

デジタルアニーラ×HPC×AI で実現する Computing as a Service (CaaS) 材料開発応用

(富士通¹) ○實宝 秀幸¹

Use cases of material development using Computing as a Service with Digital Annealer, HPC and AI (¹Uvance Core Technology Unit, FUJITSU Limited) ○Hideyuki Jippo¹

Use cases of material development application by Fujitsu Computing as a Service (CaaS) are introduced. CaaS consists of Digital Annealer × HPC × AI. In this presentation, we will introduce efforts that can be developed from R&D to mass production, such as material optimization for molecular and mixture design, feature extraction from measured spectra and images, fusion of material search and product design, and yield improvement through the control of material property variation.

In the material optimization, the stable structure of the molecule was able to be searched in high speed and precision by the fusion of Digital Annealer and HPC. In addition, it has become possible to design mixtures in response to data shortage problems. In the feature extraction, a regularization technique was developed to extract minute differences in measurement spectra such as X-ray and IR. As a technology to eliminate bottlenecks in design and mass production, we developed a combination technology of mixture design and CAE, and a robust optimization technology considering manufacturing variations.

Keywords : Molecular Design; Mixture Design; Feature Extraction; Robust Optimization

富士通が提唱する Computing as a Service (CaaS)による材料開発応用事例を紹介する。CaaS はデジタルアニーラ×HPC×AI で構成される。本講演では、分子設計や混合物設計などの材料最適化、計測データや画像データからの特徴量抽出、材料探索と製品設計の融合、材料特性ばらつき制御による歩留まり改善など、研究開発から量産まで支援する取り組みを紹介する。

材料最適化では、デジタルアニーラによる粗視的探索と HPC による微視的探索を融合して、高速かつ精密に分子の安定構造を探索できた。また、実際の開発現場で頻出のデータ不足問題に対応した混合物設計が可能となった。特徴量抽出では、X 線や IR などの計測スペクトルにおいて、材料や製造条件に起因する微小な差異を抽出する正規化技術を開発した。設計や量産現場で発生するボトルネックを材料の観点で解消する技術として、混合物設計と CAE の連成技術、および製造ばらつきを考慮したロバスト最適化技術を開発した。本講演では事例を中心に紹介する。

