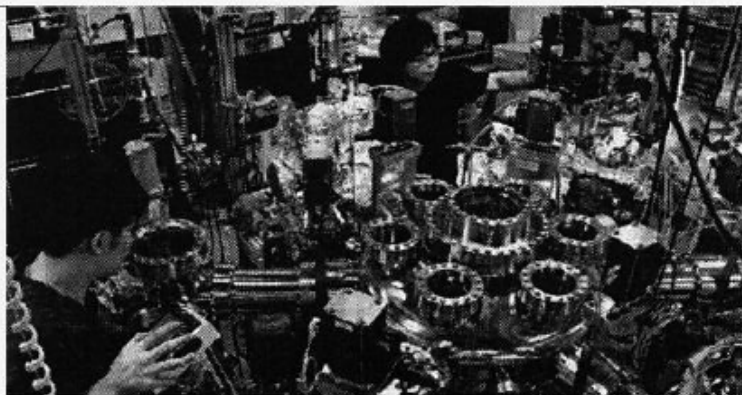


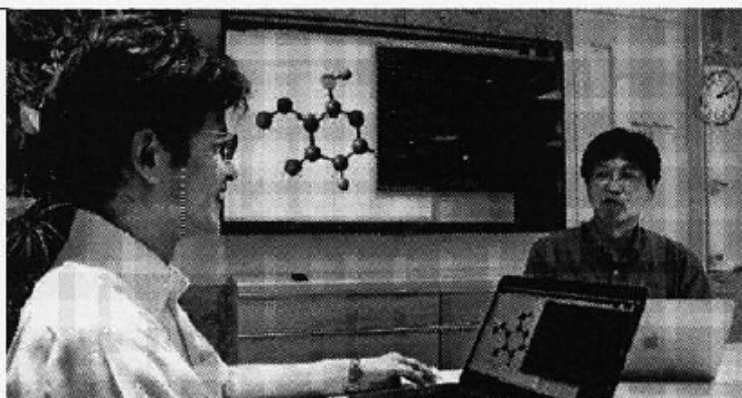
材料開発 AIで脱・職人技

人工知能(AI)を駆使し、研究者の経験と勘に頼る材料開発を変えようとする成果が相次いでいる。東京工業大学はロボットとAIが協調して実験を繰り返す、新材料を見つけてシステムを試作。理学研究所などは分子構造から狙った性質の材料を探す。AIの学習に必要なデータが足りなくても対応でき、10年近い期間が必要とされる材料開発を10分の1に短縮することも可能という。



東工大はAIとロボットを組み合わせて新材料を自動で探索する

東工大 ロボと実験反復 理研 分子構造から探索



理学研究所はデータをもちに、AIが狙った性質の有機化合物を探す

従来は研究者が実験を繰り返して、新たな性質の材料を探し当てていた。実験には研究者の職人技的なノウハウや偶然に左右される部分もあり、試行錯誤が必要で、開発は

長期化しがちだった。大量のデータをもとにコンピューターで狙った性能の新材料を探す「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」が注

目を集めた。ただ必要なデータが十分に集まらず、画期的な新材料の発見にはつなげられていない。AIの飛躍的な進歩で、少ないデータでも新材料を見つけられるようになり、次の焦点に浮上してきた。

▼マテリアルズ・インフォマティクス 情報科学を材料開発に応用する手法。物質についての膨大なデータを集めてAIなどで分析し、新しい材料を効率よく見つけ出す。研究者の勘や経験に頼っていた従来の手法に比べて、開発期間が大幅に短縮できると期待を集めている。

コンピュータの計算速度が向上し、膨大な物質のデータを高速に処理できるよつになった。AIの学習に使ったデータの精度を大きく左右するため、研究機関や企業が協力してデータの蓄積を進めている。AIと材料開発の知識を併せ持つ人材の不足が深刻で、獲得競争が激しい。

東工大の一杉太郎教授らのシステムは、AIが実験計画を考えてロボットが合成する実験と性能の評価を繰り返す。解析した実験結果をAIが学習し、次の実験計画を立てる。失敗のデータも生かしながら実験と解析を繰り返す、狙った性質を

日本の研究者は実験を繰り返して生み出す材料開発を得意にしており、リチウムイオン電池や青色発光ダイオード(LED)などの実用化で世界に先がけた。しかしデータ解析競争に軸足が移ると、これまでの優位性を失う。日本はAIの積極的な導入で挽回を狙う。

った原子がどう結合するかをAIが学ぶだけで、材料の性質などの詳しいデータは不要だ。有機ELなどの電子材料に使う新たな有機化合物を探し、10日間で候補となりそうな物質を86種類見つけた。試しに合成した6種類のうち5種類が狙った性能を発揮していた。津田チームリーダーは「AIは人間の常識とは違う発想で材料を設計していた」と話す。

AIが見つけた新材料は合成法が確立していないものも多い。統計数理研究所の吉田亮教授は新たな合成法を考えるAIを開発した。新材料の分子構造から、複数の合成法を組み合わせて作製できるか探す。100万種類の物質についてデータを用意し、このうち6割のデータで学習した。残りの4割で試すと、精度は8割を超えた。

大量のデータを活用した材料開発は世界各国で進む。米国は11年に「マテリアルズ・インフォマティクス計画」を始めた。開発期間の半減を目標に掲げ、これまでに2億5000万ドル以上を投じてきた。欧州や日本、中国、韓国でも、同様の国家プロジェクトが15年に動き始め、競争が激しくなっている。