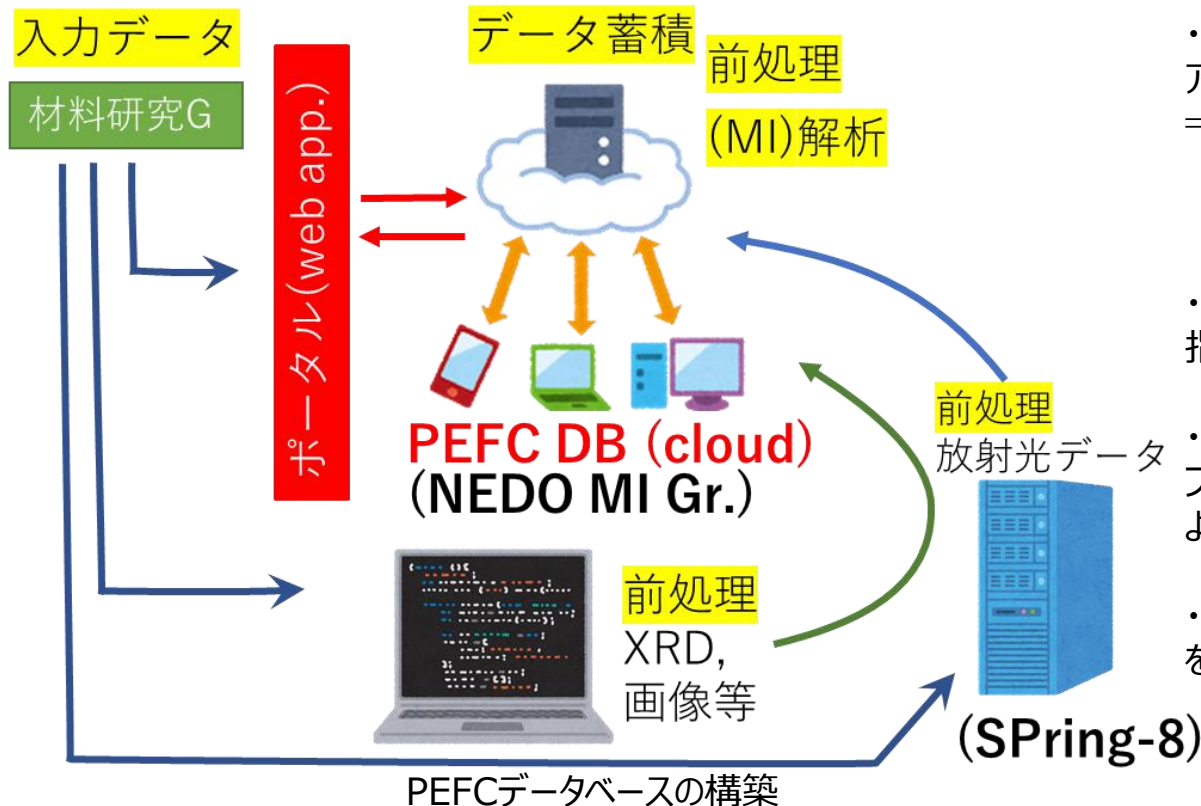


事業名：燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業/
 共通課題解決型基盤技術開発/マテリアルズ・インフォマティクスによる燃料電池材料の研究開発
 発表者名：物質・材料研究機構, 日産アーク

○事業概要

Challenge	<ul style="list-style-type: none"> ・材料研究Gからデータ収集する仕組みを作り、PEFCデータベースを構築 ・PEFCデータベースを用いたMI解析
Goal	<ul style="list-style-type: none"> ・数十年後も利用可能な系統的PEFCデータベースを構築する。 ・MI解析により新規材料開発指針を提案する。
20年度末状況	<ul style="list-style-type: none"> ・過去事業を含むデータ収集開始(2件)。ウェブアプリ開発を含む、DBクラウド基盤の構築を開始(9月中に基礎部分を構築完了。追加機能を年度末までに付与して完成させる)。



