

NIMS NOW

NATIONAL INSTITUTE FOR MATERIALS SCIENCE

No. 2
2016

NIM2

ミスクエアの戦略

理事長あいさつ

物質・材料研究機構理事長

橋本和仁

Kazuhito Hashimoto



2016年1月1日付で物質・材料研究機構(NIMS)の第3代理事長に就任いたしました橋本和仁です。どうぞよろしくお願いいたします。

NIMSは、2001年の設立以来、初代の岸輝雄理事長、第2代の潮田資勝理事長のもとで、研究力の強化と国際化に向けた様々な取り組みが行なわれてきました。本年からは、NIMSの第4期中期計画が始まります。引き続きさらなる「研究力の強化」と「国際競争力の強化」を図るとともに、「研究成果の社会還元加速」をNIMSの中核的課題と位置付けたいと考えています。

現在、科学技術に対する社会からの期待はこれまでになく大きいものがあり、科学技術の振興は政府の最重要政策課題の一つに位置付けられています。いうまでもなく我が国の新素材、機能材料関連産業は世界の最高峰を走っており、それを支える物質・材料研究も世界のトップにあります。NIMSは、当該分野の最先端研究をけん引し、また国全体の研究開発力強化のためのプラットフォームを提供する役割が期待されています。

この期待に応えるために、物質・材料分野でさらに優れた研究成果を上げ続けるだけでなく、研究成果の社会還元を加速するための「橋渡し機能」の抜本的強化を図っていききたいと思います。「使われてこそ材料」の理念のもと、前期以上に組織と

して産業界とより密接な関係を構築することに注力します。また、職員には研究だけでなく研究成果の社会実装のところまで積極的に参画することを強く推奨していきます。これは、研究者自身に新たな研究のアイデアをもたらすという意味でも重要です。NIMSの研究成果が次々と産業界で利用され、また、NIMSがアカデミアと産業界の研究、製品開発のハブとして成長し、そのことがNIMSの、ひいては国全体の研究力をより強化するという良い循環を生み出せるよう努力していきます。

また、異なる分野との連携にも引き続き力を入れていきます。特に情報・通信技術 (ICT) との融合研究の促進は喫緊の課題で、本年から始まる国の第5期科学技術基本計画においても、「サイバー空間とフィジカル空間 (現実社会) が高度に融合した“超スマート社会 (society 5.0)”を未来の姿とし、その実現に向けた一連の取組を強力に推進する」ことが明記されています。すでにNIMSでは「情報統合型物質・材料研究拠点」を設立し、物質・材料研究とデータ科学との融合を促進する取り組みをはじめています。今後様々な取り組みを通じて、物質・材料研究とICTの融合を促し、新たな研究分野、新たな産業を創生していく所存です。

こうしたことを進めることにより、NIMSは我が国に、そして世界に貢献する組織として発展していきたいと思っています。ご支援をよろしくお願いいたします。

特別鼎談

物質・材料研究における 新潮流「MI²」とは何か

2015年7月1日、NIMSを拠点とした「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」が、JST「イノベーションハブ構築支援事業」のプロジェクトとして発足した。これは、データ科学の手法を取り入れて、新しい物質・材料の研究開発を進めるためのオープンイノベーション・ハブ拠点だ。現在、連携機関は企業、大学、研究機関など多岐にわたる。参画している研究機関を代表して統計数理研究所長の樋口知之氏、JSTプログラムマネージャーの伊藤聡氏、そして拠点長の寺倉清之氏の計3名が、MI²I発足の背景と今後の活動方針について語り合った。

※MI²I発足に伴い、鼎談記事内では「計算科学、データ科学を活用した材料研究」を「MI²」に統一して表記いたします。



樋口知之

情報・システム研究機構
統計数理研究所
所長



寺倉清之

物質・材料研究機構
情報統合型物質・材料研究拠点
拠点長



伊藤 聡

科学技術振興機構 (JST) 産学連携展開部
イノベーションハブ構築支援事業
プログラムマネージャー

第4の科学で 物質・材料研究を加速

寺倉 まずは、NIMSに「MI²I」を設置した背景ですが、直接のきっかけは、米国で2011年にオバマ大統領が宣言し、2012年に実質的に始まった「MGI(マテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ)」です。これは、米政府が大きな予算を投じて「MI(マテリアルズ・インフォマティクス)」を推進しようという国家プロジェクトです。MIとは「BI(バイオ・インフォマティクス)」になぞらえた造語で、「実験」「理論」「計算科学」に次ぐ第4の科学手法である「データ科学」を使って、短い期間かつ低コストで、新たな物質・材料を探索、開発することを目指しています。このような動きの背景には、製造業で日本やドイツに後塵を拝していた米国が、ITを駆使することで、製造業における巻き返しを図ろうという強い思いがありました。同様の動きが中国、韓国などでも起こっています。国内での、こうした動きに対する最初の公式の対応は、2013年2月に開かれた、JSTの研究開発戦略センター主催のワークショップでした。

ちなみに、MI²Iとは「マテリアルズ・リサーチ・バイ・インフォメーション・インテグレーション・イニシアティブ」の略で、「単なるMIではない」ということを意識して命名しました。その思いは、MIだと後ろに来る「インフォマティクス」に重点がありますが、我々が目指すのは、「インフォマティクス」も活用した「マテリアルズ・リサーチ」である、ということです。そこで、我々はMIではなく、MI²(マテリアルズ・リサーチ・バイ・インフォメーション・インテグレーション)を使うことにしています。そこで、この鼎談では従来の材料研究にデータ科学を取り入れた新しい材料研究を、「MI²」に統一して表現させていただきます。

樋口 データ科学とは、統計学、機械学習、最適化、データマイニングなどの、データのアナリティクスにかかわる科学手法のことですね。物質・材料分野が、今、MI²に関心を寄せ始めている理由は、このデータ科学がさまざまな分野のビッグデータの利活用において実用化レベルに達してきたことにあります。私のMI²との出会いは2008年5月です。その頃、私はシミュレーションとデータをつなぐ「データ同化」の研究をしていて、当時、北陸

先端科学技術大学院大学にいた寺倉先生に呼ばれて、意見交換をしに行ったのが最初です。しかしそのときは、寺倉先生と全く話がかみ合わなかったのを覚えています(笑)。

寺倉 私自身は、2001年頃からMI²に近いアイデアを持っていたのですが、それが実現できるのではないかと強く感じたのが、2007年に北陸先端大に移ったときでした。シミュレーション、数理論理学、データマイニングの最先端研究に触れ、この三つを融合すれば、物質・材料の“デザイン”ができるかも知れないと直感したのです。

伊藤 私は長く企業に勤めていたのですが、MI²に関しては、産業界ではかなり早い時期から導入し、製品開発に生かしていましたね。特に早かったのが、医薬品メーカーです。農薬や薬剤の開発には有害性の評価が欠かせません。しかし、有望な化合物をすべて生物実験で確認するのは困難ですから、MI²的な技術を活用して研究開発の効率化を図っていたのです。

