

AI を活用した材料開発における我が国の取り組み

～NIMS を例として～

(研) 物質・材料研究機構 (NIMS)
統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)

出村雅彦

引用例：出村雅彦、”AIを活用した材料開発における我が国の取り組み～NIMSを例として～”第70回白石記念講座「AI（人工知能）、ビッグデータが拓く鉄鋼の未来を考える」（日本鉄鋼協会編, SMS-ISIJ 70, ISSN: 1344-0942）, vol. 70, pp. 25-42, 2018年11月26日

第70回白石記念講座
2018年11月26日
一般社団法人 日本鉄鋼協会
ISSN: 1344-0942



1. はじめに

材料の分野でも、AI への関心が高まっている。2017 年暮れ頃から、日刊工業新聞や日経産業新聞などの紙面に、素材産業による AI 活用が活発化しているという内容の記事が掲載されるようになった。筆者が見聞きする範囲でも、関心の高い企業の間では、AI を使う、使わないではなく、どう使うのかへと関心が移ってきている印象だ。一例を挙げよう。物質・材料研究機構（NIMS）は情報統合型物質・材料開発イニシアティブフォーラムという一般向けのマテリアルズ・インフォマティクスのイベントを 2015 年より開催している。企業からも多数参加がある人気のイベントであるが、来場者にマテリアルズ・インフォマティクスの印象を聞くアンケートをとっている。2016 年 9 月では「実用化はまだまだ」、「脅威」という回答が過半数だったのが、2017 年 2 月に「脅威」が減り、そして 2018 年 2 月では「実用化はまだまだ」も大幅に減って、「使えそう」という回答が過半数の一位という結果となった。2 年前までは、AI 活用の実態がよく分からないため、脅威に覚えつつも実用化はまだ先だろうという認識が大半占めていたのが、この 1 年半の間に使えそうという感触が広がってきている。材料分野における AI 活用の好例が出てきたこと、特に、企業内での AI 活用が広がりつつあることを背景としているのであろう。2017 年を後からで振り返れば、AI を活用した材料開発という新しい流れにとって、大きく潮目の変わった一年という評価になるかもしれない。

本稿では、AI を活用した材料開発手法の刷新について、材料分野の公的研究機関として NIMS が、実施している取り組みを紹介したい。AI 活用は、材料分野にとっては未踏領域であり、また、材料と情報、計算の境界領域でもあるので、NIMS 単体で取り組めるものではなく、様々な大学、研究機関と連携して進めている。当該領域の成果は、単なる手法刷新にとどまらず、我が国の素材産業に破壊的な影響を与える可能性を秘めている点で、産業界、大学と連携して、総力を挙げて取り組むべき分野であると考え。本稿が、その契機となれば幸いである。

2. 三つの MI

AI を活用する場合に、すぐに思い浮かぶのは、ビッグデータを深層学習などの AI 技術で解析するというイメージかもしれない。AlphaGo がプロ棋士に勝利したように、科学技術の分野においても、AI によって新たな発見を得ることができるのではないかと期待のもと、Google、IBM をはじめとした国際的 IT 企業の取り組みが活発化している（例えば、岡田らの解説 [1]に、AI を科学に活用す

る動きがよくまとまっている)。AI が素材産業の構造を大きく変えるのではないか、という期待、あるいは、恐れを抱く段階から、AI を使いこなせるかどうかは今後の研究開発力を左右すると考える段階に入ってきている。

しかし、材料分野において、AI 活用はそう単純にはいかない。一番の問題は、材料の複雑さに比して、材料データは必ずしも十分とは言えない点である。

図 1 の上段に、材料の複雑さについて筆者の理解をまとめた。例えば、凝集系固体の場合、元素の組み合わせや並べ方で、電子構造が決まり、それによってその物質の特性が決定される。この段階で、すでに、探索すべき空間は碁や将棋に比べて桁違いに大きい。さらに、物質を材料として使っていくためには、不均一という厄介な問題を扱わなければならない。点欠陥、転位、粒界や相境界、積層欠陥などの面欠陥などの欠陥、複相、析出物等の存在による化学組成の空間的な分配を含み、また、単相であったとしても結晶方位が分散した多結晶状態で使用することが一般的である。これに加えて、繊維等を複合化することで強化を図ることもある。これらいわゆる材料のミクロ組織と呼ばれる階層的な不均一構造が材料には内在し、材料の特性や性能を支配する。そして、物質と材料の複雑さは掛け算となって、扱うべき空間を拡大にしている。

