



東京工業大学教授

一杉 太郎氏

AIが研究者を触発



日本が伝統的に強いといわれる材料研究で、AI（人工知能）などデジタル技術を活用する機運が高まっている。政府のマテリアル戦略有識者会議のメンバーで、自らも材料研究のデジタル化に取り組む一杉太郎・東京工業大学物質理工学院教授は「研究者が刺激を受け、発想をふくらませられるAIこそが求められる」と語る。

材料研究のデジタル化は米国が先行している。オバマ政権下で始まった「マテリアル・ゲノム計画」以降取り組みが活発だ。中国も近年データドリブン型の材料開発に力を入れている。日本は早急に挽回しなければならぬ。米中などは、AIで候補物質を予測する段階にとどまる。現実には材料を試作して性能を評価するのに時間がかかるので、この部分の自動化で研究開発が高速化できる。

我々は物質探索を全自動で行

うロボットシステムを開発した。AIが予測した材料の合成条件をもとにロボットで材料を合成し性能を評価する。その結果からAIがさらに良い合成条件を計算する。液体試料を扱う医薬品やファイナケミカルの研究では既にある方法だが、取り扱いがむずかしい無機・固体材料では初めての取り組みだ。

こうしたシステムは研究の高速化につながるが、より本質的に重要なのは、研究者がAIから刺激を受けられることだ。AIは人間には想像できない大きな探索空間を隅々まで見渡して材料候補を見つけてくる。

AIが生み出した仮説や予測に研究者が触発されて、さらに発想をふくらませる循環が生まれることが望ましい。そのためAIの「思考」を人間が理解できるようにする可視化技術や「説明可能なAI」が役に立つ。

研究開発の自動化・自律化は実験室のクラウド化を実現する。在宅で実験室にアクセスして、材料合成や性能評価ができる。研究者を実験室に縛り付けず、多様な働き方を可能にする試みにもつながる。

(編集委員 吉川和輝)