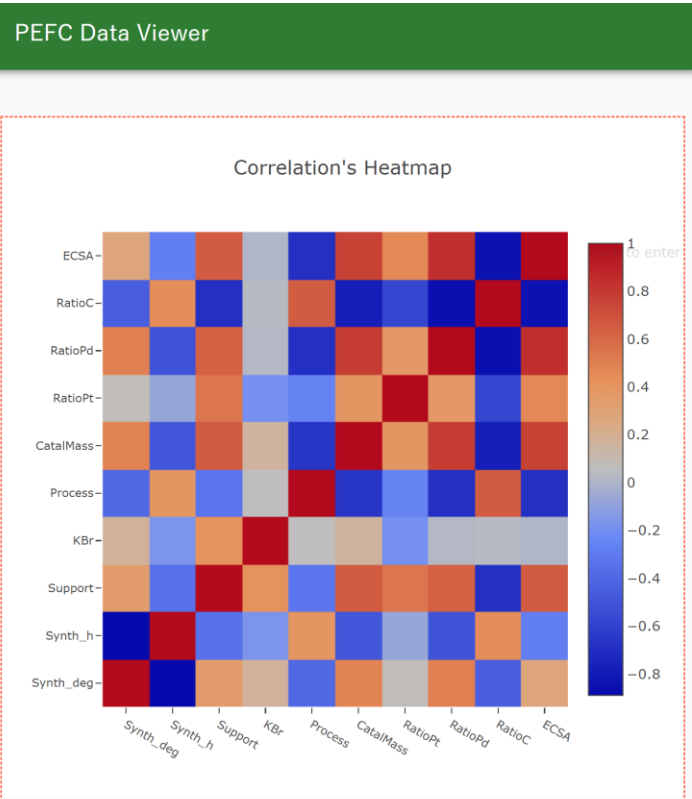
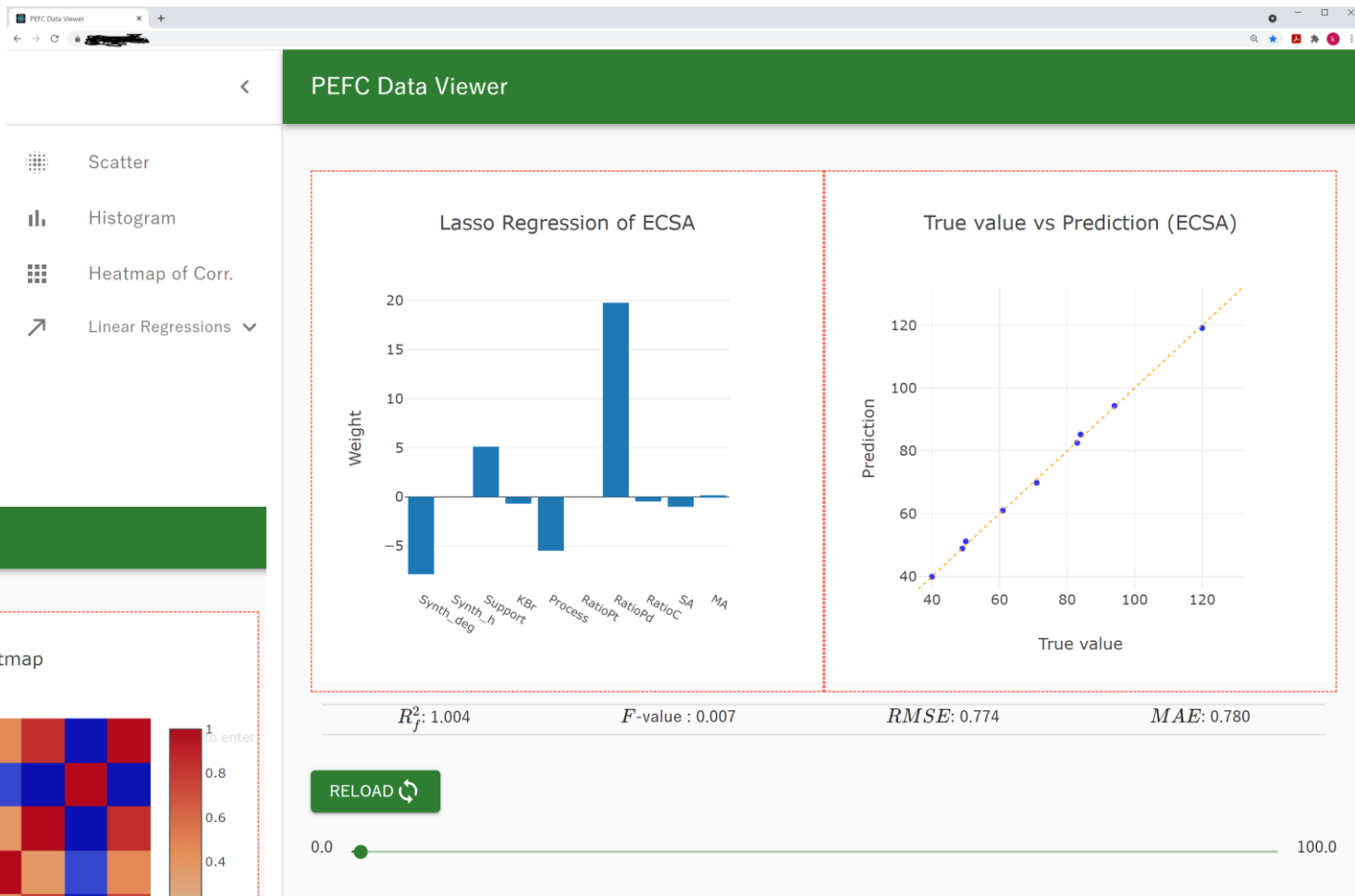
- ・材料研究Gからのデータは、ウェブアプリを通してアップロードしてもらう。
⇒ウェブアプリ上で簡単なデータ解析やMI解析ができるようになっており、データ提供者が自由に解析機能を利用できる。