その点では、製造業は優れた研究者や技術者の経験と勘に頼るところが大きく、MI²技術の導入は遅かったと思います。しかし、

MI²を導入する目的は
「新物質の発見」と
「研究開発のスマート化」

樋口知之

Tomoyuki Higuchi

カルチャーを変えるというのは、
MI²の推進において
極めて重要なキーワード

伊藤 聡

Satoshi Itoh

近年の後継者不足やグローバル競争の激化に伴い、従来の方法では競争優位性が保てないことが分かってきました。それに最初に気付いたのが電機メーカーだと思います。

一方で、最後まで従来の方法を守っていたのが、材料メーカーではないでしょうか。理由は、研究開発から実用化されるまでの期間が、他分野に比べて長いからです。そもそもこれまでになく新材料を発見したり、既存の材料の新たな機能を発見するのは、容易なことではありませんからね。そのうえで、量産化技術なども確立していかなければならないため、発見から実用化までに、30年、40年とかかってしまうわけです。しかし、米国や中国の動向もあり、日本の材料メーカーもようやくMI²を駆使することで事業を加速しなければならないということに本気になり出したところでしょう。

MI²は「花咲いさん」のシロの役割

樋口 MI²を導入する目的は二つで、「新物質の発見」と「研究開発のスマート化」です。

MI²が注目される最大の理由は、材料メーカーも、製品開発のPDCAサイクルをより速く回していかなければ、グローバル競争に勝てないという強い危機感を感じ始めているからでしょう。一方で、発見とスマート化の間には、大きな隔たりがありまして、MI²はどちらかと言えば、スマート化の方が得意で、発見は非常にチャレンジングなテーマだと思います。

寺倉 私は、物質・材料研究におけるMI²とは、「逆問題を解くこと」であると捉えています。これまでの物質・材料研究は、与えられた物質・材料に対して「どのような性質や機能があるのか」を考える、いわゆる“順問題”を解くやり方でした。それに対し、「望む性質や機能を求めて、そのようなものを持つ物質・材料は何か」を考えるのが、“逆問題”です。MI²によって初めて、逆問題を効率的に解く筋書が与えられることになったということです。

先日、企業の方から「MI²によって『ここ掘れ、ワンワン』ができるようにして欲しい」と言われました。逆問題を解くということは、まさにこのことです。欲しい性質や機能に対して、どのような領域を探索すれば、最適な物

質・材料を探り当てることができるかを示す「花咲いさん」に登場する「シロ」のような役割がMI²に期待されているところです。

樋口 その一方で、懸念点もあります。物質・材料分野は特に、実験、理論、計算科学の各研究者たちがそれぞれ独自に研究を進めてきた傾向が強いので、今後、MI²を推進するにあたっては、それらの研究を統合する新たなしくみ作りや強いリーダーシップが不可欠ではないでしょうか。

寺倉 おっしゃる通りです。MI²Iは、まさにそのためのプラットフォームを目指しているのです。

樋口 特に実験研究者への理解を深めることは極めて重要です。NIMSには、世界屈指の実験装置が数多くあり、日々貴重な実験が実施されています。これまで、研究成果につながらないデータはほとんどが廃棄されてきました。しかし今後、MI²を進める上では、失敗も含め、あらゆるデータを蓄積しておくことが重要です。とはいえ、例えば監視カメラの映像のように、すべての映像をサーバーやデータベースに保管していたのでは、管理が

大変で、いざというとき、欲しいデータに辿り着くことができません。そのため、利用目的に合致した形でデータを圧縮、保存する「エッジヘビー・コンピューティング^{*}」の導入も、MI²においては不可欠になっていくでしょう。

カルチャーを変えることがポイント

寺倉 NIMS内の実験装置に限らず、スパコンの「京」やポスト「京」、SPRING-8、J-PARCなどの大型実験施設でも、日々貴重なデータが取得されているにもかかわらず、その多くが有効活用されていません。非常にもったいないことです。今後、機械学習やディープラーニングなど人工知能の精度を高めていくためには、「不要なデータも生かす」という風には、カルチャーを変えていく必要があります。しかし、これは簡単なことではありません。

伊藤 「カルチャーを変える」というのは、MI²の推進において、極めて重要なキーワードですね。そのためには、データを提供することによって、何らかのインセンティブが得られるようなしくみ作りが肝要です。積極的にデータを提供してくれた人にメリットがない

どころか、逆にデメリットを与えてしまうようでは、データの収集は実現しません。中でも、データのオープン化に最も後ろ向きなのが、物質・材料分野です。特に企業にとっては、実験データは生命線ですから、オープン化は当面難しいと思います。しかし将来的には、データを提供した企業ほど儲かるビジネスモデルを構築する、アカデミアにあつては研究者の評価軸を変える、など、長期的な視野に立つて戦略を練っていく必要があるでしょう。MI²では、社会的に波及効果の高い「蓄電池材料」「磁性材料」「伝熱制御・熱電材料」の三つを出口課題に設定していますので、この中から2、3個の成功例が出てくると良いのですが、私にもそれ以上のアイデアがあるわけではなく、悩ましい問題です。

樋口 米国などがデータのオープン化を唱えている背景には、研究開発におけるある種の成熟感や閉塞感があるのではないかと思います。この状態を打破してブレイクスルーを起こすには、勇気を出して、データを出し合えないと思っているのではないのでしょうか。

伊藤 実際、ほんの少し前まで、日本の大手企業の多くは、自社だけで製品開発ができる

と考えていたと思います。しかし最近、大手企業の国家プロジェクトへの参画が増えてきているのは、自社開発だけではグローバル競争に勝てないと思い始めているからではないでしょうか。日本は総じて、研究開発費が欧米に比べて桁違いに低いですし、ここはオールジャパン体制で一致団結して取り組んでいくしかないのではないかと思います。

寺倉 MI²に対する国の支援も同様です。米国のMGIが、政府主導で大きな予算を付けているのに対し、日本のMI²Iは、その10分の1以下の予算で、プロジェクトを推進しているかなければならないという状況です。しかしこれは、我々だけで解決できる問題ではありません。知恵を絞る必要があるでしょう。

日本の強みはデータベースと数学協働

伊藤 日本はJST等が90年代後半から材料データベースを構築してきた実績がありますが、今後、欧米や中国に対して、そうした強みをどのように生かしていけばいいのでしょうか？

寺倉 米国のMGIでは、物質・材料分野は

※エッジヘビー・コンピューティングとは……膨大な量のデータを、データセンター1箇所に集めるのではなく、ネットワークの辺縁部(エッジ)に格納することで、分散したまま活用できる。あるいは、データから目的に応じた形で情報抽出を、エッジである程度行ない、抽出された情報のみをデータセンターに集める。これらにより、深い分析が実現可能となるシステムのこと。