これに比して、材料データは十分とは言えない。材料データをビッグデータ化するのが難しい主な理由は、信頼性の高い材料データは実験によって取得するしかな

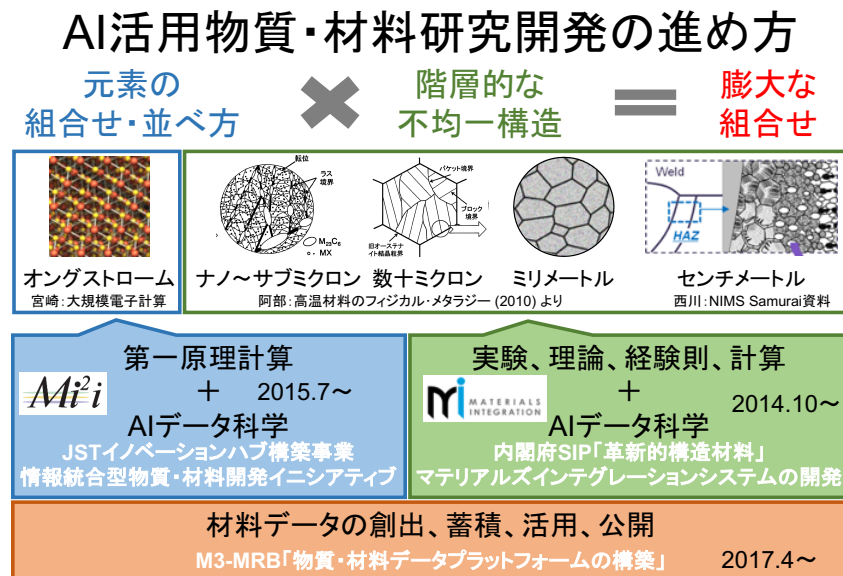


図 1: 材料に AI を活用していくための 3 つのアプローチと対応する NIMS で取り組む公的資金

く、実験にはコストと時間がかかるからである。例えば、NIMS では 40 年以上に渡って実用鋼のクリープデータを取得しているが、全データ行は高々 6000 程度である。日本鉄鋼協会や原子力関係の事業で取得された同種のデータを合わせても、20000 行程度に過ぎない。IT の基準で見るとビッグデータとは言えない（しかし、極めて貴重なデータである）。

現状は、ビッグデータを AI で解析して次々に新しい物質が発見され、材料の実用化が加速するという状況とは言えない。このような中で、どのように AI 活用を進めていくか。

3つのアプローチが考えられる（図1の下段）。これはそれぞれ「MI」と略称できるものであり、ここでは3つのMIとして述べてみたい。

第1のMIは物質探索を対象としたマテリアルズ・インフォマティクスである。主流は順方向の予測ができる計算手法とAIの組み合わせである。特に、第一原理計算と機械学習を組み合わせることで新規の物質を探索するという取り組みが中心である。これは、計算によって材料データを生成するという点で、最新のAlpha Go Zero（対局データを計算で作成し、もはやプロ棋士が積み上げた棋譜データを必要としない）と相似的なアプローチと言える。このほか、最近では、実験とAIの組み合わせで最適化を効率よく行う例や、独自のデータベースとAIの組み合わせで物質を探索する例も登場してきている。

第2のMIは、マテリアルズインテグレーションと呼ばれるアプローチである。材料の実用化を加速するために、プロセス、構造（マイクロ組織）、特性、さらに時間に依存する性能をつなぐための統合的な計算材料工学である。これは、米国でIntegrated Computational Materials Engineering (ICME) と呼ばれるものと近い。AI化を進める上で、計算機上で、プロセスから材料性能を予測する仕組みは不可欠である。

第3のMIは、マテリアルズ・インフラストラクチャーである。材料データをいかに効率よく収集し、また、利活用可能な形で管理していくかという、AI活用の基盤となる取り組みである。

我が国では、この3つのMIのアプローチに沿って、公的資金の投資が進められていると理解できる。図2は、内閣府総合科学イノベーション会議がまとめた科学技術イノベーション総合戦略2017の説明資料から抜粋したものである。物質/材料、及び、材料種別という2つの軸で、統合型材料開発システム、すなわち、AIを活用した材料開発手法の確立に向けた我が国の取り組みが俯瞰されている。3つのMIのどれに対応しているかを、筆者の視点でコメントした（点線で囲んだ部分）。

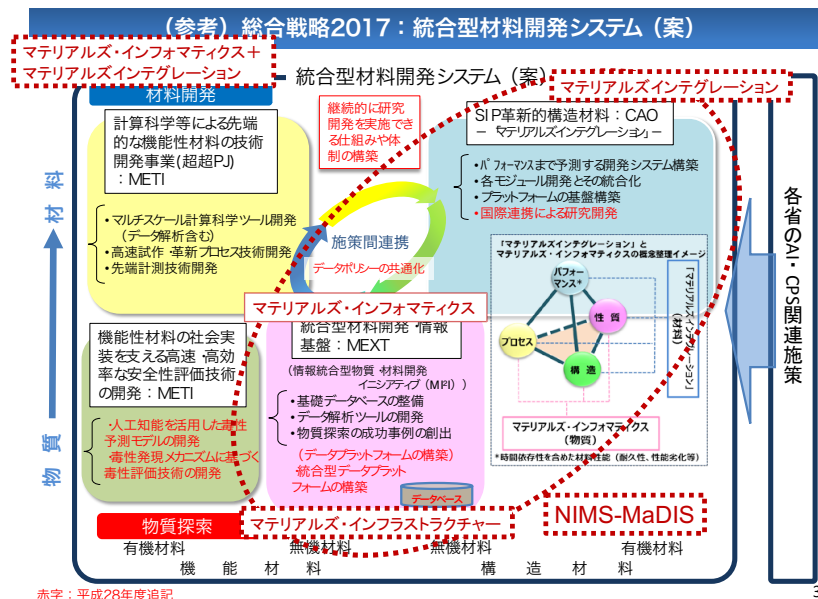


図 2: AI 活用物質・材料研究に向けた我が国の取り組み (科学技術イノベーション総合戦略 2017 説明資料より抜粋)

