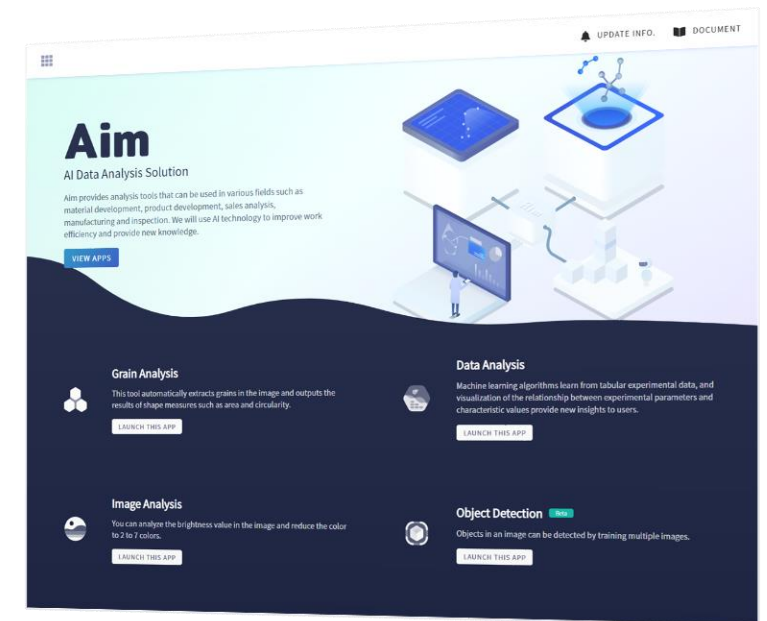


Attracting Tomorrow



マテリアルズ・インフォマティクス（MI）の推進 独自のAIデータ分析ソフトウェアの構築について



MI(Materials Informatics)とは

... MI is a tool for materials development

10^9 Number of known materials

10^{62} Number of unknown materials*)

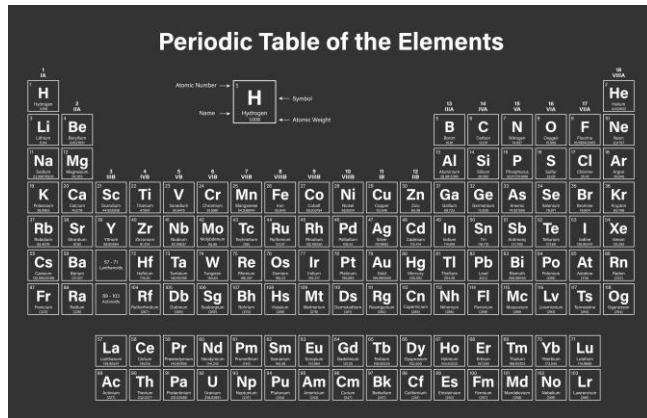
composition

×

process

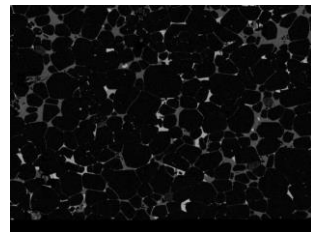
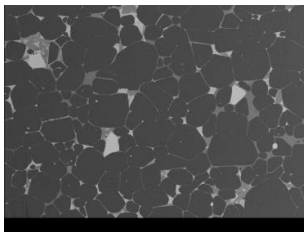
×

microstructure

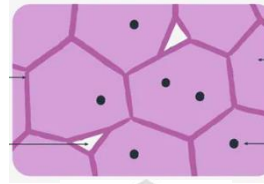


Periodic Table of the Elements

Table showing the periodic table of elements, including atomic number, symbol, name, and atomic weight.



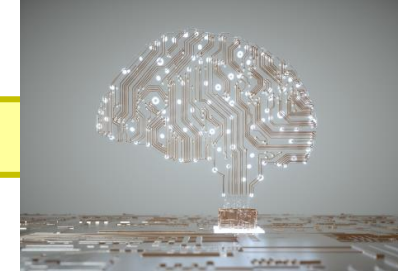
データ



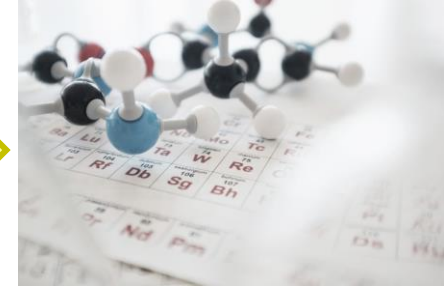
論文



MI



新材料



“Materials Technology” × “Information Technology”

-> Materials Informatics

MIを活用することで、
合理的な材料設計が可能となる

無数にある候補から所望の材料を開発するため、
合理的な材料設計が必要不可欠

*) Y. Oorii, et. al., J. Photopolym, Sci. Technol., 34 41 (2021)