物質・材料研究におけるMI²とは、
「逆問題を解くこと」

寺倉清之

Kiyoyuki Terakura



データ量があまり多くないので、シミュレーションを駆使して順問題を解くという方法で、物質・材料の探索を行なおうとしていると、私は見えています。それに対し、MI²Iでは、NIMSが持つ世界屈指の材料データベース「MatNavi」と、数学者との協働を軸に据え、最初から人工知能を導入して、逆問題を解くという戦略を採っています。この点が、MI²Iならではの最大の強みだと考えています。一方で、米国は人工知能研究が進んでいるので、どれだけ優位性を保つことができるか——。その点について、樋口さんはどう思われていますか？

樋口 私はその点に関しては心配していません。今、世間で人工知能技術として騒がれているものの多くはディープラーニングで、ディープラーニングはパラメーター数が莫大なため、大量のデータを必要とします。現在のところ、MGIはそれに耐えうるだけのデータ量を保有できていません。ですから、今後MI²Iは、実験研究者と計算科学研究者がガッ

チリとタグを組み、エッジヘビー・コンピューティングを駆使しながら、貴重な実験データを継続的に蓄積し、MatNaviのさらなる充実を図っていくというのが、正しい戦略だと思います。それにより、大きな成果を出すことができるのではないかと、大いに期待しています。

伊藤 確かに、米国は数学協働が進んでいませんし、プロジェクトに企業がほとんど参加していませんね。その点は、MI²Iの強みであると感じます。一方で、今後大きな課題になっていくのが、人材育成ではないでしょうか。

寺倉 人材育成は大きな課題です。中国ではすでに、上海大学に計算科学、データ科学を活用した材料研究の専門コースを設置したと聞きました。日本も早急に手を打つ必要があります。このような中、文部科学省の採択を受け、2015年8月に、「計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)」が東北大学に設置されたので、今後は、PCoMSとの連携も図っていく計画です。

また、NIMSでは関連する活動として、内

閣府主導の「戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)」による「マテリアルズ・インテグレーション」も進められています。MI²Iと同じくシミュレーションやデータ科学を活用していますが、構造材料開発の加速を主な重要課題に置いています。MI²Iと目標が異なる点もありますが、開発手法構築など部分的に協力しあえればと考えております。

MI²IIはMI²Iのハブ拠点として、組織の枠組みを超え、物質・材料に関与しているすべての研究者同士が有機的に交流し、研究開発を加速させていくことを目指しています。同時に、データベースの整備や各種ソフトウェアの開発、人材育成も推進していく計画です。2、30年前には頼りにされていなかった計算科学が、今や第3の科学手法として不可欠なものとなっているように、MI²も近い将来には、不可欠なものとなっていることは明確です。より多くの皆様のご理解とご協力をお願いしたいと思っています。本日はどうもありがとうございました。

(文・山田久美)

Global Movement

計算科学、データ科学を活用した材料研究に関する海外動向

2011年に米国政府が「MGI(マテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ)」立ち上げを宣言し、2012年に巨額の予算を投じたことで、にわかに世界中が注目し始めた「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」。

日本でも約10年前からMIに関する調査・検討が行なわれていたが、MGIをきっかけに2015年、NIMSを拠点としたMI²Iを発足。そこで、現在の各国による関連研究動向を追った。

MI²Iプロジェクト発足の契機となった米国MGI

日本では、JSTの「イノベーションハブ構築支援事業」の一つとして、2015年NIMSを拠点に「MI²I」が発足した。また、内閣府主導の「戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)」、科学技術振興機構(JST)の戦略的創造研究推進事業「さきがけ」においても、MIを推進するプロジェクトが立ち上がっている。これらの契機となったのが、2011年に米国政府が巨額の予算投資を約束してスタートを宣言した「MGI」だ。

これは従来の実験ツール、計算ツールに、データを利活用することで、物質・材料開発の短期化と低コスト化を図ろうというものだ。

米国は「先端製造パートナーシップイニシアティブ」の一環としてMGIを位置づけている。その目的は、米国が得意とするデータ科学を駆使することで、製造業で後塵を拝していた日本やドイツに対して復権を果たすこと。この背景には、今後、IT企業だけでは、国民の雇用が確保できないという米国の強い危機感がある。中でも物質・材料は、製造業において重要な役割を担うことから、物質・材料研究を重点的に促進するため、MGIを設置したのだ。

現在、MGIでは、NSF(国立科学財団)、NIST(国立標準技術研究所)、DARPA

(国防高等研究計画局)等の機関がOSTP(大統領府科学技術政策局)の下、省庁間連携を図り、プロジェクトを推進している。NSFはMGIに関するコミュニティの形成・拡大と人材育成、NISTはMGIに関する研究拠点の統合と各種ツールの開発、DARPAは軍事応用を念頭に、国家予算を資金としたチャレンジングな研究プログラム遂行を担当。また、DOE(エネルギー省)も大きく寄与している。「MGI提唱時は、エネルギー、健康医療、セキュリティ、人材育成の四つを目指す」と宣言。2014年12月の戦略目標決定時には、エネルギー省がメインテーマにも掲げているエネルギーストレージ、軽量の構造材料をはじめとする9種類の材料を重点化しました。このことから、エネルギー省がMGIの重要関係者であることがわかります」。NIMSの門平卓也氏はこう説明する。

米国政府がMGI関連プロジェクトを統合

早くからMGIに注目し、関連プロジェクトの立上げに尽力したJST研究開発戦略センターの島津博基氏は「MGI発足の原動力となった三つの流れ(コミュニティ)^{*}があります。米国政府は、それらを同じ傘下に置くことで、相乗効果を図り、研究開発を加速できるのではないかと考えたのではない

でしょうか」と解説。

MGI傘下の代表格が「ザ・マテリアルズ・プロジェクト」「チャイマッド(CHiMaD)」だ。前者は、マサチューセッツ工科大学が中心となって進めてきた。機能材料の予測、探索が中心だ。これまでリチウムイオン電池の材料探索で大きな成果を上げており、MGIが注目を集めるきっかけとなった。一方、後者はノースウェスタン大学が先導してきたプロジェクトで、主に構造材料の予測、探索が中心だ。こちらは飛行機のランディングギア用の高強度かつ軽量の超合金の開発等に貢献した。

前者が、原子レベルやナノレベルで物性の予測を試みているのに対し、後者は実験とマルチスケール・シミュレーションの統合により、物性をマクロレベルで捉えようとしているのが特徴だ。

これらを同じ傘下に置くことで、物質・材料研究に関する各プロジェクトの“見える化”とプロジェクト間の交流が促進される。その結果、原子・ナノレベルとマクロレベルという異なる階層間の融合に関する研究や、応用分野が広がるなど、相乗効果が見込めるというわけだ。

※MGI発足の原動力となった三つの流れ

1. 第一原理計算を主体としてデータを作り出し、欲しい性能や機能を持つ物質・材料を見つけ出そうという流れ
「ビッグデータの処理環境」「データ科学に基づく各種分析ツール」「実験と計算科学に基づくデータベース」の三つを融合させる。