この 3 つのアプローチは日本固有というわけではなく、図 3 に列記したように、欧米における関連プロジェクトも、同様な、3 つの切り口で整理することができる。

以下では、順に、3 つの MI について、NIMS で行われている取り組み (図 1 下段、図 2 点線楕円で囲まれた領域) を中心に概説する。

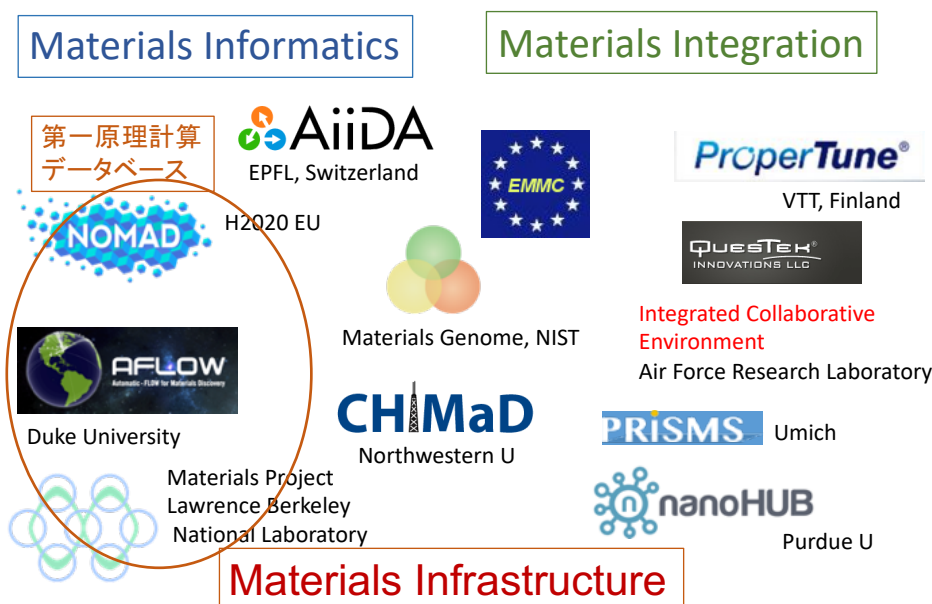


図 3: AI 活用物質・材料研究に向けた欧米の取り組み

3. マテリアルズインフォマティクスの取り組み

凝集系固体の様々な物性は、その電子状態で決まる。従って、電子状態がわかれば、物性についてもかなりの程度、予測できることになる。特に、機能性材料の多くは、電気、熱、光など外場に対する電子状態の変化に起因する物質の応答を利用するものであり、この性質を理解する上で、第一原理計算による電子状態の計算とこれを基盤とする物性予測は、極めて有効な手法となってきた。結晶性材料であれば、元素の組み合わせや並べ方（結晶構造及び原子配置）が決まれば、電子状態を高い精度で計算することができ、そこから物性を予測する順問題の解析が可能となる。

それでは、欲しい機能からそれを実現するための元素の組み合わせ・並べ方を見出す逆方向の解析は、果たして可能であろうか。この挑戦的な課題に挑んでいるのが、JST イノベーションハブ構築事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Mi²i)」(2015 年度開始、5 カ年事業) である。図 4 にプロジェクトの概要を示す。ここでは、マテリアルズ・インフォマティクスという新しい学問領域を立ち上げることを企図して、材料分野特有の情報科学的解析ツール群を開発し、これを実証課題に適用してマテリアルズ・インフォマティクスによる物質・材料開発の好例

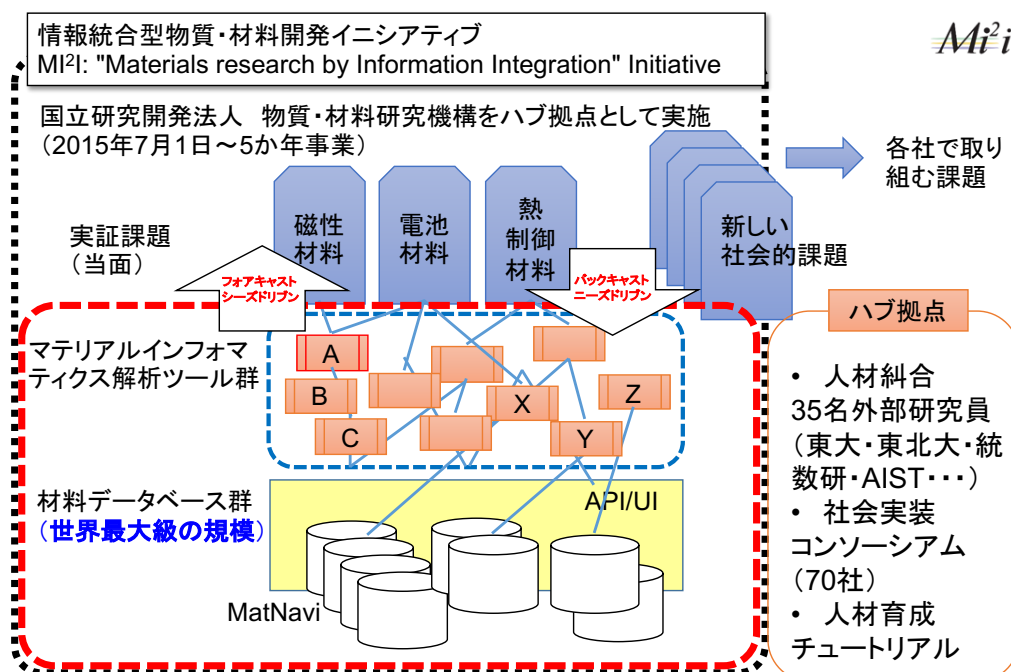


図 4: JST イノベーションハブ構築事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」の概要

を作り出す。さらに、これらの成果を、産業界、アカデミアで広く共有し、NIMS を中核としたハブ拠点を形成することを目的としている。このために Mi²i コンソーシアム（2018 年 7 月時点で約 70 社が参画）を設置・運営している。加えて、この新しい分野の人材を育成するために、幅広くチュートリアルを展開している。材料科学と情報科学との融合を図るため、NIMS の拠点は、クロスアポイント制度等を活用して、東京大学、東北大学、名古屋工業大学、大阪大学、北陸先端科学技術大学院大学、統計数理研究所等の情報科学分野の専門家、及び、当該分野で先駆的な仕事を行なっている材料研究者が糾合する集中研方式で運営されている。