TDKのMIの概要

当社会社案内2022より

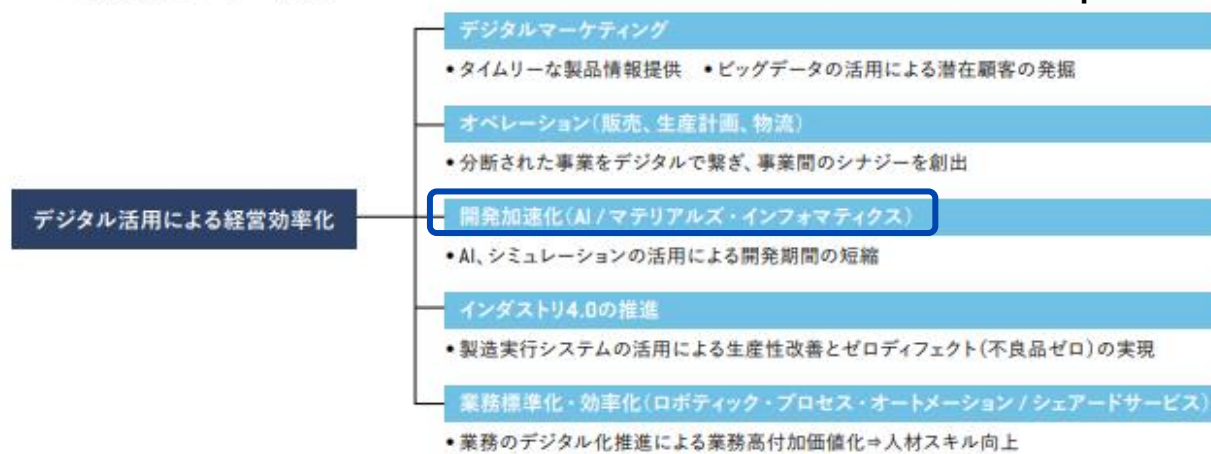
Value Creation Cycle・価値創造サイクル 中期経営計画 ～2CX実現に向けてDXとEXを加速させ、持続可能な社会のための価値を創造する



2CX: Customer Experience, Consumer Experience

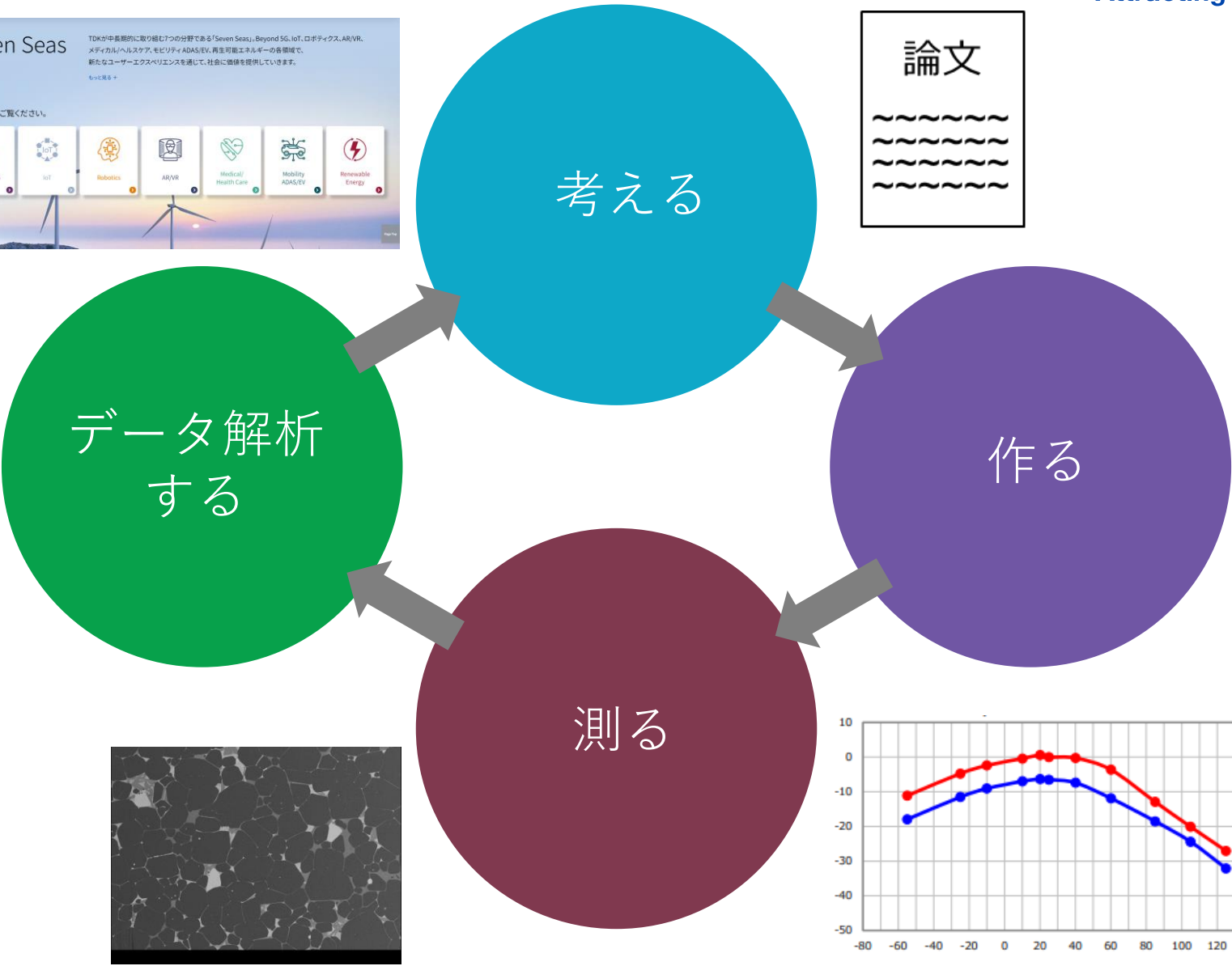
TDKが目指すデジタル経営

Annual Report 2020



Materials Technologyのさらなる強化を通じ 2CX(Customer Experience, Consumer Experience) の実現を目指す