取材協力

島津博基

科学技術振興機構 (JST)
研究開発戦略センター
フェロー

徐 一斌

NIMS中核機能部門
材料情報ステーションデータベースグループ
グループリーダー

小山幸典

NIMS中核機能部門
マテリアルズ・インフォマティクスプラットフォーム
主幹研究員

門平卓也

NIMS中核機能部門
マテリアルズ・インフォマティクスプラットフォーム
主任エンジニア

2. Integrated Computational Materials Engineeringの 流れ

構造材料を中心に、結晶構造(第一原理計算)から材料組織までのマルチスケールをプロセス、材料組織との関係も含め、統合していく。

3. コンピュトリアル合成・計測の流れ

ハイスループットに物質を作り、計測する。

欧州、中国、韓国でも プロジェクトが発足

このような米国の動きを受け、欧州(EU およびスイス)でもプロジェクトが相次いで立ち上がっている。

欧州で発足した「マテリアルズ・モデリング」は、産業界がワンストップで利用できるオープンなプラットフォームの構築を目指している。中でも計算科学に強いという欧州の特長を生かし、ナノレベルからマクロレベルまでを統合させるシミュレーション技術の開発と産業利用の促進を目標に掲げている。

また、第一原理計算を使った機能材料の予測、探索も米国同様行なわれている。主な出口は、エネルギー、ICT、医薬だ。物質の電子状態の自動計算を行なう「AiiDa」と呼ばれる優れたシステムも、スイスの研究機関を中心に開発された。

「欧州では計算科学を主体としているグループや、データ科学を活用しているグループに機能分散してお互いに協力しようとしているのが特徴でしょうか」。NIMSの

小山幸典氏はこう説明する。

さらに、アジアでも中国、韓国で大きな動きが出始めている。特に中国では、米国のMGIに触発され、「チャイナMGI」を設立。物質・材料研究における台頭を狙っている。

中国の特徴は、国家レベルよりも、上海や北京など地方政府レベルで、プロジェクトが複数立ち上がっていることだ。例えば、2015年4月には、上海市政府の資金援助により、上海大学に、また、同年5月には、北京科技大学にMGI研究所が新設された。さらに同年9月には、寧波市に民間の国際MGI研究所も設置されている。今後、各研究所では、実績を積み上げることで、国家レベルの研究プロジェクトへとつなげていく考えだ。

米国との連携強化を図っている点も中国の特徴だ。

「現在、米国の大学では、中国人留学生が大きな割合を占めており、米国と中国との関係が急速に深まっています。そのため、上海大学などは、米国から教授を招き、計算科学、データ科学を活用した物質・材料研究に関する講義を担当してもらっています」。NIMSの徐一斌氏はこう説明する。事実、寧波市の国際MGI研究所も、米国からの留学帰りの中国人研究者が立ち上げたものだ。

今後、計算科学、データ科学を活用した物質・材料研究が重要になっていく場合、

最も懸念されるのが人材不足だ。その点において中国は、10年、20年先を見据え、今から、拠点形成と同時に、人材育成にも注力しているというわけだ。

日本ももっとアジア諸国との連携に積極的に取り組んでいく必要があるだろう。

現在のところこの分野においては、米国が多少先んじてはいるものの、各国ほぼ横一線でスタートしたばかりという状況だ。今後、日本が各国に遅れをとらないためには、米国のような政府主導によるプロジェクトの推進や、中国のような人材育成への早期取り組みが求められるだろう。

(文・山田久美)

マテリアルズ・インフォマティクスによる 成果が生まれている

実際に、マテリアルズ・インフォマティクス(以下、MI)で何ができるのだろうか。

京都大学の田中功教授は、熱伝導度が非常に低い物質を高効率に多数発見するなど、MIを用いた数々の成果を上げている。

MIの成功事例について田中教授に聞いた。

黒電話とスマートフォンの違い

—— MIが急速に注目され始めました。この現状を、どのように見えていますか。

田中 乗り遅れてはいけないと思うが、MIのイメージがつかめず一歩を踏み出せない人が多いように感じています。例えば、黒電話がスマートフォンに進化して何が変わったか。電話という機能はあまり変わっていません。しかし、得られる情報量は格段に増えました。通話するだけであれば黒電話で十分ですが、ビジネスではスマートフォンを使わなければ置いていかれます。同じように、従来の方法でも材料開発はできますが、みんながMIを使い始めたら、勝負にならないでしょう。でも、難しく考えることはありません。従来の材料科学では、人が経験に基づいて自分の頭で考えていました。考えるときに情報科学の力も借りましょうというのがMIです。

リチウムイオン電池の寿命を6倍に

—— 田中教授は、早い時期からMIを用いた材料開発を行なっています。具体的な例を教えてください。

田中 一つは、リチウムイオン電池の正極材料の開発です。企業との共同研究で、家

庭用太陽電池の蓄電に使うリチウムイオン電池の長寿命化を目指したものです。彼らは、リチウムイオン電池の容量劣化は、正極材料のリン酸鉄リチウム(LiFePO₄)が充放電のたびに膨張収縮することが原因だと考えていました。そして、LiFePO₄の原子の一部を別の元素に置換することで、体積変化を小さくできるのではないかというアイデアも持っていました。しかし置換する元素や割合のパターンは無限にあります。一つ一つ合成し、実験で確かめるのは不可能です。そこで、MIを使って探索してみようと考えたのです。

——どのような計算を行なったのですか。

田中 第一原理計算といって電子の振る舞いを量子力学(第一原理)に基づいて計算することで物質の構造を求めました。構造が分かれば、体積を求めることができます。まずLiFePO₄の一部の原子をほかの元素で置換した構造を求めます。その構造からLiが離脱したときの構造を計算し、体積の変化を求めます。置換する元素の組み合わせや割合を変えた2000種類以上について計算し、体積変化が非常に小さい材料を見つけることができました。

計算で得られた組成通りに合成して充放電の特性などを検討したのですが、結果が出るまでは、間違っていたらどうしようと

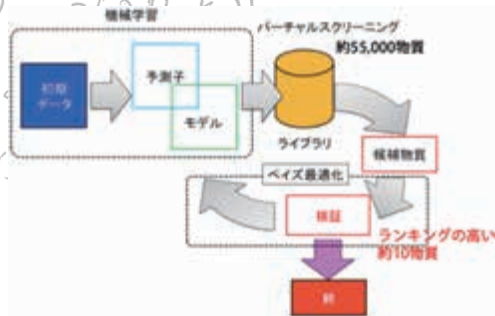
ドキドキでした。寿命が6倍伸びることが確かめられ、ようやくホッとしました。実はその物質は、合成がとても難しい材料でした。計算による特性の裏付けがなかったら、手を出さなかっただろうと、合成の担当者に言われました。そういう物質を掘り出せることも、MIの特徴です。合成が難しい材料でも一度できてしまえば、次第に簡単に合成できるようになるものです。

