

News Release

2020年11月10日

株式会社日立ハイテク

化学分野における新製品研究プロセスを効率化するソフトウェア Chemicals Informatics を発売

株式会社日立ハイテクソリューションズ(取締役社長:谷口 昌弘／以下、日立ハイテクソリューションズ)は、化学分野における研究開発プロセスの高度化・高効率化に伴い、このたび付加価値の高い新素材の早期市場投入を支援するソフトウェア「Chemicals Informatics」を発売します。

昨今の化学業界では、グローバル化の加速に伴い新素材の開発競争が激化しています。その中で、化学メーカーを中心とした各企業には、新素材による高付加価値で差別化された製品のいち早い市場投入、そしてその分野における高いシェア獲得が求められています。一方で、一つの新素材の開発には十年単位の期間、数十億から数百億円の費用がかかることも珍しくありません。このような課題に対して、大量のデータ解析によりルール・法則性などの有用な情報を見出すデータマイニングや人工知能(AI)などの情報科学技術を用いて研究者を支援し、研究開発を高度に効率化する「マテリアルズ・インフォマティクス」が近年注目されています。

このたび日立ハイテクソリューションズが開発した **Chemicals Informatics** は、これまで研究者たちの経験と知恵をもとに膨大な時間をかけて探索・研究されてきた新素材の開発において、開発期間の短縮、開発コストの低減を実現し、研究開発の高効率化を支援します。Chemicals Informatics には、主に以下の特長があります。

1. 研究者の新発見を助ける掛け合わせ探索手法

DNA の掛け合わせと突然変異による生物進化のメカニズムを模倣した独自の AI プログラムによる探索手法を用いることで、既存製品にとらわれない新たな領域の素材や化学物質、代替材料などの有望化合物を探索し、効率的に発見することが可能となります。

2. 新たなアイデアを生む膨大な化合物データベース

掛け合わせ探索では、異分野も含めた幅広い領域のデータから化合物を探索することで、目的に沿った特性をもつ未知の有望な化合物を生み出せる可能性も大きくなります。独自の **NLP(Natural Language Processing)^{*1}** 技術を用いて蓄積した一億以上の化合物・論文・特許などの膨大なデータと独自の新規化合物生成 AI によって生成された新たな化合物を含むデータベースが研究者の皆さまの研究開発を支援します。

3. 研究開発の高効率化を支える高いセキュリティと安定性

探索に用いる AI 解析インフラには、高度なセキュリティと安定性を備えた自社プライベートクラウド **ayamo** 上に、高い計算処理能力をもつ米国企業 **NVIDIA** の GPU^{*2} を搭載し、膨大な計算量を高速かつ安定的に処理し、研究開発における生産性向上に貢献します。また接続には **SSL-VPN^{*3}** 通

信を用いることで、利用者が安全かつ容易に接続できる仕組みを採用しています。

日立ハイテクソリューションズは、製造業に関する深い知見とグローバルなビジネス探索力で、お客様の業務プロセスを高度化するソリューションを長年にわたり提供してきました。近年急速に AI 技術が進歩する中、ビジネスの現場でいち早く活用可能な製品へ落とし込み、ラインアップを充実させることで、お客様の飛躍と成長をお手伝いする付加価値の高いサービスを提供してまいります。また今後、株式会社日立製作所の「材料開発ソリューション」^{*4}と連携し、化学業界における研究開発から製造までの幅広い工程でデータ活用ソリューションを提供することで、お客様のデータから価値を創出するデジタルマイノベーションを推進してまいります。

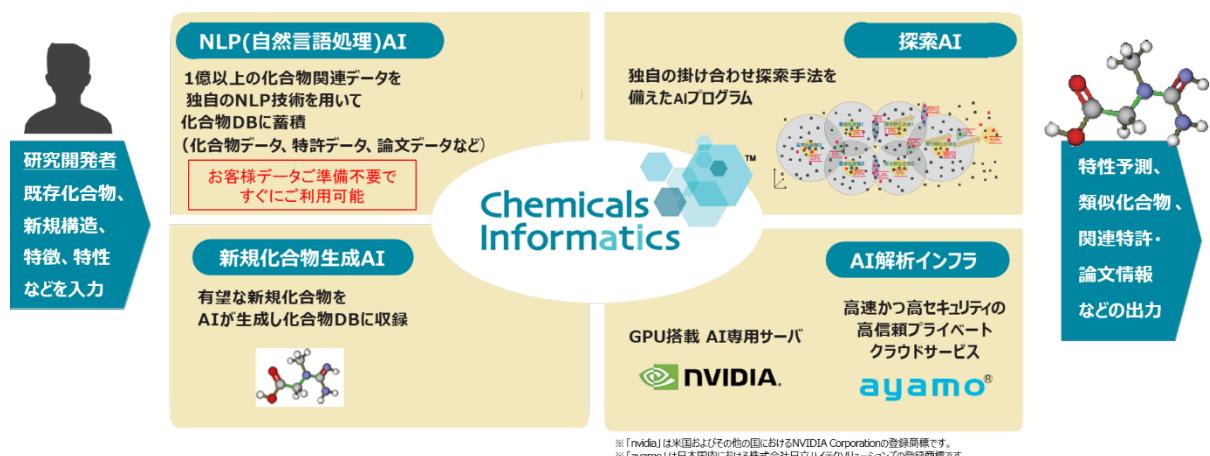
今後も、日立ハイテクグループは AI や IoT 活用による自動化や生産性改善といったモノづくり企業の課題解決に貢献するソリューションの提供に取り組んでまいります。