材料開発のフロー

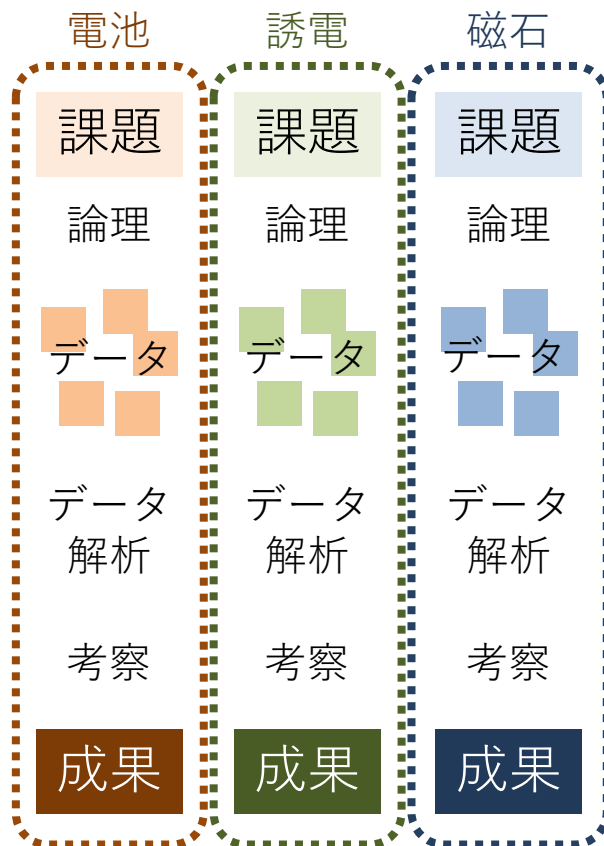


これまでのMIの取り組み

Attracting Tomorrow

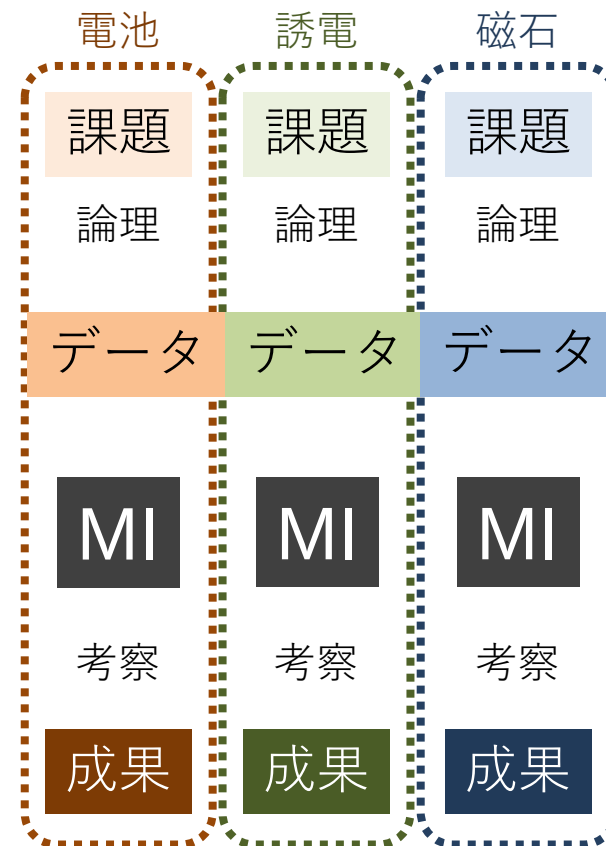


従来(Step0)



技術者の知見・ノウハウを基に
得られたデータを解析

現状(Step1)



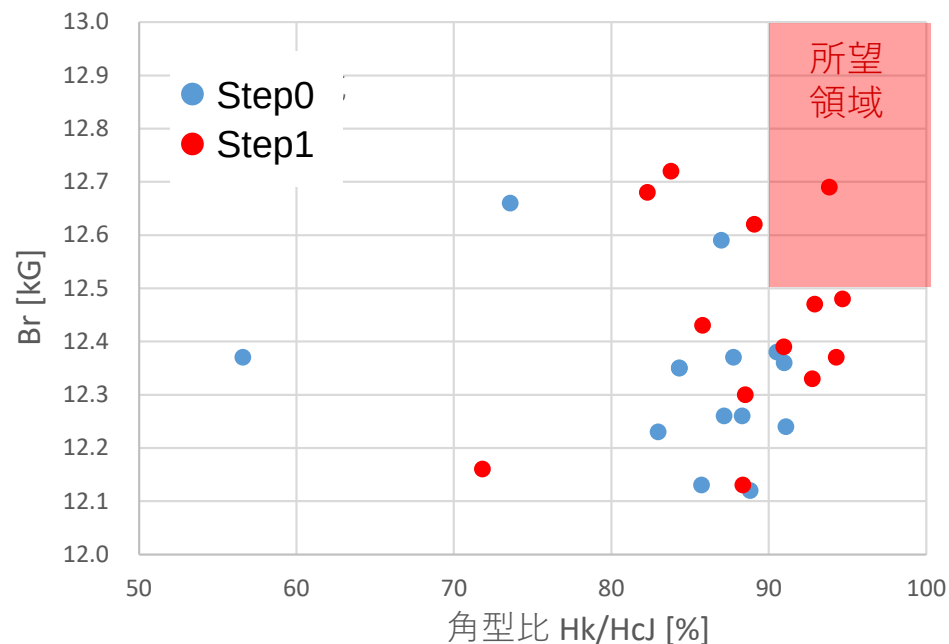
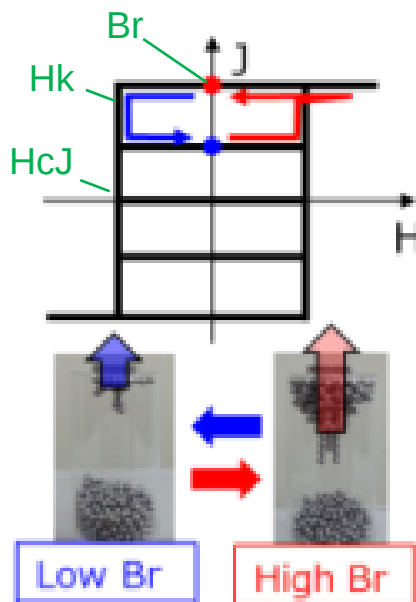
MIを用いてより高度なデータ解析
材料開発にデータを最大限活用