熱伝導度の低い物質を多数発見

—— 2015年11月には、MIを使って熱伝導度が低い物質をたくさん発見することに成功されました。なぜ熱伝導度に注目したのですか。

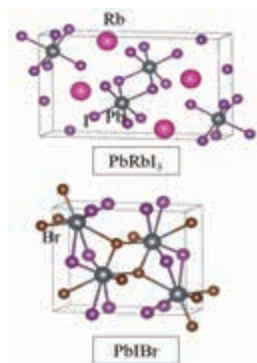
田中 今までほとんど計算されていないからです。実は第一原理計算では、絶対零度(−273.15℃)の状態を計算しています。しかし、材料を絶対零度で扱うことはありませんから、おかしいですね。そこで、私たちは第一原理計算で熱の項を入れるプログラムを開発を進めてきました。熱は原子の格子振動によって伝わります。第一原理計算に基づいて格子動力学計算を行なうプログラムPhonopy(フォノパイ)を開発し、世界で初めて系統的な熱伝導度の計算を可能にしたのです。

$20, 17 \times 17 \theta v \neq 0$
 72 decomposition
 $(K_n) - \text{point}$
 $b - R$
 $e \sigma$
 $E_{\text{ph}} \propto \beta \sigma - (K_n)$
 $\mu \nu \nu$
 $\text{all} - 2$



バーチャルスクリーニングの流れ
 約100種類に対して精密計算を行なって初期データとする。機械学習の手法に基づいて比較的簡単な予測モデルを作成し、ライブラリーの全物質をランキングする。ランキング上位の物質について精密計算を行ない、検証する。精度が低い場合は、モデルを修正してバーチャルスクリーニングを繰り返す。

ランキング	スコア	化合物	熱伝導度 計算結果 (W/m-K)
1	1.90	PbRbI ₃	0.10
2	1.76	PbI ₂ Br	0.13
3	1.56	PbRb ₂ Br ₆	0.08
4	1.56	PbI ₂ Cl	0.18
5	1.56	PbClBr	0.09
7	1.44	PbI ₂ (R 3m)	0.29
8	1.43	PbI ₂ (P 6 ₃ mc)	0.29



熱伝導度のバーチャルスクリーニングの結果

5万4779種類の無機化合物を対象に行なった。ランキングと熱伝導度の高精度計算の結果では順位がいくつか入れ替わっているが、ランキング上位の物質はいずれも熱伝導度が低いことからバーチャルスクリーニングが適切だったことが分かる。右は、高精度計算によって超低熱伝導度であることが確認された物質の構造。

※スコアとは・・・簡易モデルで求めた熱伝導度をスコア化した値。
 スコアが大きいくほど予測された熱伝導度は低い。

約5万5000種類が登録されている無機化合物のデータベースがあります。その中からPhonopyを用いて熱伝導度が低い物質を探そうとしました。しかし、熱伝導度の計算は非常に複雑で時間がかかるため、5万種類すべてについて精密に計算するのは不可能です。そこでまず、約100種類の物質について熱伝導度を精密に計算し、その結果をもとに機械学習の手法に基づいて熱伝導度の簡易予測モデルを構築しました。そのモデルを約5万5000種類の物質に適用し、熱伝導度をランキングしたのです。このように、全物質を対象に詳細な計算を行なうのではなく、簡単なモデルを使って絞り込む方法を「バーチャルスクリーニング」と呼びます。医薬品の開発ではよく用いられている手法ですが、無機化合物の材料開発に利用された例はほとんどありません。

次に、ランキングの上位約10種類の物質について高精度の計算を行なって熱伝導を求めました。その結果がランキングと大きく異なればモデルが良くないということなので修正して、バーチャルスクリーニングを繰り返します。今回は1回だけで、300Kでの熱伝導度が0.10W/mKと従来の物質より1桁も

小さい物質をたくさん見つけることに成功しました。この成果によって、熱遮蔽材料や熱電変換材料の選択肢が大幅に広がります。

MIの三つの目的

——MIは新材料の発見に貢献すると期待されています。

田中 新材料発見と言うと分かりやすいのですが、それだけを強調するとMIの力が矮小化されてしまうと危惧しています。私は、MIには三つの目的があると考えています。新材料の発見、構造の発見、そして法則の発見です。構造が分かれば特性が分かり、さらにその法則が判明すれば、望み通りの機能を持つ材料を設計できるようになります。この法則の発見が最も重要です。

——日本のMIは遅れていると言われてい

田中 日本は材料分野の産業において世界で大きな地位を占めてきました。従来の方法でうまくやってきたという自負があるだけに、MIの導入が遅れているのかもしれませんが、諸外国がMIで新材料を次々と見つけ基本特許を抑えてしまえば、ゲー

ムチェンジ、流れが一気に変わってしまうでしょう。いつまでも黒電話を使っているわけにはいきません。

—— NIMSの情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)に、どのようなことを期待されますか。

田中 “ハブ”としての機能を存分に発揮し、産業界にMIの情報を広めてほしいです。企業担当者たちがハブ（NIMS）でMIの手法を学び、各現場で材料開発に生かせるような場になればいいのではないのでしょうか。また、人材育成にも是非力を入れていただきたいです。計算科学や情報科学だけに精通しているのではなく、材料科学に対する強いモチベーションがある人材が必要不可欠です。どういう特性が必要かはその材料を真剣に研究している人にしか分かりません。計算科学や情報科学の専門家だけでは、どちらに進むべきなのか全く見当がつかないのです。

NIMSには、構造材料、機能材料、磁石材料、電池、触媒などさまざまな材料分野の研究者がいますから、うまく横串を通して進めていただきたいですね。
 (文・鈴木志乃／フotonクリエイト)



田中 功

京都大学大学院工学研究科材料工学専攻 教授

企業から見た マテリアルズ・インフォマティクス

——材料開発だけではもったいない。ものづくりが変わる——

企業はマテリアルズ・インフォマティクス(以下、MI)をどう見ているのか。
その導入は、ものづくりの現場をどう変える可能性を持っているのだろうか。
MIを機能させるために必要なこととは。
トヨタ自動車株式会社の梅村晋氏に聞いた。

生き残れないという危機感

——企業は、MIについて、どう見ているのでしょうか。

梅村 MIを取り入れなければ、後れを取るというより、生き残れない、車をつくれなくなるのではないかと危機感さえ持っています。

自動車産業では自動運転の実用化に向けた取り組みが進んでいますが、この分野にIT業界が参入してきています。これは脅威です。なにしろIT業界は動きが速い。例えば車は、約3年でマイナーチェンジ、約6年でモデルチェンジをします。一方、携帯電話のモデルチェンジは半年から1年です。世の中がそのスピードに慣れてしまっていますから、私たちもこれまで10年、20年とかかっていた材料開発の期間を大幅に短縮する必要があります。期間短縮のカギを握っているのが、MIだと考えています。

——IT業界との違いはどのような点にあると、お考えですか。

梅村 IT業界は、ビッグデータと言われる世の中のあらゆるデータを集めて活用し、新しい価値を生み出しています。私たちも、70年以上にわたって車をつくらせてきた中で取得した、たくさんのデータを持っています。しかし、そのデータの多くは必ずしも有効に