これまでの主な成果の一例を表 1 にまとめた。マテリアル・インフォマティクス専用のツールとしては、先端的な機械学習手法で分子構造を逆解析で設計する iqspr（吉田ら）[2]、AlphaGo でも使用された探索技術を応用した有機化合物生成ツール ChemTS（津田ら）[3]など、特徴的な成果が公表されている。AI を活用した物質探索、設計の例も、最近の 1-2 年の間に、出始めてきた[4-10]。第一原理計算などの順方向計算と AI を組み合わせ、電池材料、熱制御材料などで、従来手法よりも効率的に物質を探索した例が報告されている[5-8]。さらに、最近では、ハイスループット実験と AI（ベイズ最適化法）を組み合わせた例が報告され始めるなど[9]、適用例が広がっている。

興味深い例として、徐らによる文献データと AI を活用した複合材料の設計について紹介する（図 5）[10]。ここでは、新しい断熱材料として界面の熱抵抗を利用するという戦略のもと、界面を構成する組み合わせ候補を選ぶ過程に、機械学習を活用している。特徴的なのは、学習データとして、先行研究の文献群から独自にデータベースを作成して、これを利用している点である。従来は、先行研究や専門分野の知識からそれぞれの研究者が仮説を立てて候補材料を選定し、実験を行い、仮説を修正しながら、より目的に沿った物質を見つけ出すというスタイルが一般的であった。これに対し、今回の例では、先行研究を参考にする際に、論文から抽出したデータに基づいて機械学習モデルを作成し候補材料を選定するという、データ駆動型の新しい研究スタイルを提案している。その結果、従来よりも少ない施工回数で世界最小の熱伝導率を誇るナノ複合材料の設計に成功している。この研究で使用されたデータポイントは 726 点であり、スモールデータであっても、工夫次第で、物質設計に活用できる好例と言えるだろう。

表 1: Mi²i の成果の一例 (NIMS 伊藤聡氏、河西純一氏まとめ)

成果例	研究開発者	タイプ	概要	引用
逆解析分子構造設計ツールiqspr	吉田 Lambard	ツール	分子構造と特性との連関を逆解析することで、分子構造を設計するツールを開発・公開。	[3]
新有機化合物生成ソフトChemTS	津田 Dieb 田村	ツール	モンテカルロ木探索と、深層学習、シミュレーションの組合せにより新たな有機化合物を生成するソフトウェアChemTSを開発・公開。	[4]
安全で高性能な蓄電池用水系高濃度電解質液の開発・実証	袖山	大規模計算の高速化にAIを活用した事例	水分子の集団配置構造が高濃度電解液で大きく変化していることを解明し、水系電解液のリチウム塩を高濃度化することで燃えない安全な電池の可能性を見出し、長期間の充放電が可能であることを実証。	[5]
機械学習により熱流を制御するナノ構造物質の最適設計	塩見	熱輸送計算とAIを組み合わせた事例	ナノ構造の熱輸送を計算する手法とベイズ最適化手法を組み合わせることによって、ナノ構造を最適化する新しい手法を開発し、シリコンとゲルマニウムから構成される材料に適用し、全候補数の数%の数の構造を計算するだけで最適構造を同定できた。	[6]
機械学習により熱電変換性能を最大にするナノ構造の設計を実現	塩見	熱電物性計算とAIを組み合わせた事例	ベイズ最適化と熱電物性計算を交互に実施して膨大な候補構造から熱電変換性能が最大になるナノ構造を高い最適化効率で決定できる手法をグラフェンナノリボンにナノ細孔を導入する問題を例に適用し、パワーファクターの増大と熱伝導度の低減という、一般に相反するものを同時に達成できることを確認した。	[7]
新固体電解質材料の開発・実証	Jalem 中山	ハイスループット計算とAIを組み合わせた事例	Naイオン電池材料のイオン導電性に関するハイスループット計算から、新規電極材料としてバナジウム酸ナトリウムを発見。当該材料の合成と電気化学評価を行い、安定した充放電サイクルが可能な材料特性を確認した。	[8]
熱電材料Al ₂ Fe ₃ Si ₃ の組成比最適化の制御をベイズ最適化によって高速化	高際 Hou 篠原	ハイスループット実験とAIを組み合わせた事例	ベイズ最適化手法をn型Al-Fe-Si系材料の最適組成化に適用し、予測した材料を合成して中温域の出力特性を約40%向上させた。熱電特性へ機械学習を適用し実証した世界初の事例となる。	[9]
超低熱伝導性無機新材料の開発・実証	徐	文献データとAIを活用した事例	新たに提案した界面予測モデルを利用して、2,000種類以上の界面の熱抵抗を予測し、Bi/Si ナノ複合材料が高分子材料並みの低熱伝導性を有し、材料物性や化学的安定性をも満足することを実証した。	[10]