MIに係るこれまでの実績

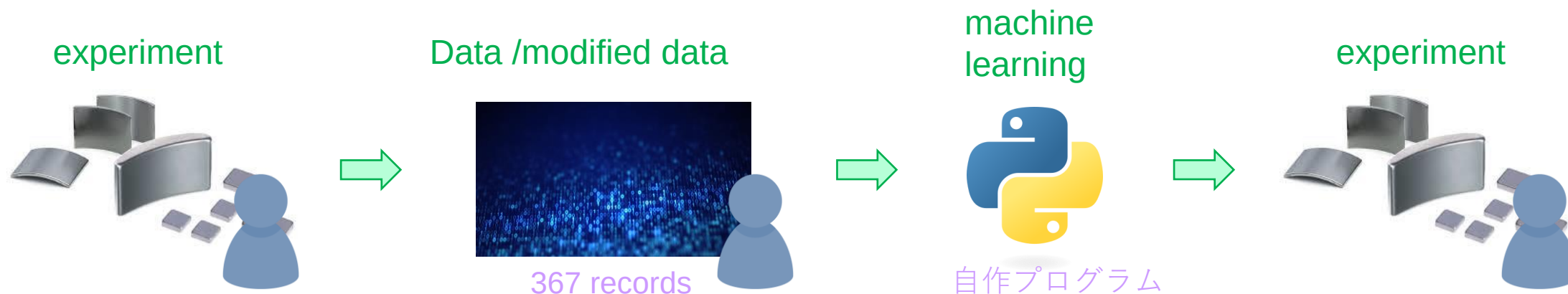
事例1：新規磁石材料（2018年頃）

可変磁束磁石

残留磁束密度(Br)と
高い角型性(Hk/HcJ)
が求められる

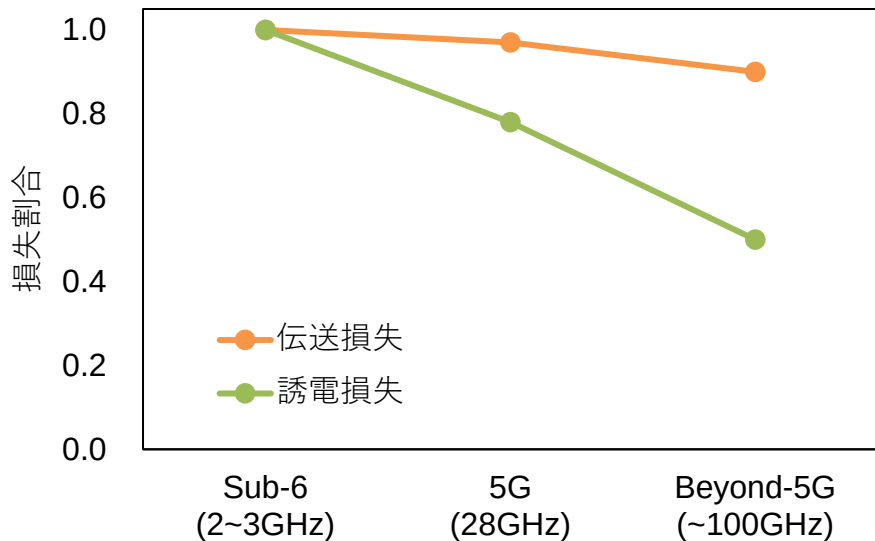