使えているとは言えません。医薬品業界は、バイオ・インフォマティクスによって医薬品の開発期間が大幅に短縮されるなど、大きな進化を遂げています。材料開発でもやらなければいけないと、強く思っています。

——日本は、欧米に比べてMIの導入が遅れていると言われていました。

梅村 明らかに後れを取っていますね。トヨタは、電解質を液体から固体にすることで長寿命・高い安全性を実現する全固体リチウムイオン電池の材料を開発し、2012年に特許が公開されました。その直後、アメリカのマサチューセッツ工科大学(MIT)と韓国の企業が共同で、同じ組成の電池材料を発見したと発表しました。私たちは従来の実験中心の手法で5年ほどかけて開発したのですが、彼らはMIを使って1年ほどで成功したそうです。衝撃でしたね。今回は先に特許を取ることができましたが、このまま従来の開発方法でやっていては駄目だと思いました。

マテリアルズと複数形になっている意味

——MIは、自動車産業ではどのような貢献が期待できますか。

梅村 自動車産業では、軽量化、電動化、

知能化という三つのキーワードを掲げています。具体的な取り組みはこれからですが、MIは、そのすべてに貢献できると考えています。

軽量化は、燃費向上のために不可欠です。従来の車は主に鉄でできていましたが、アルミや樹脂など軽い材料が使われ始めています。すべてを一つの材料に置き換えることはできないため、マルチマテリアルといって、さまざまな材料を適材適所で使うことになります。そのためには、異なる材料を接着・接合する技術の開発が必要です。接着剤を試作して実験するのですが、アルミと鉄、アルミと樹脂はうまくいったが、樹脂と鉄はつかない、ということもよくあります。そうなると一からやり直しますので、10年くらいすぐたってしまいます。MIを使えば、これまでの接着剤開発の過程で得られたデータや公開されている材料の基本データからアルミも鉄も樹脂も接着可能な接着剤の組成を予測することが可能です。それによって開発期間は大幅に短くなるはずです。

私は、マテリアル・インフォマティクスではなく、マテリアルズと複数形になっていることに意味があると思っています。複数の材料のデータを集めて横串を通して利用してこそ、MIの真価が発揮されるのです。

$$\begin{aligned} & \partial_\nu \langle A_\mu \rangle \sim \int e^{-i \int \partial_{\mu\nu} (J_\mu + K_\mu) D \partial_{\mu\nu}} \\ & \text{and via Kalb-Ramond field} \\ & \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu B_\rho \quad (B_{\mu\nu} + B_{\nu\mu} = 0) \\ & \stackrel{3+1d}{=} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu B_\rho \\ & \stackrel{1+1d}{=} \epsilon_{\mu\nu} \partial_\nu \varphi \\ & [J_\mu, J_\nu, A_\mu] = \int d\tau d\vec{r} \left[\frac{1}{2e} (\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu B_\rho - K_\mu)^2 \right. \\ & \quad \left. + i B_{\mu\nu} J_\mu \right] \\ & [\varphi, \rho, A_\mu] = \int d\tau dx \left[\frac{1}{2e} (\epsilon_{\mu\nu} \partial_\nu \varphi - K_\mu)^2 \right. \\ & \quad \left. + i \varphi \rho \right] \\ & J_\mu = \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu \partial_\sigma \theta_\rho \quad \text{world-sheet current} \\ & \rho = \epsilon_{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \theta \quad \text{phase slip density} \\ & \text{st. rules} \quad \delta A_\mu = \partial_\mu \chi \quad \delta K_\mu = \delta(A \delta A) = d(\chi \delta A) \\ & \quad \delta B_{\mu\nu} = \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \chi \partial_\rho A_\sigma \quad \delta \varphi = \chi \\ & \quad \delta K_\mu = \epsilon_{\mu\nu} \partial_\nu \chi \end{aligned}$$



梅村 晋

トヨタ自動車株式会社
材料技術領域 材料技術統括室 室長

材料開発から製造プロセス、製品までをデータでつなぐ

——電動化に関してはどのような貢献が期待できますか。

梅村 二酸化炭素排出量の削減などのため、ガソリン車からハイブリッド車、プラグインハイブリッド車、電気自動車、さらには燃料電池車へと電動化が進められています。電動化に必要な電池材料の開発は日進月歩の勢いで進んではいませんが、MIを取り入れると一段上の性能が得られると思います。MIの恩恵は二つあるのです。一つは開発期間の短縮。もう一つは、実験や私たちの知識からでは出てこない革新的な材料が生まれること。電池材料では、そのようなブレークスルーが期待できます。

——知能化と材料開発はどう関わるのでしょうか。

梅村 知能化というと、自動運転がまず思い浮かぶと思いますが、それだけではありません。私たちは、車に乗っているときのさまざまなデータを取得しようとしています。そのまさにビッグデータを、シートや素材の硬さ、車内の香りなど、快適な空間を提供するための材料開発に利用しようとしています。

——製造業ならではの期待もありますか。

梅村 MIを材料開発だけに使うのでは

もったいないと思っています。高性能の材料ができて、いざ製造プロセスに持って行くと使えないことがよくあります。そういうときは製造プロセスを変更して対応するか、材料を改良するのですが、結局使わずに消えていった材料も山のようにあります。私たちはトヨタ生産方式と呼ばれる生産管理システムで車をつくっています。そこからは膨大なデータが得られます。そのデータ、さらには車を運転時のデータも組みあわせることで、こういう材料を、こういう製造プロセスでつくれば、こういう性能の車ができると、材料開発から製造プロセス、製品までをデータでつなげて予測する——MIには、そういう壮大な夢を実現できる可能性があると考えています。ものづくりが大きく変わります。

MIが機能するデータベースの確立を

——NIMSの情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(MI²I)に、どのようなことを期待されますか。

梅村 どのようなデータを集め、どのようなデータベースをつくればMIが十分に機能するのかが、まだ分かりません。MIにとって最も有効なデータベースとはどういうもの

のかを示してほしいですね。データを抱え込むのではなく、企業、大学、研究機関の枠を超えてデータを共有することでこそ、よりよいものをより早く生み出せるのだという意識改革が必要だと思っています。一方で、それぞれの競争力を守るためにも、データを階層化し、どのデータをどの範囲で公開するかという線引きも必要です。アメリカはその点も上手にやっていますから、学ぶべきでしょう。また難しいかもしれませんが、データベースは国内限定ではなく国際的なものになれば、生み出されるものも大きくなると期待しています。

——日本はMI導入の後れを取り戻すことができるのでしょうか。

梅村 日本は良質のデータをたくさん持っています。それを集め、使いこなすことができれば、逆転のチャンスはあると思いますし、今こそその絶好のタイミングだと考えています。

(文・鈴木志乃／フットンクリエイト)