- ・アップロード時にデータ提供者は閲覧範囲を指定できる。

- ・アップロードされたデータは、前処理を行い共通フォーマットに従って保存される。データの種類により、SPring-8などを経由する。

- ・蓄積されたデータを元にMIグループによる解析を行い、結果を材料研究Gにフィードバックする。

連絡先
 物質・材料研究機構, 袖山慶太郎
 E-mail: SODEYAMA @nims.go.jp



本課題にて現在開発中のwebアプリ画面。

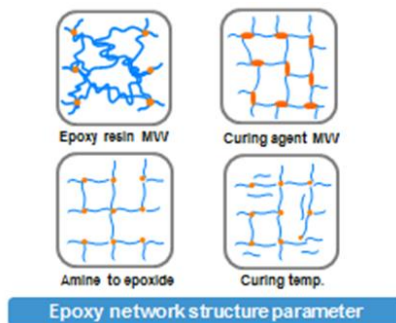
材料研究Gのデータ提供者が、ご自身でドラッグ&ドロップしてアップロードできる。同時に、そのデータの相関係数の表示や、線形回帰による特徴量抽出などをウェブブラウザ上で容易に実施可能。

ここで解析した結果もデータベースへ保存可能にする予定。

MI解析による材料の改良指針提案

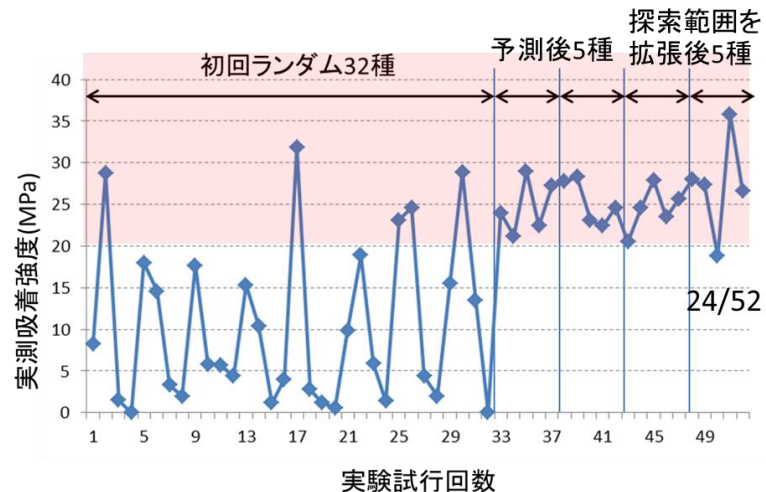
- 実験条件の高速探索
→少数の実験値から、
次の実験条件を提案！

・例: 高分子接着剤の
高接着特性
アクティブラーニングによる
実験条件探索



エポキシ分子量、
硬化剤分子量、
両者の混合割合、
硬化温度
を最適化

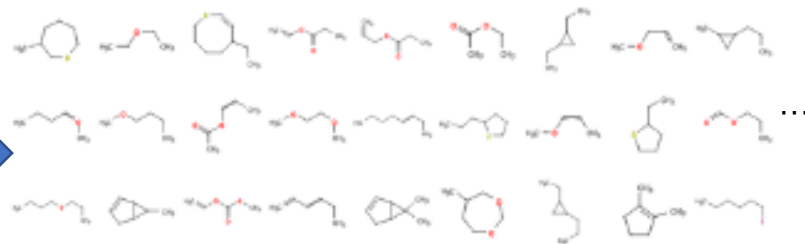
高い接着強度を発現する実験条件を高速に発見！



MI解析による革新的な新材料設計

AI提案

- 人の直感に依らず、欲しい特性をもつ
新規材料の自動大量提案
→新規材料をAIにより自動的に大量生成
SMILES-NEOプログラムの利用



- 得られた材料の機能を機械学習により高速予測
SMILES-Xプログラムの利用

- 実験研究者との議論によるスクリーニング
(合成のしやすさ、実際に使える官能基の選択など)

⇒ 人の勘に依らない新規革新材料の提案へ