成果：
人間の従来知見からでは
得られなかった
高特性材料を見出した



MIに係るこれまでの実績

事例2：高周波材料の損失予測方法（2021年頃）

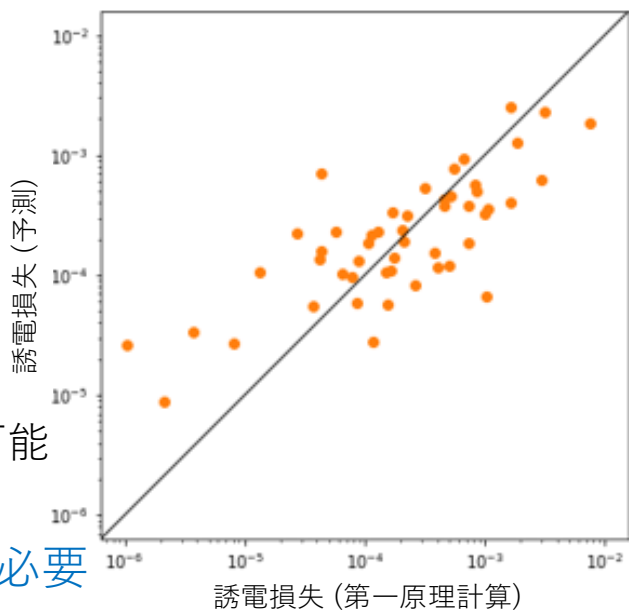
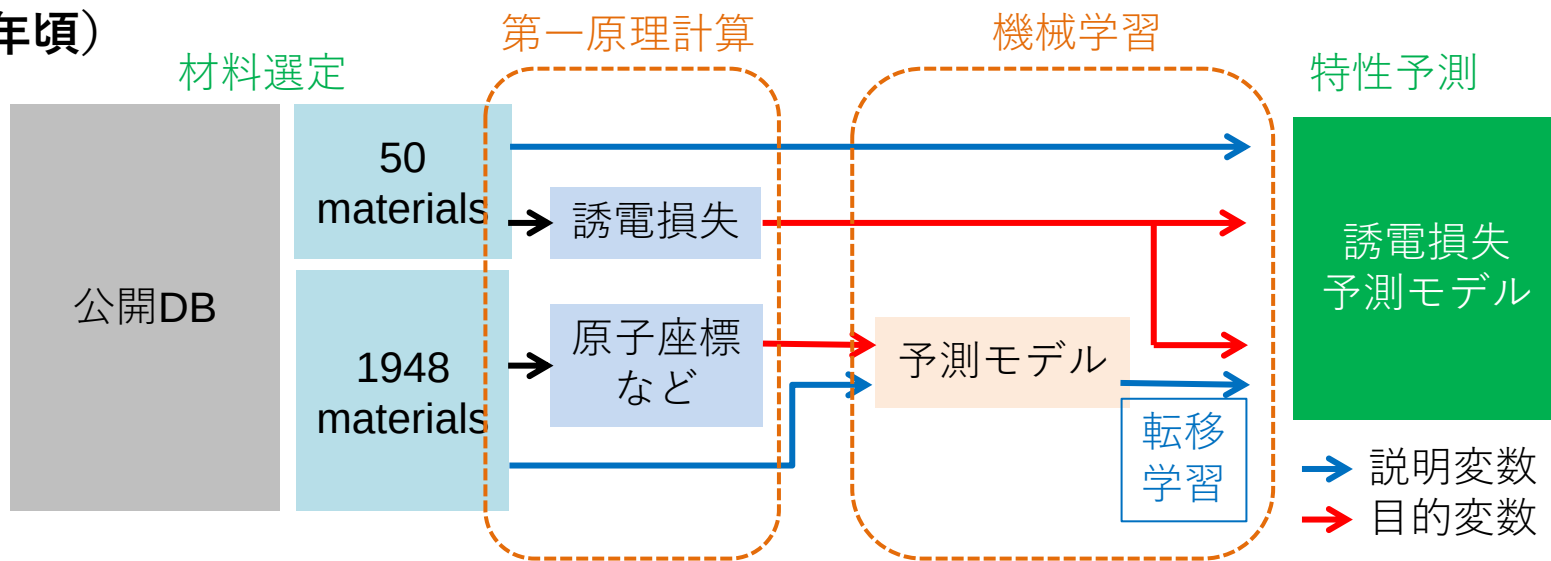


