

計算や解析の分野は人工知能により急速に進みつつある 人間は何をするの？

人工知能 (AI) の進歩により職を失う人が多く出ると騒がれ始めてから何年間かが経過した。確かに、少しずつではあるが AI は人間の仕事の領域に入ってきている。分野によっては人間をはるかに凌駕する能力を持っている。

電子計算機の能力は何といってもその計算速度である。最近では新聞記事にもあるように、量子コンピュータの実現によりその速度は天文学的に速くなる可能性が見えてきた。

この計算速度が材料開発に活かされれば、過去のように人間が勘で行っていた研究開発よりも格段にその開発速度の向上と開発品質が向上することが期待できる。また、人件費を含めた材料の開発費用を格段に下げる可能性もある。

日本経済新聞 2020.1.4

「バカなことをやっているな」。NECの研究者の岩崎悠真氏は2018年、新素材の探索でAIが提案した元素の組み合わせにこう感じた。合金材料の磁力は鉄とコバルトで最も強くなるというのが定説。ところがAIは2種類の他の元素を加えることを提案していた。

検証してみると、AIが示した合成が既存の素材よりも強くなる可能性が出てきた。最終的な結果が分か

2020年 AI先読み通信簿

業績・需要 未来も予測

2020 AIの通信簿(4段階評価)

「D」はまだ「A」よりできる」「B」だいたいできる」「C」もう少し」「D」はまだ「A」よりできる」「B」だいたいできる」「C」もう少し

通信簿の基準は「A」よりできる」「B」だいたいできる」「C」もう少し」「D」はまだ「A」よりできる」の4段階。総合評価は花丸◎、○、△の順に4段階で判定した。

算数(データ解析) A ひとつでは計算しきれないビッグデータを処理できた

A 時々ひとつには思いつかない知見を示すこともあった

A 需要予測から新素材の開発まで幅広く役にたちそう

A クラウドを通じて手軽にサービスを提供できた

A 量子コンピューターで将来はさらに性能が上がりそう

総合評価 ◎

このほか、岩崎氏は「人間なら思いつかない手法を採用。AIが磁力を持った組み合わせだ」と驚きを隠さない。

AIがやったのは本来なら100兆通りにもなる素材の組み合わせの検証だ。人間が計算すると約57億年と地球の歴史よりも長い時間がかかる。NECは

「これはこれでいいが、岩崎氏は「人間なら思いつかない手法を採用。AIが磁力を持った組み合わせだ」と驚きを隠さない。

AIがやったのは本来なら100兆通りにもなる素材の組み合わせの検証だ。人間が計算すると約57億年と地球の歴史よりも長い時間がかかる。NECは

通信簿の基準は「A」よりできる」「B」だいたいできる」「C」もう少し」「D」はまだ「A」よりできる」の4段階。総合評価は花丸◎、○、△の順に4段階で判定した。

「D」はまだ「A」よりできる」「B」だいたいできる」「C」もう少し」「D」はまだ「A」よりできる」の4段階。総合評価は花丸◎、○、△の順に4段階で判定した。

算数 9週間で57億年分驚異の演算力

性的な情報に基づく未来予測とは違った予測手法が注目を集める。

三菱UFJ銀行などが出資するデータ分析スタートアップ、ゼノデータ・ラボ(東京・渋谷)はニュースが企業業績に与える影響を予測するサービス「ゼノブレイク」を展開している。あるニュースが企業の業績を左右するかをマイナスイ00からプラス100の範囲で点数表示する。「素材価格の将来トレンドも予測可能」と関洋一郎社長。今後は調査会社のアナリストの知見も分析に組み込む。

米アマゾン・ドット・コム傘下でクラウドを手掛ける米アマゾン・ウェブ・サービス(AWS)も、機械学習を使って時系列データから商品やサービスの需要を予測する「アマゾン・フオーキャスト」と呼ばれるサービスを提供している。例えば教育サービスのアイデミー(東京・文京)は顧客がインターネット上で同社の演習サービスを利用する回数の予測に役立っている。「サーバー負荷などを考えるうえで、必要な情報が安価に得られる」と(同社) AIの分析力は今後一段と高まりそうだと、19年10月、グループが発表した量子コンピューターは、最先端のスーパーコンピューターで1万年はかかる問題を3分20秒で解いた。実現すれば量子コンピューターは複雑な計算を一度に高速でこなす。AIはさらに大量のデータを短時間で学習できる可能性がある。

今後問われるのは演算力の使い道。甘利俊一(東京大学名誉教授は「AIはビッグデータから法則を導くのは得意だが、その意味を解釈するのは難しい」と指摘する。AIで何をしたいかという「活用力」が企業も人もますます問われることになる。

(清水孝輔)

このAIを利用して材料を設計する分野の一つがマテリアルズ・インフォマティクスである。30年くらい前であれば、原子・分子にパラメータを与えて長時間をかけてコンピュータにシミュレーションさせていた。このパラメータも研究者によりそれぞれであり、そのため結果にも違いが生まれていた。今日のAIによる材料予測では超高速で信頼が得られる結果が得られるようである。新聞記事にもこれまでの定説（人間の思い込み）を超える組み合わせで強い磁石ができる可能性がある」と記されている。AIは人間の能力をはるかにしのぐ可能性があるのである。

「ばかなことをやっているな」とAIに対して感想を漏らしたNECの岩崎悠真氏は、結局はAIから得られた予測を基に、より強い磁石を生み出すチャンスを得ている。岩崎氏は2010年当時は人間の経験と勘で材料開発をしていたようであるが、2019年にはコンピュータを用いた材料開発へと舵を切っている。そして、2019年には書籍を上梓している。雑誌「応用物理」掲載の「解釈可能な機械学習を用いた人間主導マテリアルズ・インフォマティクス」というタイトルが意味深ですね。AIの優秀さは認めつつも、そこに人間が介在しないと何も生まれてこないということでしょう。AIといえども道具に過ぎないということなのでしょう。

25aWS-3 Rh/N/Cu(001)面の構造(25aWS 表面界面構造(金属・酸化物),領域9(表面・界面,結晶成長)) 岩崎 悠真, 中辻 寛, 山田 正理, 飯盛 拓嗣, 小森 文夫
日本物理学会講演概要集 2010年 65.2.4 巻 25aWS-3

解釈可能な機械学習を用いた人間主導マテリアルズ・インフォマティクス

岩崎 悠真

応用物理 2019年 88巻 12号 808-812

マテリアルズ・インフォマティクス-材料開発のための機械学習超入門-

岩崎 悠真 | 2019/7/20

目次

第1章 マテリアルズ・インフォマティクスとは(機械学習とマテリアルズ・インフォマティクス;機械学習さえあればすべて解決するの?;理論科学・計算科学・実験科学・データ科学(機械学習) ほか)

第2章 材料開発における機械学習の基礎知識(機械学習ってそもそも何?;機械学習ってどうやって使うの?(PythonとR)

機械学習ってどんな種類があるの? ほか)

第3章 機械学習アルゴリズムとその材料開発への応用(線形回帰と蓄電池材料開発;LASSO回帰と太陽電池材料開発;決定木と熱電材料開発 ほか)