

人工知能が研究開発をする 未来の世界での評価技術

AlphaGo™ が囲碁の世界チャンピオンを破って、人工知能（AI）が人間を超えたと世界に衝撃をもたらして以来、世の中、AI が花盛りである。AI は破竹の勢いで様々な分野に進出し、人間から着実に職を奪っている。研究の世界でも、データ駆動型研究開発がもてはやされ、DX（デジタルトランスフォーメーション）だの、データ駆動だの、MI（マテリアルインフォマティクス）、PI（プロセスインフォマティクス）といった言葉を聞かない日がない昨今である。DX 化に力を入れている企業では、数百人もの研究者が、数百件もの DX 型研究テーマを推進している。一方で、乗り遅れた企業は「わが社は DX の取り組みに遅れているんです」とあたかも会社存亡の一大事と言わんばかりである。

本当に AI は研究の世界に破壊的イノベーションをもたらすのだろうか？本稿では、データ駆動型材料開発の現場を事例にして、AI の本質を考えながら、AI を用いた材料研究と計測技術の未来予想図を大胆に描いてみたいと思う。

AI とはなんですか？と聞かれたら、私は入力情報を出力情報へ変換するツールですと答える。通常、AI 材料開発において入力、物質の構造（分子構造、組成等を数値ベクトルに変換して入力）であり、出力はターゲット物性である。公開データベースなどで構造—物性変換を学習した AI が、未知な物質構造の特性を予測するというのがスタンダードな手法である。この方法は、構造が一意に定義できる、分子、結晶などには有効であるが、構造が不定の我々の身の周りにある複合材は、構造—物性データベースも存在しないため、AI が扱う対象と成り得なかった。

しかしながら、最近、SEM（走査電子顕微鏡）画像等の評価構造データを AI の入力情報とすることで、構造が不定な材料の物性を予測する手法が開発された¹⁾。そこでは、材料の組成、製造プロセスを入力情報として、AI が SEM 画像等で構造を構築して、さらにそこから複数の物性を予測する。素材選定、製造、物性評価といった一連の実験をすべてコンピューター上で仮想的に再現することができ、通常であれば数年間かかる莫大な実験をたかだか 1 時間で仮想的に実行してしまう。着目すべき点は、評価技術による構造データが公開されている構造—物性データベースのかわりを担っていることである。

このように評価技術ドリブンの AI を活用すれば、原理的に世の中に存在するすべての材料が、人工知能を用いた研究対象と成り得る。さすれば、材料開発は評価技術ドリブンの AI による仮想実験に置き換わるのであろうか？そんなことはないとは私は考えている。所詮、AI の予測は、本質的に統計処理なので、学習された実験空間の範囲内でのみ予測を行うことができる。内挿は得意でも外挿はできず、最適化はできても発見は苦手である。実は人工知能のモデルを開発した人が経験する壁は、良く練られた実験系—人工知能のモデルを作成しないと意味がある予測はできないことにあり、良く練られたモデルを構築するためには、人間が先回りして人工知能の予想を予測する必要がある。これでは本末転倒と言わざるを得ない。

しかし AI は組み合わせこそ、その真の実力を発揮すると私は考える。AI は本質的にジグソーピースを組み合わせるがごときにいとたやすく、並列にも直列にも、縦横無尽に組み合わせることができる（マルチモーダル AI）。例えば画像認識で人間の顔や表情を AI が認識し、音声認識で声をテキストに変換しつつ、トーンから機嫌を予測し、記憶情報とテキストが AI で解析されて意味付けされ、統合 AI がすべての AI の出力を組みあわせて総合判断を行うことで、人間のように振る舞うロボットが開発されている。材料研究の世界で、まだマルチモーダル AI の報告例はないが、必ず未来において実現する技術であると確信している。このように人工知能の使い方には無限の可能性があると見える。複数のネットワークが組み合わさってインター

ネットが形成された時に大きな社会変革を生み出したことを考えると、マルチモーダル AI が非常に大きなインパクトを研究にもたらす可能性は大いにあり、その時、評価の世界に、チェンジゲームのプラットフォームビジネスが出現することを私は予想する。

ここで、世の中のあらゆる AI をつなぎ込み可能なインターフェースをプラットフォーム AI として想像してほしい。インターフェースを介して、前段には材料の組成を入力として、SEM, TEM (透過電子顕微鏡), ラマン等の計測データを出力とする評価技術 AI 群 (各装置メーカーの装置ごとに) が接続されており、後段には計測データから物性を予測する複数の AI が繋がっている。プラットフォームのユーザーが扱う材料系と予測したい物性を入力すると、AI が用いるべき AI 群を選別する。さらには、AI の学習用データ取得用の試料の組成・製造条件等が AI により指定され、装置メーカーが実際の評価データを提供する、このようにして、AI をまったく知らないユーザーが、簡単に自分専用のカスタマイズされた AI モデルを構築することができ、材料開発をコンピューター上の仮想実験で高速に行うことが可能になる。

評価装置メーカーがこのプラットフォームを実現すれば、装置のハード売りの事業から、サービス主体の事業へと事業形態を変換できる、大きなビジネスチャンスが訪れる。プラットフォームのサブスクリプションでの売り上げのみならず、専門 AI モデル構築のコンサルティング業務、学習用データの委託販売、等々、様々な新しいビジネスの機会が考えられる。このように AI と評価技術はとても相性がよく、これから大いに成長する分野であると私は考える。

文 献

- 1) T. Honda, S. Muroga, H. Nakajima, T. Shimizu, K. Kobayashi, H. Morita, T. Okazaki, K. Hata : *Commun. Mater.*, **2**, 88 (2021) .

著者紹介

東京大学工学系大学院物理工学科卒業後、筑波大学先端学際領域研究センター勤務を経て、「社会の役に立つ研究をしたい」との思いを胸に、ハーバード大学の Charles Lieber 研究室でナノテクの研究に従事。2003年に産業技術総合研究所に入所し、2004年には高効率なCNTの合成法であるスーパージグロース法を開発した。現在はナノチューブ実用化研究センター研究センター長として、CNTの実用化を推進し、日本発の産業の創出を支援している。

略 歴

1995年 日本学術振興会 特別研究員
1996年 筑波大学先端学際領域研究センター物質工学系勤務 文部教官・助手
1998年 科学技術振興事業団勤務 (CREST) ポストドクター
2001年 ハーバード大学化学系生物学科 Charles Lieber 研究室 ポストドクター
2003年 産業技術総合研究所 ナノカーボン研究センター ナノカーボンチーム 主任研究員
2005年 産業技術総合研究所 ナノカーボン研究センター ナノカーボンチーム チーム長
2008年 産業技術総合研究所 ナノチューブ応用研究センター
スーパージグロースCNTチーム チーム長
2010年 産業技術総合研究所 ナノチューブ応用研究センター 上席研究員
2013年 産業技術総合研究所 ナノチューブ応用研究センター 首席研究員
2015年 産業技術総合研究所 ナノチューブ実用化研究センター 研究センター長

主な受賞歴

1999年 日本表面科学会論文賞 (共著)
2000年 日本MRS奨励賞
2000年 応用物理学会講演奨励賞
2005年 nano tech大賞2005 材料・素材部門
2007年 平成19年度文部科学大臣表彰若手科学者賞
2008年 第18回つくば奨励賞 (若手研究者部門)
2010年 第6回日本学士院学術奨励賞
2010年 第6回日本学術振興会賞
2016年 第14回産学官連携功労者表彰 選考委員会特別賞
2016年 平成28年度全国発明表彰21世紀発明奨励賞
2016年 平成28年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 開発部門