実験的手法 -> 高精度な実験は不可能

計算科学的手法 -> 計算コストが大きく
十分な計算は不可能

データ科学的手法 -> データが不足しており、
高精度な予測は不可能

低コストで高精度に特性を予測する方法が必要



約2000種の材料の損失予測に要する時間
本手法による場合：約30日
全て第一原理計算による場合：約2.5年

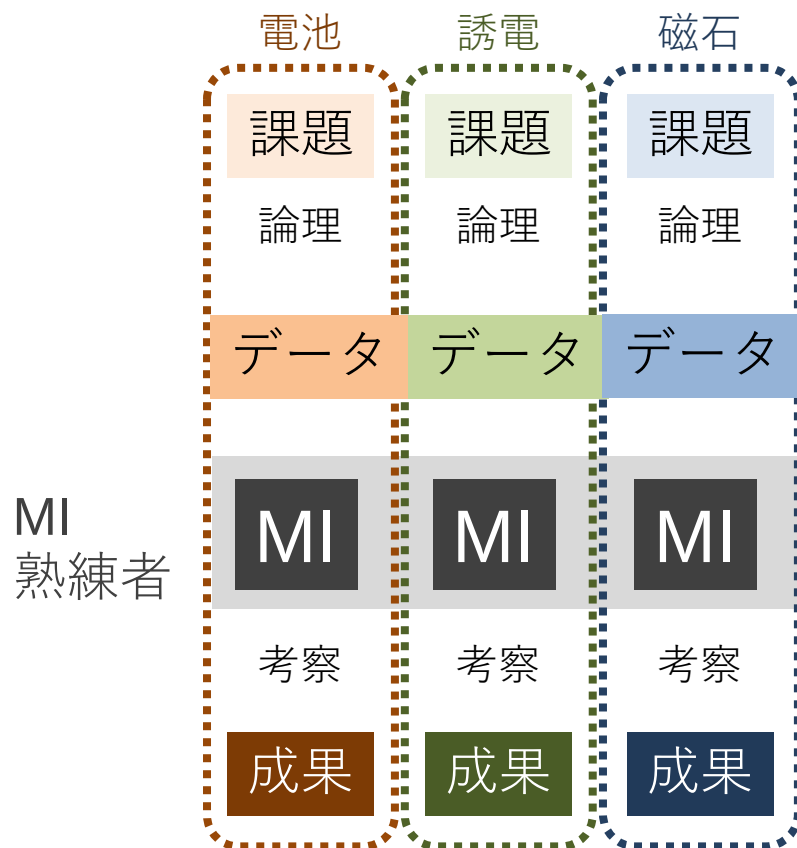
成果：
事実上不可能であった予測が
できるようになった

理想的なMIの取組み

Attracting Tomorrow

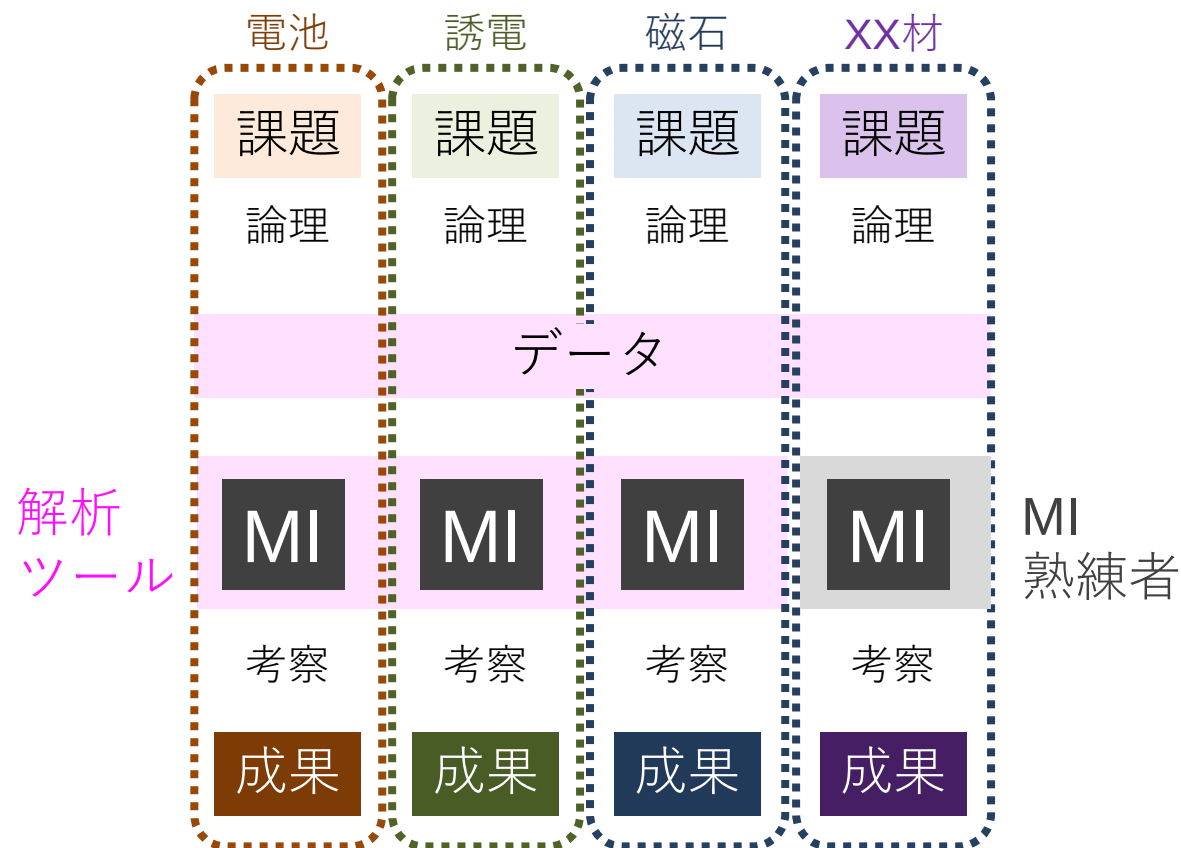


現状(Step1)



データや知見の共有が乏しい
MIの熟練者によりMIを実施

今後(Step2)