機械学習を活用した世界最小熱伝導率ナノ複合材料の設計と実験検証

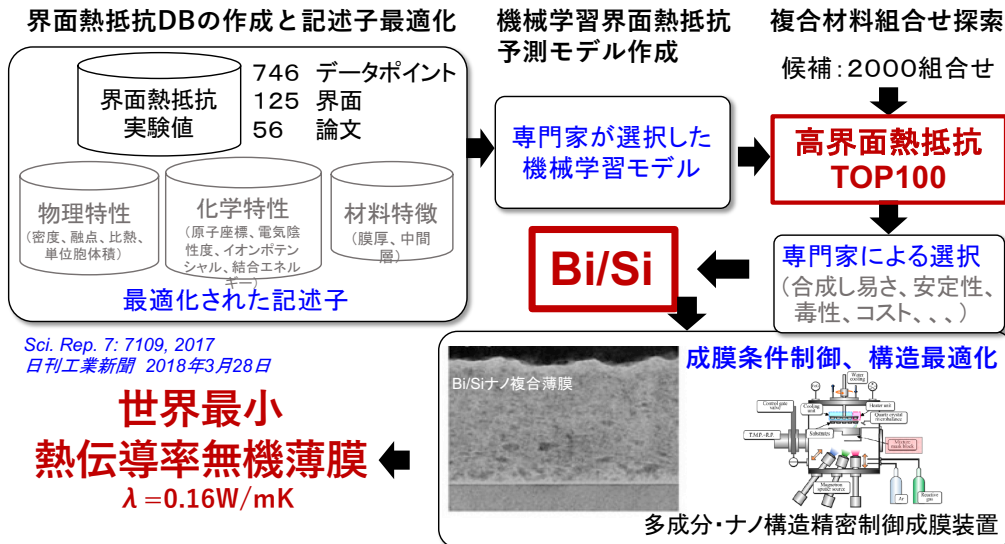


図 5: 先行研究データと機械学習を活用した世界最小熱伝導率ナノ複合材料の設計(提供: 徐一斌氏)

Mi²i 事業は 2019 年度が最終年度である。現在は、マテリアルズ・インフォマティクスの好例を物質の合成にまで広げながら積み重ねていくピーク作りを続けながら、当該分野が新たな学問として広がっていくべく、裾野を広げる活動にも力をいれている。本事業は、イノベーションハブ拠点を構築することが目的であるので、当該分野の研究をリードしていくために、NIMS として体制構築を急いでいるところである。2017 年 4 月に、NIMS 内の当該分野の人材、セクターを糾合した、統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) を設置したのも、その一環であり、当該事業を進める拠点も明確に位置付けられている。

4. マテリアルズインテグレーションの取り組み

マテリアルズインテグレーションは、内閣府 SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「革新的構造材料」（2014 年度開始、5 年間事業）において提案された概念であり、東京大学・NIMS を中核機関として開発が進められてきた（以下、SIP-MI と呼ぶ）[11-13]。材料工学の 4 要素、プロセス、構造（ミクロ組織）、特性、性能の連関を計算機上でつけていくことで、プロセスから性能を一貫予測することを目指している。材料の複雑さに対応していくためには、様々な計算手法を自在に組み合わせる必要がある（図 6 上段を参照のこと）。このため、図 6 下段にあるように、実験データ、理論式、経験式、数値シミュレーション、データベースをモジュールとして組み合わせて、プロセスから性能を予測するためのワークフローを構築するというのが、基本的な構想である。SIP-MI では、鉄鋼溶接部の疲労、クリープ、水素脆性、脆性破壊を例題に、モジュール、ワークフローを開発し、並行して統合システムを開発して、ここに開発したモジュール・ワークフローを実装するという流れで、プロジェクトが進んでいる。SIP-MI の開発内容については別原稿にて解説される予定なので、ここでは、ワークフローという考え方と AI との関係について、概説するにとどめる。

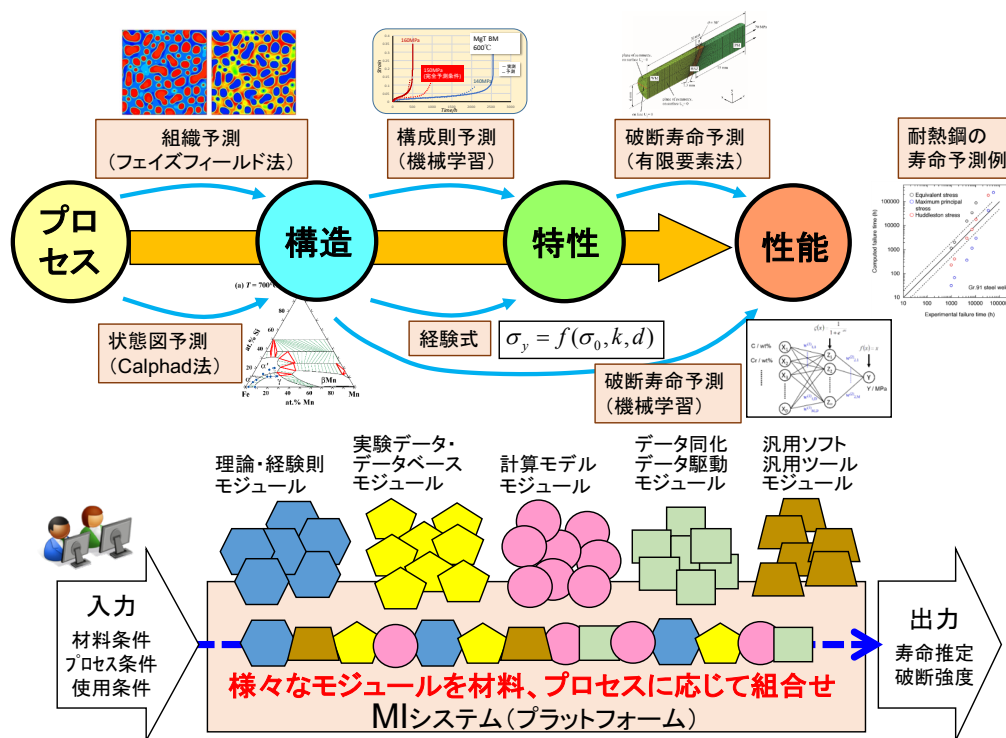


図 6: SIP におけるマテリアルズインテグレーション開発の概念図

図7は、耐熱鋼溶接管のクリープ損傷寿命を予測するためのワークフローの一例である。部材形状、溶接条件、化学組成、初期組織を入力して、最終的には寿命と損傷箇所を出力として得ることができる。溶接の条件を、溶接を模擬するモジュール入れることで最高到達温度の空間分布を計算し、これをもとに組織を計算して、適切なモデル化を経て、細粒熱影響部、溶金部、母材部へと粗視化する。さらに、各部に対してデータベースからクリープ特性を付与し、これらを部材形状に組み込んだ有限要素解析モデルを作成し、最終的にクリープ損傷解析を行うモジュールへ渡すことで、複雑な溶接部を有する耐熱管のクリープ寿命や損傷箇所を推定することができる。