*1 NLP(Natural Language Processing): 自然言語処理。パソコンやスマートフォンなどのかな文字変換にも用いられている解析技術で、人間が使う言語をプログラムが人間と同じように意味、区切りごとに正しく認識する。

*2 GPU(Graphics Processing Unit): NVIDIA が提供する、高度な画像処理を行うためのプロセッサ。1999 年、同社が世界で初めて開発した。高度な並列演算性能を備えた点が特徴で AI(ディープラーニング)や科学シミュレーションに活用され、近年では、世界を認識して理解できるコンピューター、ロボット、自律走行車などの頭脳として機能している。

*3 SSL-VPN(Secure Sockets Layer virtual private network): WEB ブラウザのみでインターネット上の送受信を暗号化する技術で、仮想的なプライベートネットワークを構築することにより、インターネット上の安全な通信を実現できる。

*4 材料開発ソリューション: 日立のデジタルトランスフォーメーションを加速する Lumada ソリューションのひとつ。AI などデジタル技術を活用し、多様な材料データを分析することで材料開発の指針を見出すマテリアルズ・インフォマティクスにより、材料開発の高度化を支援するサービス。 <https://www.hitachi.co.jp/Prod/comp/app/mi/index.html>



【Chemicals Informatics 概要イメージ】

<日立ハイテクソリューションズ 取締役社長 谷口 昌弘氏のコメント>

弊社が長年蓄積してきた製造業への知見と AI テクノロジーに関するノウハウを、Chemicals Informatics として研究開発者の皆さまへ提供できることを大変喜ばしく思っております。Chemicals Informatics はさまざまな化学物質の研究開発プロセスを加速するのみならず、未知の有望な化合物の発見を後押しする可能性を秘めた革新的な製品です。Chemicals Informatics は自社の特長ある独自クラウドと、AI 解析コンピューターとして、世界中の AI 研究機関で採用が進む NVIDIA 社

の製品を活用することで、安全に高速かつ安定した処理を実現可能にしています。弊社は本製品を通じ、お客様の新たな価値創造をサポートすることで、社会に貢献してまいります。

< NVIDIA 日本代表 兼 米国本社副社長 大崎 真孝氏のコメント >

NVIDIA は Chemicals Informatics のリリースを心より歓迎いたします。Chemicals Informatics のプラットフォームとしてご採用いただいた NVIDIA DGX システムは、革新的な NVIDIA V100 Tensor コア GPU を搭載し、トレーニング時間を大幅に短縮する優れたディープラーニング基盤です。NVIDIA の最先端 AI システムが支える Chemicals Informatics が、化学研究プロセスの高効率化に貢献することを期待しております。

■ Chemicals Informatics に関するウェブサイト

<https://www.hitachi-hightech.com/hsl/products/ict/cloud/ci>

■ お問い合わせ先

株式会社日立ハイテクソリューションズ

ICT 事業統括本部 IT プラットフォーム本部

デジタルイノベーション部 パートナーグループ [担当: 黒川、堀内]

〒105-6412 東京都港区虎ノ門一丁目 17 番 1 号虎ノ門ヒルズ ビジネススター

電話: 03-3504-7773 (代表) Mail: hsl_ict_marketing.dg@hitachi-hightech.com

■ 報道機関お問い合わせ先

株式会社日立ハイテク CSR 本部 CSR・コーポレートコミュニケーション部 [担当: 西川]

〒105-6409 東京都港区虎ノ門一丁目 17 番 1 号虎ノ門ヒルズ ビジネススター

電話: 080-9207-5949 (直通)

以上