材料の知見がある材料技術者がMI実施
データ共有によりシナジー創出

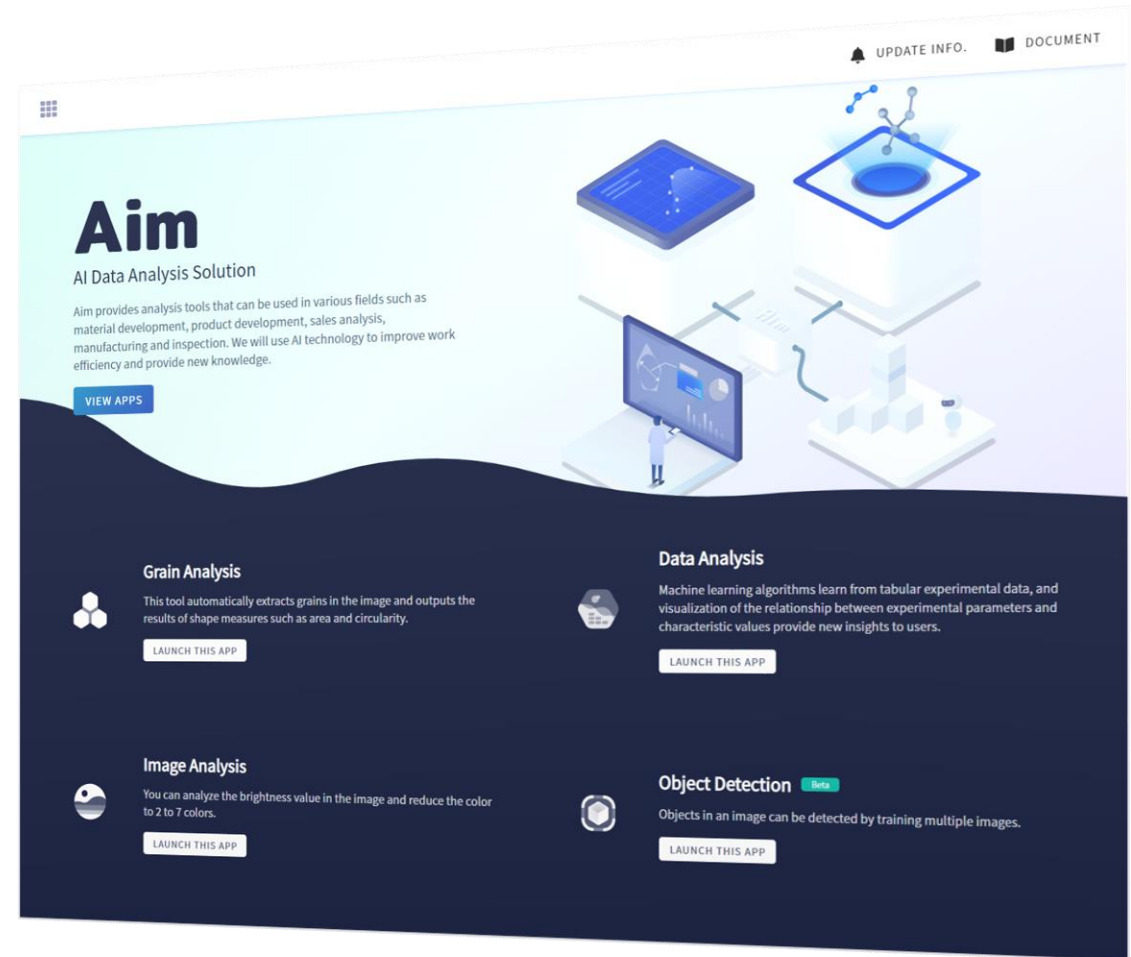
AIデータ分析ソフトウェア Aim

Aim とは？ AI DATA ANALYSIS SOLUTION

Aimは、各部署に蓄積されたデータ解析技術を誰にでも使いやすいように広く全社に展開する事、AIやビッグデータ活用で必要となる良質なデータを蓄積する事等を目的として開発した独自のAIデータ分析プラットフォームです。

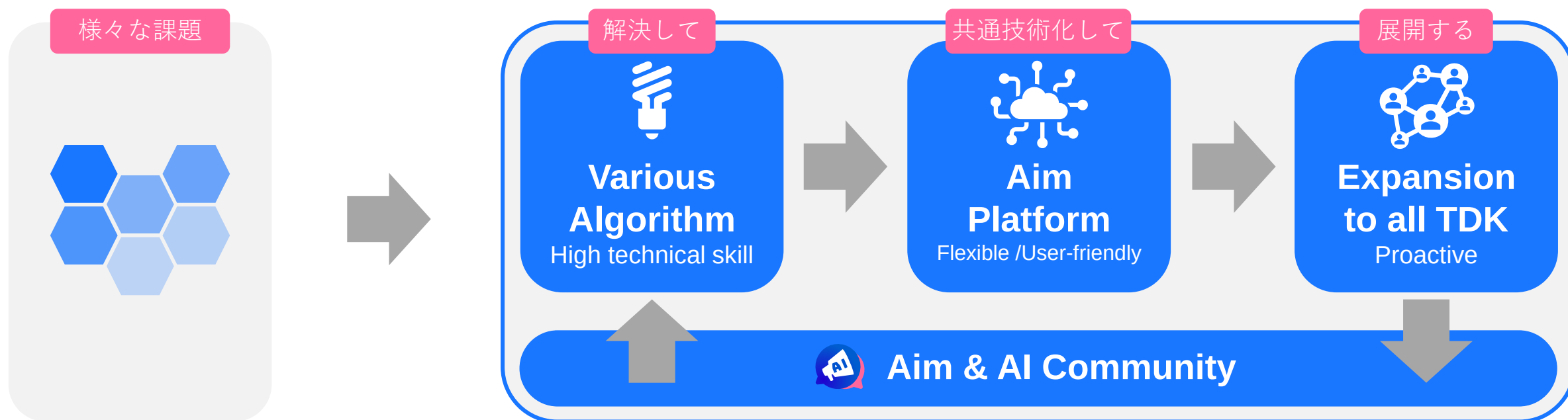
特長

- Free : TDK従業員なら誰でも無料で利用可能
- Aggregated : 社内で培ったデータ分析技術を集約
- Customizable : TDK独自だからこその高カスタマイズ性
- Easy : インストール不要。**Web**ブラウザからアクセス
- Smart : 面倒な手順を一括処理



Aim開発の経緯と今後の展開

- 社内の先行的取り組みで培った技術や熟練者のノウハウを広く使える形にしていきたい
- 特にニーズの高い「データ解析」技術を取っ掛かりとして、「データ蓄積」の仕組みを作りたい



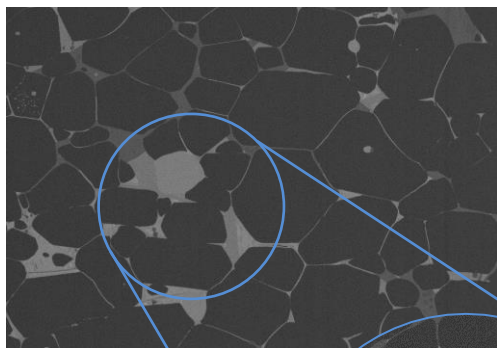
➡ **TDKの持つ様々な技術をAimを通してall TDKで使えるようにしてDigi-TDKを実現する**