このように、複数の計算モジュールを組み合わせたワークフローによって、プロセスから性能を予測することが可能となる。一度、ワークフローが設計されると、同じ入力から出力を得るモジュールを入れ替えて、計算を高速化したり、詳細化したりすることができるようになる。例えば、有限要素計算という負荷の高い計算を、実験データや過去の計算データからの統計モデルで置き直すことで、高速化するのも有効だろう。このようにモジュールを入れ替えていく際には、最終的な目的関数に対する影響度の高いモジュールを優先的に開発することで、全体として開発の効率化を図ることができるようになる。

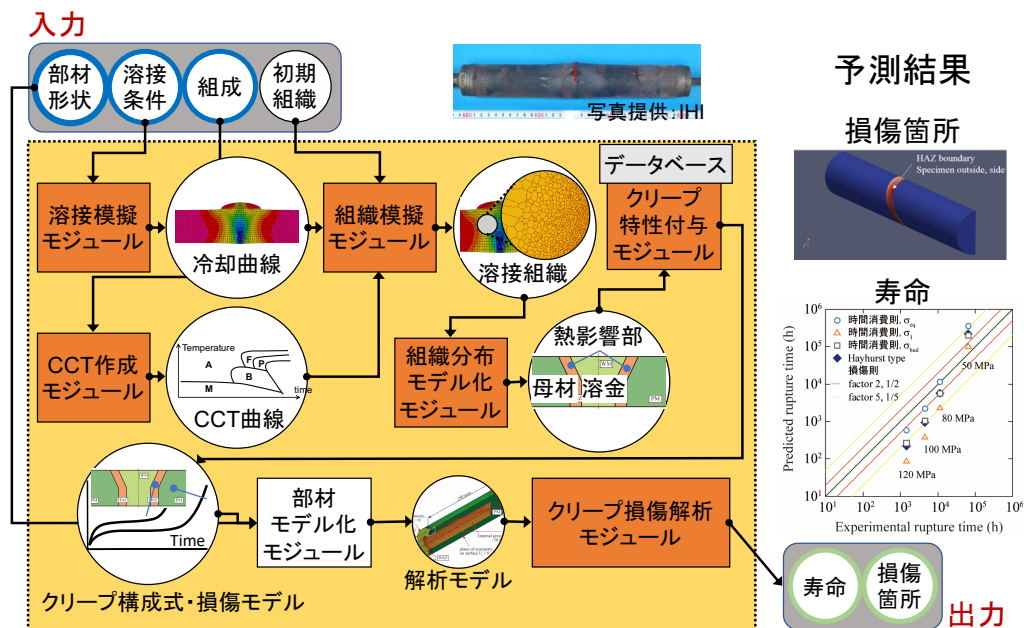


図7: 耐熱鋼溶接管のクリープ損傷寿命の予測のためのワークフロー

SIP-MIにおいても、AIは重要な役割を果たす。一つには、ワークフローの精度を評価する手法としてのAI技術である。他にも、計算済みデータを使った統計モデル作成による高速化でもAI技術が使われることになる。また、材料定数を推定する際にもデータ同化と呼ばれるAI技術は有効である。材料ミクロ組織を扱う多くの物理モデルが現象論であり、材料定数を含むモデリングとなっていることが一般的であることから、データ同化技術は大変重要と言える。さらに、スパースモデリングというAI技術を用いることで、ワークフローの各モジュールを開発する場面において、説明性の高いモデリングが可能となる。

ワークフローは見方を変えたと、単に、計算のための手順ということにとどまらない。ワークフローは、当該分野の専門家が、プロセスから性能までの連関をつけるために、これまでの知識を動員して作成したものである。従って、専門家の考え方を見える化したものと言える。ワークフローが蓄積され、検索できる技術が搭載されることで、その分野の初心者であっても、専門家の知識を活用できることになる。このようなネットワーク状の連関を蓄積し、検索する上ためにも、AI技術は活用される。

さらに、ワークフローが確立して順方向の計算ができるようになると、順方向計算を多数行うことで、逆方向の解析が可能となる。実用材料における逆問題解析技術は今後の課題であるが、マテリアルズ・インフォマティクスで開発した様々な効率的探索のためのAI技術が使用できるようになってくるだろう。

5. マテリアルズインフラストラクチャーの取り組み

Mi²iの取り組みでAI活用による材料研究の好例（表1、図5）が積み重ねられ、SIP-MIの研究開発で複雑な材料課題へのシステム的なアプローチの有効性（図6、7）が見えてくると、改めて、このような応用を念頭にした材料データの重要性が認識されるようになってきた。この認識を背景に、2017年4月から、NIMSにおいて物質・材料データプラットフォーム構築のための交付金事業が開始された。これは、M3（エムキューブ）と称する新しい交付金事業の一面を担うマテリアルズ・リサーチ・バンク（MRB）の主要な取り組みとして進められている。なお、本事業は文部科学省のデータプラットフォーム構築事業として位置付けられていることを付記しておく。

図8に材料データプラットフォーム構想の概念を示す。ここでは、材料データを効率的に収集する技術、AI活用や来歴管理のための材料データの蓄積技術、さらには、出版を含めたデータ流通の仕組みを開発し、材料データを活用した新しい材

料開発を支える基盤の構築を目指している。

材料データを効率的に収集するために、我々は、日々生み出されているものの、利活用されていないデータに着目した。一つは実験・計測データであり、もう一つは文献データである。順に説明していきたい。

