

AIが開発の速度を上げる

マテリアルズ・インフォマティクス

- ① 実験やシミュレーションでデータを用意
- ② AIなどを駆使し必要な性能を実現する条件を特定
- ③ 新材料を開発

AIが開発の速度を上げる

実験で材料を作製
従来の手法 繰り返し 特性を評価、考察

経験や知見の蓄積が必要

AIを使った材料探索の研究風景 =NEC提供

NECの熱電変換材料
何十年も使えるセンサー向けの電源

東大の熱放射多層膜
工場の乾燥工程に
塩見東大教授 提供

グラフィックス 佐藤綾香

自動車や情報機器、生活用品など優れた製品の実現に材料の進化は欠かせない。金属や半導体、セラミックスなどで研究者は経験や勘を頼りに高い機能を出そうと試行錯誤してきましたが、最近その様子が変わってきた。人工知能(AI)などの情報技術が最前線で使われだし、人間では思いつかない成果が出始めている。開発現場はにわかに活気づいてきた。

地図のない未知の世界で一番高い山を探すのはとても難しい。「新材料の開発はそれに似ている」と、NECの石田真彦主幹研究員は最先端の材料研究を解説する。だが、そんな状況を変える可能性を秘めた研究を最近体験した。

挑む課題は、温度差を感じると電気を流し始める「熱」。電変換材料」の開発だ。無駄に捨てられている熱を有効活用する期待の技術。しかし変換効率が低く価格も高いため、人工衛星のような特殊な分野でしか使われていない。安価で効率のよい材料ができれば、爆発的な普及が見込めると。優れた材料を開発するにはどんな条件が重要か、AI

で導き出そうとした。

様々な種類がある熱電変換材料のうち、構造が簡単でコストを下げる点で優位性のある「スピニゼーベック素子」を選んだ。この素子は白金や鉄、ニッケル、コバルトなどの金属を混ぜて作る。配合の比率を変えた多数の合金を作り、それぞれの特性データを収集。AIに学習させるなど

で導き出した結果は、白金の年間に推進策を打ち出して以降、世界で研究が活発になっている。

中で生じる磁気的な性質に関する指標だった。

全く予期していない見つけた。これを新たな指針として改良を重ねると、変換効率を5年で約10万倍高められた。白金より安い金属を使つた素子も試作し、実用化も視野に入ってきた。小型センサーなどに取り付ける長期有利

に可能な電源が有望だ。

材料開発にAI革命

材料に関わるデータやAIなどを組み合わせて新材料を開発する手法は「マテリアルズ・インフォマティクス」と呼ばれる。米政府が2011年に推進策を打ち出して以降、世界で研究が活発になっている。

AIを高い効率で作る技術を「スペースモデリング」と呼ぶ手法を駆使して、極めて薄いシート状の材料「ナノシート」を開発した。

ナノシートは電池や触媒などを組み合わせて新材料を開発する手法は「マテリアルズ・インフォマティクス」と呼ばれる。米政府が2011年に推進策を打ち出して以降、世界で研究が活発になっている。

AIを高い効率で作る技術を「スペースモデリング」と呼ぶ手法を駆使して、極めて薄いシート状の材料「ナノシート」を開発した。

塩見教授は「いかに人間が賢く問題を設定するかが重要だ」と強調する。どんな材料を開発したいのか、どんなデータを使うのか、現実にそれを作ることは可能なのか――。こうした問題をきちんと定める作業を経て、今回の成果をあげた。

マテリアルズ・インフォマティクスはまだ期待先行の面がある。この手法を使って熱伝導度の低い材料を多数発見した京都大学の田中功教授は「人間が思いつかなかつた発想を導き出し、効率よい開発を可能にしてくれる」と、これから発展を楽しみにしている。

塩見教授は「いかに人間が賢く問題を設定するかが重要だ」と強調する。どんな材料を開発したいのか、どんなデータを使うのか、現実にそれを作ることは可能なのか――。こうした問題をきちんと定める作業を経て、今回の成果をあげた。



マテリアルズ・インフォマティクス

情報科学駆使し探索

情報科学を駆使して新材料を効率的に探索する取り組み。研究者の経験や直感が頼りだった材料開発で時間やコストを削減できると期待されている。2011年に当時の米オバマ大統領が「マテリアルズ・ゲノム・イニシアチブ」を打ち出し、世界で注目を集めようになつた。最近は中国の研究が活発だ。

人工知能(AI)の進化を受けて実験、理論、計算科学に続く「データ科学」が第4の科学として研究開発の鍵をにぎる。生命科学の分野でいち早く取り入れられ、創薬などに活用してきた。試料の作製に手間がかかり大量のデータを得るのが難しいなどの課題を抱える材料分野で導入は遅れたが、活用法を工夫しながら成果が出始めている。

まだ望んだものを何でも作つてくれるという実力は備えていない。研究者はどうやってえば人知を超える性能を引き出せるのか、色々と試みている段階だ。

東京大学の塩見淳一郎教授は新潟大学の桜井篤准教授らと共に、世界最高水準の性

能をもつ「熱放射多層膜」を開発した。ゲルマニウムや二酸化ケイ素を積層した材料で、工場の乾燥工程などに利用できる。

積み重ねのパターンや膜の厚さが異なる80億通りの候補の中から最適な構造を見つめた。その際、シミュレーションや機械学習を活用したAI技術を使つた。実際に多層膜を作製し、その性能も確認した。

塩見教授は「いかに人間が賢く問題を設定するかが重要だ」と強調する。どんな材料を開発したいのか、どんなデータを使うのか、現実にそれを作ることは可能なのか――。こうした問題をきちんと定める作業を経て、今回の成果をあげた。

マテリアルズ・インフォマティクスはまだ期待先行の面がある。この手法を使って熱伝導度の低い材料を多数発見した京都大学の田中功教授は「人間が思いつかなかつた発想を導き出し、効率よい開発を可能にしてくれる」と、これから発展を楽しみにしている。

(生川暁)