MIにおける日本の要人が大集結！ 「マテリアルズ・インフォマティクスが もたらす材料開発の新フェーズ」とは

2015年10月7日、有楽町の東京国際フォーラムで「NIMS フォーラム」が開催された。今回、中心テーマに設置したのが、マテリアルズ・インフォマティクスだ。MI¹拠点長の寺倉清之氏をモデレーターに、東京工業大学の細野秀雄教授など、産官学から計6名のパネリストが集まり、「マテリアルズ・インフォマティクスがもたらす材料開発の新フェーズ」というテーマでパネルディスカッションを行なった。その様子をレポートする。

※MI¹発足に伴い、NIMSのMI²に関連する「計算科学、データ科学を活用した材料研究」については「MI²(マテリアルズ・リサーチ・バイ・インフォメーション・インテグレーション)」と表記いたします。



細野秀雄

東京工業大学
応用セラミックス研究所&
元素戦略研究センター
教授



岡田真人

東京大学 大学院
新領域創成科学研究科
教授



真鍋 明

物質・材料研究機構
情報統合型
物質・材料研究拠点
特別研究員



岩崎富生

株式会社日立製作所
研究開発グループ
主管研究員



常行真司

東京大学 大学院
理学系研究科
教授



知京豊裕

物質・材料研究機構
MANA
ナノエレクトロニクス
材料ユニット
主任研究員



寺倉清之

物質・材料研究機構
情報統合型
物質・材料研究拠点
拠点長

材料開発における MI²の果たすべき役割とは

パネルディスカッションを始めるに当たり、最初に東京工業大学の細野秀雄教授が「開拓型研究による新材料開発」と題した基調講演を行なった。

細野教授は講演の冒頭で、材料開発には「探索(勘)」「理論・モデル(頭)」「プロセス(腕力)」の三つのアプローチがあり、これらは三角関係でつながっていることを示した(図1)。その上で、マテリアルズ・インフォマティクス(以下、MI)を「理論・モデル」と「プロセス」の間に導入することは非常に有用で、それによって新材料の開発期間を半減することは十分可能であると語った。

その一方で、革新的な新材料を見つけ

出す「探索」については、まずは人間の五感を使った観察による触発、そして、優れた研究者から受ける感銘による触発が不可欠であり、これらはMIには困難であるとした。逆に、研究者は今後、MIには困難な「探索」にこそ全力を尽くすべきであると語り、講演を終えた。

次に、物理学者でデータ科学者でもある東京大学の岡田真人教授は、講演の中で「MIは、物質・材料が持っている本質的な特性がどのような特徴量によって決まるかを、データを利用して自動抽出するためのもの。つまり、我々が普段行っていることをスマート化するための手段に過ぎない」と述べた。

続いて、元トヨタ自動車材料開発に従事してきたNIMSの真鍋明氏が、「出口側か

らみるMI²:期待と課題」と題したショート講演を行なった。真鍋氏は、産業界は現在、MI²について、「本当に研究開発をスピードアップできるのか」「データ共有は可能なのか」「どこから着手すべきか」という三つの疑

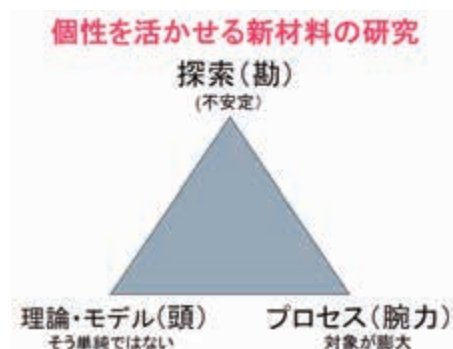


図1

問を抱いていると述べた。そして、これらの疑問に対し、物質の発見から実用化までを、「1. 新物質創成」「2. 物質の物性極値化」「3. 材料最適化」「4. 適用研究開発」の四つの開発ステージに分け(図2)、各ステージによって状況が異なることを説明した。

材料の研究開発に寄与してきた 計算科学

これら3名による講演後は、日立製作所の岩崎富生氏、東京大学の常行真司教授、NIMSの知京豊裕氏が加わり、パネルディスカッションが開始された。モデレーターはMI²拠点長の寺倉清之氏が務めた。

最初に岩崎氏が、MIの手法の一つである「応答曲面法」の活用例として、入社以来携わってきた計算科学を用いた材料設計を紹介した。岩崎氏の担当分野はエレクトロニクス製品で、これまで岩崎氏は、材料同士の最適な組み合わせや、欲しい性能を実現するための添加物の選出などに計算科学を活用してきたことを説明。例えば、電子部品における銅配線と下地金属との密着強度を計算することで、最適な下地金属を割り出したという。

また、常行教授は、JST「さがりけ」の「MI」の研究総括やスーパーコンピューター「京」での統括責任者、さらに、ポスト「京」での課題責任者を務める。常行教授は、「計算科学は材料研究に貢献できるか」ということが、長年にわたる私の大きな研究課題だった」と述べた上で、計算科学の強みとして、シミュレーションによる物質・

材料の原子レベルでの可視化、アイデアの仮想実験、さらに、新物質・材料の特性予測を挙げた。その一方で、計算科学が抱える課題として、自由度の高いシミュレーションやマルチスケールシミュレーションにおいては、まだ十分な性能を出せないことや、欲しい性能や機能を持つ新物質・材料の発見は困難なことなども挙げた。そのため、「さがりけ」では、これらの課題をMIと融合させることで解決していく計画だと語った。

一方、NIMSで「コンビナトリアル手法」を使って、大量の材料を処理するハイスループット合成と計測を行ってきた知京氏は、これまで、自身が計算科学によって導き出された材料設計を基に、実際に材料を使って合成、計測してきた成果を示し、将来、その結果をNIMSの材料データベース「MatNavi」に蓄積する可能性に言及した。そのため、実験研究者のMI²における位置付けとしては、「計算科学で予想された結果を、実験と計測によって実証し、MI²に不可欠なデータを提供するという二つの役割を担っていくことになるだろう」と述べた。加えて、一見無味乾燥な計測結果のデータを、計算科学を使って可視化することで、研究者の直感に訴え、それが新材料の発見につながってきたことなども紹介した。

MI²が貢献できる開発ステージとは

これらを受け、寺倉氏がまず常行教授に、ポスト「京」におけるMI²の位置付けに

ついて聞いた。それに対し常行教授は「ポスト『京』は今まで以上に社会的課題の解決が求められており、幅広い材料分野がターゲットになっている。その中で、我々が特にMI²の果たす役割が大きいと考えているのが、磁石材料と構造材料だ」と語った。

一方、岩崎氏は、真鍋氏が提示した四つの開発ステージについて、「産業界では、ステージ2と3への計算科学の適用ニーズが高い。MI²も同様で、ステージ2と3への有用な手法として期待している」と述べた。

加えて、岡田氏は「MI²は、現在人間が行なっていることをすべて代替する打ち出しの小槌ではない。特にステージ1は、細野教授もご指摘のように、MI²が貢献できる最後の領域になるだろう」と語った。

