

材料化学業界の先進企業、 出光興産がマテリアルズ インフォマティクスを活用し、 プロダクトイノベーションを加速

「マテリアルズ インフォマティクスの能力と研究開発スタッフによる活用の両方を向上させることは、戦略的に重要であり、より広範なデジタルトランスフォーメーションのビジョンを実現するために不可欠です。エンソートは、私たちの目標達成を支援してくれる貴重なパートナーです。」

先進マテリアルカンパニー リチウム電池材料部
次長 草場 敏彰 氏

出光興産のR&Dデジタルトランスフォーメーションへの道

プロジェクトを開始したとき、出光興産にはすでに大手OEMと共に製品開発をしてきた100年もの歴史があり、循環型社会への取り組みを示すため、カーボンニュートラルな新製品を市場に投入しようとしていました。同社は、世界で最も革新的なエネルギー材料メーカーの1社として、IP生成を加速し、製品をより早く市場に投入するためにデジタル変革が不可欠であるとの認識を持っていました。出光興産において、中長期的な研究開発を推進し、企業の目標とイニシアチブを推進する中心的な役割を果たしていたのは先進技術研究所の企業研究グループで、複数のビジネスユニットと連携していました。

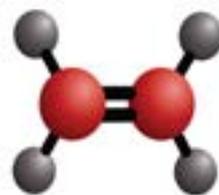
出光興産はデジタルトランスフォーメーションパートナーとしてエンソートを採用した際に、どこから始めるべきかということについて重要な決定を下しました。それは、最初のステップとして自社の開発チームに投資することです。



科学者から変革をスタートする

本質的な変革を起こすには、サイロ化されていないスキル、つまり、データサイエンス、ソフトウェアエンジニアリング、およびドメインの専門知識間の緊密な連携が必要です。科学者とエンジニア自身が新しいデジタルスキルを習得し、データ文化に順応し、ラボとビジネスにデジタルイノベーションをもたらす力を得る必要があります。

上級科学者の深い専門知識に基づいて構築することと、次世代の科学者がデジタルによる進歩を最大限に活用するために必要なスキルを確実に身に付けられるようにすることは、変革の基礎を築くための分かりやすい出発点です。



エンソートのマテリアルズ インフォマティクス ・ アクセラレーション

出光興産における研究開発のデジタルトランスフォーメーションの詳細については次ページをご覧ください。

プログラム

先端技術研究所グループの科学者チームは、社内のデジタル研究開発能力を構築するために、エンソート独自の[マテリアルズ インフォマティクス アクセラレーション プログラム](#)に参加しました。エンソートの伴走型パートナーシップにより、チームは実際の社内課題に取り組むことでデジタル スキルを開発し、価値のあるマテリアルズ インフォマティクス (MI) ソリューションを作成しました。

6 か月の MI トレーニングおよび実習プログラムでは、将来のデジタル R&D リーダーが育成され、出光興産でより広範にデジタル文化への変化を促進するコミュニティが作成されました。参加者は、機械学習と AI を使用して R&D イノベーションを加速するデータ駆動型の意思決定支援ツールを構築するプログラムを修了しました。

「研究者がマテリアルズ インフォマティクスの基礎となるスキルを迅速に習得し、それを実際の問題に適用したことに非常に感銘を受けました。エンソートの MI アクセラレーション プログラムにより、自社の研究開発プロセスよりもはるかに迅速に研究開発プロセスを改善することができました。」

先進マテリアルカンパニー 技術戦略部 戦略企画室長 水野 洋氏

従来の研究におけるマテリアルズ インフォマティクスの活用

エンソートのアプローチの一環として、出光興産は、研究者の学習チームがガイドを受けながら取り組むことのできる、重要かつ解決可能な課題から始めました。チームは、炭素利用のための新しい触媒を探す際に共通の課題に直面しました。それは、時間とリソースを大量に消費する従来の探索的研究方法とプロセスの非効率性です。

炭素利用のための新しい触媒を開発する場合、従来の実験室規模の実験は非常に手間と時間がかかり、候補物質の数は事実上無限です。初期段階の探索的研究は通常、試行錯誤によって推進され、進行が遅くなります。古いデータを手動でレビューし、候補リストをまとめ、実験計画を作成して実行するには、専門家の多くの時間が必要です。

マテリアルズ インフォマティクス ソリューションで戦略的研究領域における新規材料探索を加速

[マテリアルズ インフォマティクス推進プログラム](#)を通じて、出光興産の研究者は、過去の実験データを整理し、計算化学データを自動生成し、オープン データベースを活用し、機械学習と AI を利用して、ラボでの候補分子の選択と実験を支援する独自のソフトウェア ソリューションを作成できるようになりました。

出光興産は、社内で開発した新しいマテリアルズ インフォマティクス ソリューションの効果をすぐに実感し、予定より数週間早くプロパティ パフォーマンス目標を達成したことで、競争の激しい新材料開発分野で一步前進することができました。来年には、MI ソリューションによって数か月の労力が節約されると予想されます。



お問い合わせ : info@enthought.com