まず、実験・計測データについてである。例えば、NIMS には 800 名近い研究者が、日々の研究の中で様々な実験・計測を行い、質の高い材料データを生み出している。それらの多くはデジタルデータという形をとっており、各研究者が各自のパーソナルコンピュータに接続された記録媒体に保管し、管理することになっている。これら実験・計測データは、当初の目的の研究に使用され、例えば、論文として結実した後は、各研究者管理の記録媒体に保存されたまま、再び、利活用されることはほとんどない。アカデミアにおいては、多くの場合、論文という形で役割を果たし終えたデータは、(適当な猶予期間おけば) 第 3 者が活用するというのに、それほど強い抵抗はないはずである。むしろ、せっかく苦勞してとったデータが、別の形で利活用されるなら歓迎する研究者も多いのではないか。つまりは、利活用することを望まれている高品質な実験・計測データが、日々生み出されては、死蔵されているということになる。これは考えてみると、大変、もったいない事態である。そこで我々は、これらの実験・計測データを利活用するための技術開発を行うこととした。ポイントは、実験・計測データに対して、利活用に必要な情報(メタデータ)を適切に付与し、それらを機械が読める形で保管することにある。その際に、実験者の手間を極力排することが重要であると考え、実験・計測でデジタルデータが取得されたと同時にデータを管理するサーバーに転送され、少なくとも実験・計測機器から読み取れるメタデータは自動で付与される仕組みを構築しようとしている。現在、プロトタイプの開発を行っており、例えば、X 線光電子分光装置からのデータについては計測条件を自動で付与できるようになってきた。今後は、対象の装置を拡大していく。さらに、メタデータのうち実験者が記録するほかに試料に関する情報について、表記の揺れを極力抑えながら、実験を行なっている現場で記録していく仕組みについて、検討を進めているところである。

データを効率的に収集するもう一つの取り組みは、公知情報からの材料データの収集技術の開発である。特に、論文からの材料データの自動収集に力を入れている。材料に関する研究論文は毎年相当な数が出版されており、その数は加速度的に増加している。これまでも、先行研究の材料データを収集してデータベース化する事業が行われてきた。NIMS においては、20 年以上にわたり高分子データを収集してきた PoLyInfo、無機物質に関するデータを収集してきた AtomWork-Adv が、それにあたる。これらは NIMS が運営する世界最大級の材料データベースである MatNavi の中でも、規模の点で主要な 2 つとなっている[14]。これまでは、専門家の手によって収集を進めてきたが、論文数の増加に対応していくためには、機械による自動収集が必要となってくるだろう。そこで、我々は、昨今発展の著しい自然言語処理技術を応用し、これまでの収集ノウハウを十分に活かして、機械による文献からの材料データ収集技術の開発を始めた。現在は、高分子を対象に開発を進めているが、将来的には、様々な材料に展開していく予定である。

上記の取り組みによって、材料データが効率的に収集されるようになると、これらのデータを、使用者の望む形で束ねて提供していくための「システム」が必要となる。このシステムによって、データを収集、管理、提供していく仕組みが達成されることになり、上述のデータを収集する技術は要素技術という位置付けになる。この全体を統括していくシステム上では、要素技術が整合的に動くようにする必要

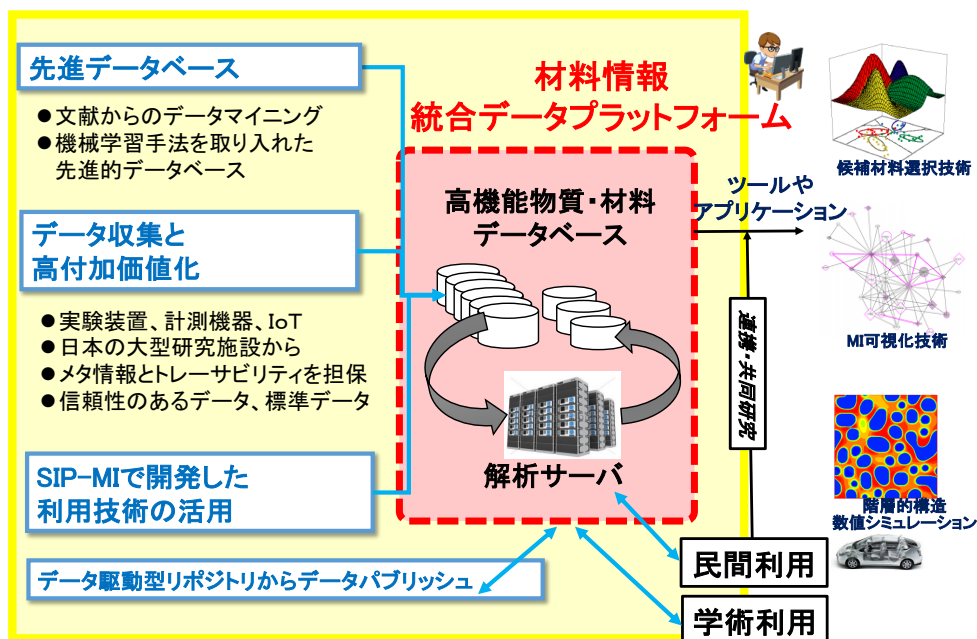


図 8: 材料データプラットフォーム構想の概念図

がある。要素技術は多岐にわたり、既出のデータ収集技術に加え、様々なデータベース、データ利活用のためのアプリケーション（SIP-MIを含む）、メタデータを管理して横断的にデータを収集するための仕組み、データの公開・非公開の制御、セキュリティ確保、データの来歴管理等が、含まれる。それぞれ、かなり挑戦的な課題であり、世界的に見ても、様々な材料データを統一的に扱う基盤を確立しているところはない。2017 年度に概念設計を終え、これからシステムの詳細設計に入るところであるが、様々な試行錯誤が必要となるであろう。ここで開発される物質・材料データプラットフォームが、材料研究にとって不可欠の基盤となるという確信を持って、開発に邁進している。