それらを受け、細野教授も「現在、材料開発においては、ステージ2と3が課題となっているが、MI²が開発期間やコストを半減するのは、まさにこれらのステージだ」と強調した。加えて、「例えば、ペロブスカイト型結晶構造の強誘電体を作ろうといった場合、最適解を求めるには、現在のところ、しらみつぶしに実験していく以外ない。大学では2、3個、物質が見つかり、論文が書ければ、そこで満足してしまうが、企業の場合、そういうわけにはいかない。それを、MI²を使って、短期間かつ低コストで求めることができれば、非常に有意義だ」と語った。

また、知京氏は「ハイスループット合成と計測は、ステージ2と3に集約されている。その中で得られたデータを分かりやすい形で提示することで、ステージ1でのアイデア創出にも役立てられるのではないかと考えている」と語った。

最後に、真鍋氏が「ステージ3は、企業にとって生命線であり、その点で、MI²の貢献度が高いという話は心強く感じた。しかし、ステージ1に関しても、人間の勘やひらめきを補足する最強のツールになる可能性はあるのではないかと期待している」と述べ、パネルディスカッションを終了した。(文・山田久美)

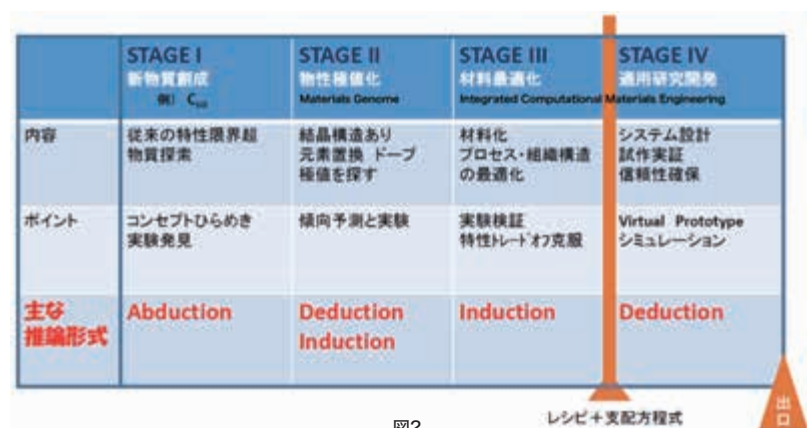


図2

きみが思っているより科学はもとおもしろい (かもしれない)

人工知能は脳を超えるか

文:えとりあきお

題字・イラスト:ヨシタケシンスケ

「人工知能(AI: Artificial Intelligence)」という言葉が誕生したのは1956年。クロード・シャノンやマービン・ミンスキーらが集まった「ダートマス会議」の提案書ではじめて使われました。しかし、コンピュータで人間の知能を実現できるに違いないという期待は、当時のコンピュータの能力不足で到底達せられるものではありませんでした。

次に人工知能が注目されたのは1980年代。日本が第5世代コンピュータ計画を立ち上げて第2次ブームを主導しました。いくつかの成果をあげることはできましたが、AIへの接近は思うにまかせず、国外からは“ビッグ・フェイリュア”という評価も下されました。

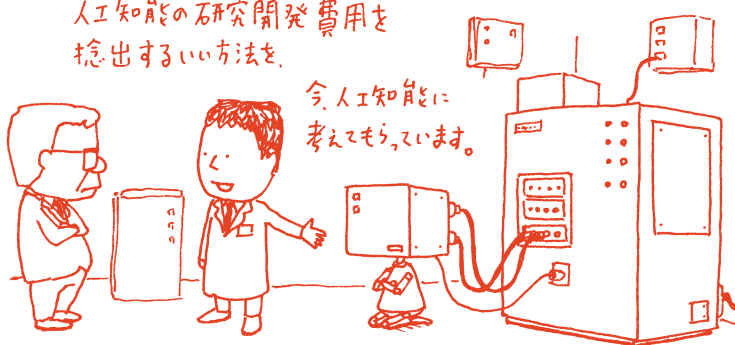
そして現在は第3次ブーム。1次、2次と異なる点は、このブームが簡単に冷めそうにないというところ。世界中からデータを得られるネットワーク社会の成熟と、コンピュータの性能が格段にあがっているためです。

自動車会社はこぞって自動運転の実現に力を注ぎ、すでに完成一步手前のところまできています。アメリカではIBMのワトソンが「Jeopardy!」というクイズ番組で人間に勝ちました。東大の入学試験に合格するためのロボットも、あと2、3年で目標を達成するといわれています。

話題をよんでいるディープラーニングという手法は、第3次ブームの中核をなすといわれますが、コンピュータの能力(計算速度など)のアップやビッグデータの導入

人工知能の研究開発費用を
捻出するいい方法を、

今人工知能に
考えてもらっています。



によって画像認識に驚異的な力を発揮しています。

「ディープラーニング」と聞いて思い出されるのが、先日88歳で亡くなられたミンスキー博士のこと。「人工知能の父」とも呼ばれる彼に、私が初めてお会いしたのは1990年、日本国際賞受賞のため来日した時です。当時はまだ携帯電話もなく、AIに対する世間の関心も決して大きくはありませんでした。そんな中、機械自身に学習させ、「理論的思考だけでなく、感情や自我などを含む心の研究が必要である」と提案されていました。世界中からデータを得られるネットワーク社会の成熟と、コンピュータの性能が格段にあがっている今、博士の言葉が改めて大きく感じられるのです。アメリカ人らしいおおらかで気さくな人柄も、冷たく機械的なイメージのする現場の中で、ホッとできる瞬間でもありました。

現在のAIは、未だある特定の分野でしか力を出すことができませんが、研究者は着々と汎用の人工知能の開発に向かって

います。それでは、AIの能力がいつの日か人間の脳に追いつき追い越すことができるのでしょうか。

AIが人間の脳と能力が同等になる点を、シンギュラリティ(技術的特異点)といいます。研究者はすでに、現在の人工知能研究の潮流からみて、何十年か後にはこの特異点に来ることを予測しています。その時点が30年後ととらえ、2045年問題と称する人もいます。

シンギュラリティがおとずれた後の人間や社会がどうなっていくかについては、誰にも想像がつかないそうです。

しかし、人間の脳がコンピュータに簡単に打ち負かされてしまうとは、私には思えません。どんなにたくさんのデータを、どんなに早く処理することができても、人間には創造力と想像力が備わっています。

そうした人間独自の知恵を駆使することによって、私たちはそうなった時代にも、新しい人間中心の社会を創り上げていくことができるのではないのでしょうか。

えとりあきお: 1934年生まれ。科学ジャーナリスト。東京大学教養学部卒業後、日本教育テレビ(現テレビ朝日)、テレビ東京でプロデューサー・ディレクターとして主に科学番組の制作に携わったのち、『日経サイエンス』編集長に。日経サイエンス取締役、三田出版株式会社専務取締役、東京大学先端科学技術研究センター客員教授、日本科学技術振興財団理事等を歴任。