粒子解析

粒子に着目してMIで使いやすい数値データを高精度に抽出

材料画像



結果画像

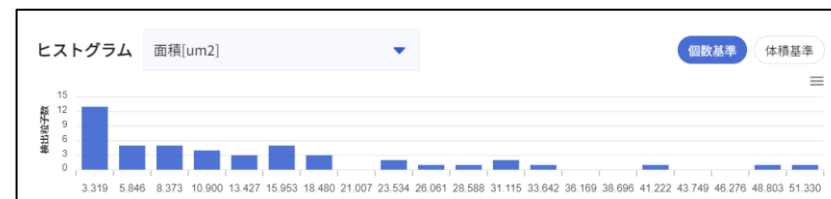


結果データ

インデックス	面積[um2]	粒子座標X[px]	粒子座標Y[px]	周囲長[um]	円形度 (Simple)	円
0	10.04	787	657	12.1	0.86	0
1	5.9	722	649	14.2	0.37	0
2	0.85	281	577	3.91	0.7	0
3	4.74	784	584	8.34	0.86	0
4	27.72	465	615	21.6	0.75	0
5	4.35	842	551	8.17	0.82	0
6	32.61	645	596	23.2	0.76	0
7	2.69	719	524	7.33	0.63	0

粒子の境界(粒界)が見えない部分がある

わずかな手がかりを元に粒界の位置を予測

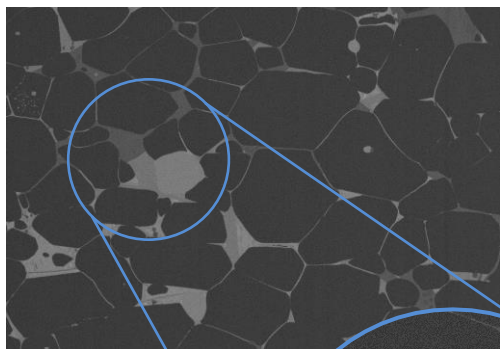


手作業の場合1枚あたり30～60分かかっていた分析が数秒で可能に。



画像の定量化 画像全体からMIで使いやすい特徴的な数値データを抽出

材料画像



結果画像

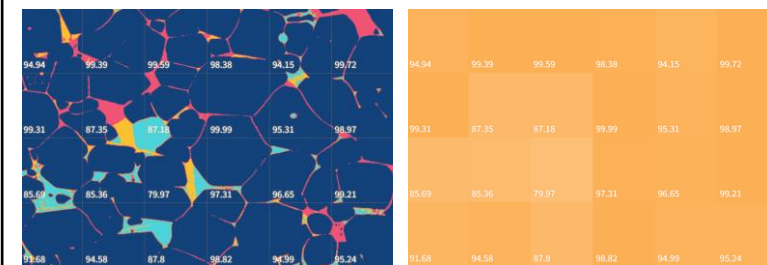


結果データ

各成分のピクセル数と比率

主成分	634358 pixels	(88.6%)
第2成分	40280 pixels	(5.6%)
第3成分	16454 pixels	(2.3%)
第4成分	24792 pixels	(3.5%)

各区画の主成分比率



主成分を含む
4成分の比率や
混ざり具合を知りたい

指定した数の
成分に色分けされる

人による分析結果のブレをおさえつつ、他の材料開発者の視点も取り入れた分析ができる。

Aimを用いた材料開発のイメージ

入力データ

実験結果データ

画像解析の
結果データ

シミュレーション
結果データ

パブリックデータ
文献データ

より客観的なデータ

学習・予測



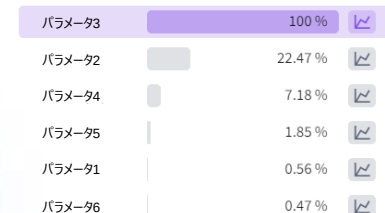
気づき、ひらめき



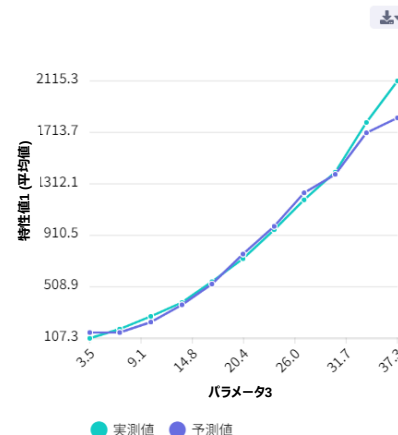
より一般化された解析手法

結果

パラメータの重要度評価 (Feature Importance)



パラメータごとの作業 (Feature Effects)



提案パラメータセット

期待値	パラメータ4	パラメータ3	パラメータ5	パラメータ2
1461.8784977857313	29.9	34.5	26.5	891
2802.677497581408	30.8	35	27.2	1249
2465.527671889241	30.6	35.9	27.1	1154
2847.0608739897625	31.6	35.9	27.6	1263
1422.0589715073747	31.5	36.1	28.2	843
1724.9970999851294	24.6	29.7	22.2	1267
1652.1081739625015	23.8	27.7	21.6	1275

人によってブレの少ない結果

画像から得られたデータも含め、熟練者が培った手順で数値データを解析し、結果を予測できる。

MIの今後の計画

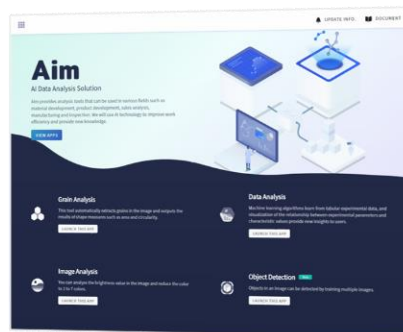
Data generation

Data sharing



Data Storage for Experiment

Data analysis



Human resource development

Materials Development Support

ユーザーコミュニティ



MIの仕組み構築、運用の拡大、
定着に向けた活動を継続



Aimの適用範囲の拡大、AI解析技術の内製化



開発活動のDX化