6. おわりに

AI に材料を作ることができるかと問われることがある。知能という言葉の響きから、そう問いかけたくなる気持ちは十分理解できるが、よく考えると、主体と道具との関係がねじれているようにも思う。

移動を例に考えてみよう。1 日で移動できる距離は、歩けば数十キロメートル、自転車に乗れば 100 キロメートルを超え、自動車では 1000 キロメートルも可能となり、さらに飛行機に乗れば、距離が伸びるだけでなく、陸を走る乗り物ではたどり着けない場所に移動できる。しかし、自転車や自動車、飛行機という道具そのものが、どこかに移動したいと願うわけではない。あくまでも、移動する主体は、人である。

AI も同じである。AI は飛行機のように、これまで材料研究者が馴染んだ数理的手法では見つからなかったデータの構造を我々に示してくれるだろうし、それによって、新たな材料を効率よく作ることができるようになるだろう。本稿でも、その兆しを紹介できたのではないかと思う。しかし、あくまでも、材料を開発する主体は人であり、AI はその手段にすぎない。

X 線回折や電子顕微鏡解析をはじめとした先端的な計測手法の登場が材料学を大きく飛躍させたことを、思い出すこともできるかもしれない。これらの計測手法がそうであったように、やがては、AI 活用のある部分は一般化し、材料研究の当たり前の道具となる日も来るだろう。その時点から振り返れば、AI を活用しない材料研究など想像できないということになるのではないだろうか。このように一般化した後も、先端計測がそうであるように、高度な AI 活用の方法については継続して研究していくことが求められると予想される。また、材料データや SIP-MI システムなどの開発ツール群は材料開発の共通基盤として中核機関が管理、運営すること

も必要となるだろう。

本稿では、材料と AI を掛け合わせるアプローチとして、3 つの MI を説明してきた。今後は、材料分野における AI 活用の裾野を広げつつピークを形成することが期待される。また、材料データや SIP-MI システムなどの共通基盤の整備と高度化、また、AI を活用した新しい産学官連携のための拠点が形成されていくことが求められる。

謝辞：ここで紹介した成果は、科学技術振興機構 (JST) イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Mi²i)」、内閣府 SIP (戦略的イノベーション創造プログラム)「革新的構造材料」(マテリアルズインテグレーションシステムの開発) の支援で行われたものです。ご支援に感謝いたします。Mi²i の成果について、NIMS の伊藤聡氏、河西純一氏、徐一斌氏から資料の提供を受けました。感謝いたします。

参考文献

- [1] 五十嵐, 竹中, 永田, 岡田, “AI for Science とデータ駆動科学,” 応用統計学, vol. 45, no. 3, pp. 75–86, 2016.
- [2] “MI スクエアの戦略,” NIMS NOW, vol. 16, no. 2, 2016.
<http://www.nims.go.jp/publicity/nimsnow/vol16/201602.html>
- [3] <https://github.com/GLambard/inverse-molecular-design>
- [4] <https://github.com/tsudalab/ChemTS>
- [5] J. Wang, Y. Yamada, K. Sodeyama, E. Watanabe, K. Takada, Y. Tateyama, and A. Yamada, “Fire-extinguishing organic electrolytes for safe batteries,” Nature Energy 2017 3:1, vol. 3, no. 1, pp. 22–29, Jan. 2018.
- [6] S. Ju, T. Shiga, L. Feng, Z. Hou, K. Tsuda, and J. Shiomi, “Designing Nanostructures for Phonon Transport via Bayesian Optimization,” Phys. Rev. X, vol. 7, no. 2, p. 021024, May 2017.
- [7] M. Yamawaki, M. Ohnishi, S. Ju, and J. Shiomi, “Multifunctional structural design of graphene thermoelectrics by Bayesian optimization,” Science Advances, vol. 4, no. 6, p. eaar4192, Jun. 2018.
- [8] R. Jalem, K. Kanamori, I. Takeuchi, M. Nakayama, H. Yamasaki, and T. Saito, “Bayesian-Driven First-Principles Calculations for Accelerating Exploration of

Fast Ion Conductors for Rechargeable Battery Application,” Scientific Reports 2018 8:1, vol. 8, no. 1, p. 5845, Apr. 2018.

[9] 篠原ら, private communication.

[10] Y.-J. Wu, M. Sasaki, M. Goto, L. Fang, and Y. Xu, “Electrically Conductive Thermally Insulating Bi–Si Nanocomposites by Interface Design for Thermal Management,” ACS Applied Nano Materials, vol. 1, no. 7, pp. 3355–3363, Jul. 2018.

[11] T. Koseki, “Outline of materials integration system (MI) project,” JOURNAL OF THE JAPAN WELDING SOCIETY, vol. 86, no. 1, pp. 12–15, Jan. 2017.

[12] M. Enoki, “Development of performance prediction system in MI project,” JOURNAL OF THE JAPAN WELDING SOCIETY, vol. 86, no. 1, pp. 20–23, Jan. 2017.

[13] SIP-MI に関する紹介, <http://www.jst.go.jp/sip/k03/sm4i/project/project-d1.html>; “NIMS x SIP～イノベーション創造最前線～,” NIMS NOW, vol. 16, No. 4, 2016. <http://www.nims.go.jp/publicity/nimsnow/vol16/201604.html>

[13] NIMS 物質・材料データベース MatNavi の URL, <http://mits.nims.go.jp/index.html>