産学連携 project 138

AIとマテリアルサイエンスを融合したマテリアルズ・インフォマティクスの開発

■研究者のプロフィール

北陸先端科学技術大学院大学（JAIST）
情報社会基盤研究センター
サスティナブルイノベーション研究領域 准教授

本郷 研太（ほんごう けんた）

TEL：0761-51-1304
E-mail：hongo@jaist.ac.jp
URL：https://www.youtube.com/watch?v=BtplbBksPwM

本郷准教授のインタビュー動画はこちらから

研究シーズの概要

AIと物質・材料科学

AIは、この10年で格段に進歩しました。自動運転や自動音声対話の精度も向上し、日常生活に深く浸透しています。その背景には、大量データの蓄積（ビッグデータ）と機械学習技術の発展（特にディープラーニング）があります。マテリアルサイエンス（物質・材料科学）の分野でもAIの波が押し寄せ、一気に主要な研究アプローチになりました。

AIとマテリアルサイエンスの融合展開は「マテリアルズ・インフォマティクス（MI）」と呼ばれています。MI研究は現在、方法論開発などの基礎研究の段階を経て、マテリアル探索を行う実践段階に至りました。

学術的には、MI関連の論文数は2015年以降1.6年で２倍の伸びを示しています。産業的には、例えば、MI関連の米国市場（コンサルやツール開発）は昨年108百万ドルとなり、2028年には481百万ドルへと成長が見込まれています。では、MIによってマテリアル研究はどのように変化したのでしょうか？

シミュレーションとMI

マテリアル分野では、MIに先立つこと30年ほど前、それまでの実験・理論という近代科学の伝統的アプローチに加えて、第３の科学「シミュレーション/計算科学」が新たに加わりました。

汎用ソフトが普及した結果、シミュレーションは基礎研究・実践の段階を経て専門家の手を離れ、今や実験家が実験前に自分のPCで気軽に計算できるようになりました。現在では、第一原理計算や分子動力学法、計算熱力学による相図計算など、物理的スケールの各階層に応じて実験を高精度で再現しています。その結果、物質・材料特性（物性）の理解が一層深化し、さらには得られた予測結果や知見を元に物質設計指針を行う「計算材料科学」が進展しました。

実は、本学には本州日本海側唯一のスパコン設備（図１）を備えており、本学における最先端のシミュレーション研究を強力に支えています（著者も管理者の一人です）。

MIではさらに、第４の科学といわれる「データ科学」が加わり、マテリアル研究の加速が期待されています。ただし、データ科学、特に機械学

図１ 本学スパコンシステム「KAGAYAKI」560 CPU（35,840-core）＋60 GPU

習によって信頼性の高い予測・分析を実現するためには、データの質と量の両方が問われます。ところが、マテリアル分野では、そのような高品質・大量データを実験的に獲得するには、時間的にも経済的にも高いコストを要します。

最近のMI研究では、シミュレーションとの協働が進んでいます。まずシミュレーションで高精度物性予測を行い、得られたデータを活用・分析することで、新しい物質・材料をデータ科学的に発見します。MI研究では、この「データ駆動型マテリアル探索」が標準スキームとして確立しています。

計算科学は演繹的、データ科学は帰納的といわれ、両者は真逆の性格ですが対立しません。両者の協働こそがMI研究の要諦といえます。

データ駆動型マテリアル探索：那由多（なゆた）への挑戦

マテリアル探索の難しさは、探索候補の数にあります。実は「世に存在し得る」マテリアルの規模は、10^{60}＝那由多と推定されています。マテリアル研究者は、この天文学的数（宇宙の年齢4.3×10^{17}秒）を超越したところに、未踏の革新的マテリアル（埋蔵マテリアル）の存在を信じ、日々研究に精進しています。

従って、マテリアル探索とは、究極的には那由多への挑戦と呼べるかもしれません。しかし「那由多」規模の網羅的探索は不可能であり、現実は、既存データベースの範囲内（$10^{7\text{-}8}$程度の登録数）で、未検証物性を探索します（この未検証物性を「ハイスループット・バーチャルスクリーニング；HVS」といいます）。このHVSの枠組みでも、新しい機能マテリアルの発見が多数報告されています。これらはMI研究の成功事例です。さらに、那由多には至らなくても、埋蔵マテリアルを発見しようとする試みも進んでいます。

ベイズ統計によるマテリアル探索

最後に、著者らの研究事例として、「ベイズ統計に基づくマテリアル探索」をご紹介します。ベイズ統計は、迷惑メールのフィルタ機能などにも活用されており、データ学習を繰り返すことで賢くなっていきます。ベイズ探索は、欲しい物性値を設定して、そのようなマテリアルを重点的かつ効率的に統計サンプリングすることができます（図２）。実際、このベイズ探索により、高熱伝導率ポリマーが新たに発見され、その実証実験にも成功しています。

ベイズの定理

$$P(X|D) \propto P(D|X) \times P(X)$$

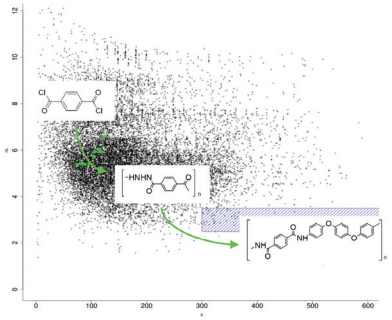

図２　ベイズ構造探索のイメージ：既知化合物から出発して、所望物性を持つ新規ポリマーを発見

研究キーワード

◎ マテリアルズ・インフォマティクス
◎ 計算材料科学
◎ データ駆動型マテリアル探索
◎ ベイズ統計　◎ シミュレーション

利用が見込まれる分野

◎ シミュレーション/MIを始めたい企業
◎ シミュレーションやMIの技術を導入したい企業
◎ 高度MI人材育成を必要としている企業

産業界へのメッセージ

MIは、研究対象の性格上、産学連携を常に意識しています。著者自身、MIを始めてから、企業との共同研究が増えました。しかし、分野を俯瞰すると、分野の成長に高度MI人材の供給が追いついていません。本学は、一研究科移行を契機に、情報・マテリアル・知識を体系的に学べます。この特筆すべき教育研究環境を背景に、MIを選考する社会人が増えています。MIのことなら、是非とも本学にご相談ください。

今後の展望

今年度は、経産省の令和３年度産学連携推進事業補助金に採択され、超越バイオメディカルDX研究拠点事業に参画します。これまでに確立した有機・無機系のシミュレーションおよびMIの研究基盤を適用・発展させ、当該事業の研究加速に貢献したいと考えています。これまでマテリアルの「静的機能」を扱ってきましたが、今後は生体系の「動的機能」も扱います。この新たな研究展開が研究の幅を拡げてくれることを期待しています。

産学連携をお考えの方は次の担当部署までお問い合わせください。
◎北陸経済研究所　米屋　TEL：076-433-1134
◎北陸銀行 地域創生部　山上　TEL：076-423-7180