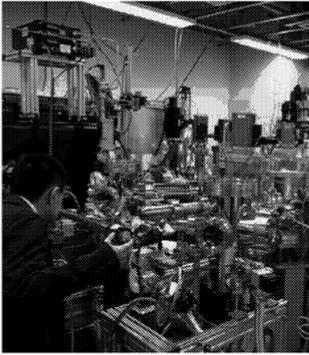


# AIで膨大なデータ分析

# 基礎研究に革新的ツール

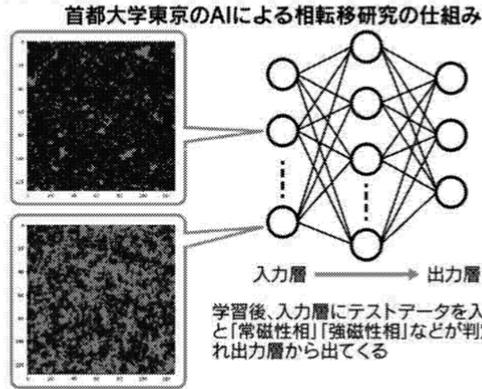


材料開発をAIによって自動化する東京工業大学の装置

産業界で進む人工知能（AI）の利用が科学研究でも目立ってきた。基礎科学の理論やモデル作りに深層学習（ディープラーニング）を応用したり、材料開発などの研究で勘に頼らず実験計画を作ったりする。科学文献をAIが解析し、仮説作りに役立てる試みもある。基礎や応用など分野を問わず、AIで研究の新たな視点を得たり、研究のスピードを上げる効果が期待されている。

物質の成り立ちなどを探索する基礎物理学で、AIの手法である機械学習を使う研究手法が台頭している。首都大学東京の椎名拳太大学院生、岡部豊客員教授らの研究チームは、物質の状態（相）が温度によって変わる「相転移」の研究に深層学習を使う新手法を考案し、論文発表した。相転移はこれまで、ミクロな磁性粒子（スピント）を用いた「スピンモデル」という物理モデルによって研究されてきた。スピ

## 首都大学東京 磁性体スピード分類 東京工業大学 新材料の試作効率化



れたスピント一つが特定の向きをとり、この分布状態の変化から物質の相転移を説明する。

今回の研究手法について同大の森弘之教授は「異なる分析手段を使うことで現象の本質に迫

2017年にカナダの研究チームがスピントの中でも最も単純な「イジングモデル」について、深層学習を応用する手法を提案。首都大のチームは手法を一般化し、イジングモデル以外の様々なスピントモデルでも深層学習を使用するようにした。

研究チームは温度変化に伴って物質が磁石になる性質が変わる「強磁性」「常磁性」などの各相を短時間で判定する深層学習のモデルを作った。画像データに相当するスピントの分布データを多数生成し、ニューラルネットワークに学ばせた。学習済みのモデルで実験したところ、任意の分布データから磁性体としての性質を分類できた。

新材料の開発・探索研究でもAIの活用が活発だ。開発したい材料の組成や温度、圧力などの合成条件を試す際、機械学習の一つである「ベイズ最適化」を使うと、次に使う新しいアプローチが盛んに提案されている。

東京工業大学の一杉太郎教授や清水亮太郎教授はベイズ最適化を駆使したAIシステムと、その判断結果に基づいて材料の試作・評価を行う装置を一体化した実験用システムを構築した。リチウムイオン電池の電極材料などを探索している。

知症を早期発見したりできるAIエンジン「コンセプトエンター」を開発した。単語や文書同士の関連や類似度をベクトル化という手法で数値化し、曖昧な概念の関係を示すことができる。

創薬に使う場合は、研究者が自然文で入力した仮説をもとに、薬剤の標的となる分子の見当をつける。創薬には通常1カ月近くかかる仮説から開発承認までの期間を大幅に短縮できる。大手製薬企業がこの方法で開発に乗り出しているという。（編集委員 吉川和輝）

日本経済新聞  
2020年3月23日