

# 研究思想持ち材料開発

フィロソフィー

## 東京大学大学院 船津 公人 教授

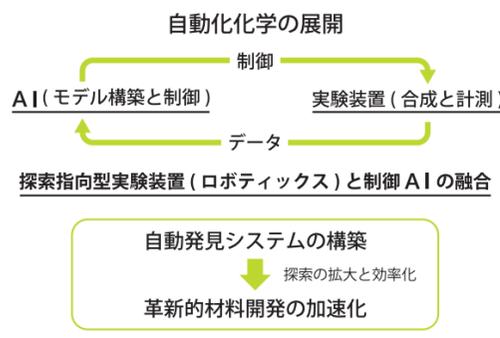


データ駆動型の研究開発が注目されている。データサイエンスと人工知能(AI)を材料探索と組み合わせるマテリアルズ・インフォマティクス(MI)な(国)プロジェクトがいくつも推進され、すでに多くの化学系企業がインフォマティクスを材料研究の戦略的な武器として位置づけている。この技術の今後の方向性や未来像について、東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻の船津公人教授(兼務)・奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター研究ディレクター)は、「プロセスインフォマティクス」の観点から重要な流れから「自動化化学の展開」へとつながる話を、(聞き手)黒坂厚

**MIで一転、データ時代に**

—自然科学研究において、理論、実験、計算に次ぐ第4の柱として「データ」を位置づける考え方は、いまやすっかり定着した感があります。

—データをもちこした設計・解析という考え方は1960年代から始まったが、コンピュータが普及・浸透するにつれて、データベースやデータ解析技術が発展し、ケモトリックスなどデータ解析のノウハウを取り入れた分子設計の動きが活発になった。80年代にかなりの盛り上がりを見せたが、経済情勢の変化でストラやカットの対象になることもあり、せつかくの流れが断ち切られることが多かった。



**設計時につくり方も意識**

—先生自身もいくつかのプロシエクトを率いてこられました。

—冬の時もあったが、先見性のある会社も多く、この40年近くはわたって継続的に共同研究を続けてくることができた。その縁から強く感じることが多かったこと

—材料といものは原料が同じでも実際に使うと違ってくる。食料が一緒でも、料理する方で仕上がりが変わるのと同じで、つくり方、プロセス条件のパラメータが違えば、まったく異なる材料が生まれる。それが原因で、

—なるほど。しかし、ちょっととした製法の違いでなせよと、原理原則を知る必要はありませんか。

—それが重要な点。データサイエンスでも、使ったパラメータによって、この物質性発現をするのは、この組成だからとか、この組成のこういう特徴が効いているんだとか、あるいはこのプロセス条件の温度・圧力がどういふふうにか、解釈できるものもある。ただ、なかなか解釈しづらい場合もあり、その時には量子化学計算での精密な解析が有効になる。計算化学・データサイエンスは車の両輪のようなもので、両方のいいところをうまく活かしてMIを考えると必要がある。

—因だったかもしれない。

—MI技術の登場で、状況は変化したように思います。

—11年(米国でマテリアルズ・インフォマティクス)が、これは日本にとっ

—何をつくるかを考える際に、どうつくるかも一体的に検討しなければならぬ。このことを、プロセスインフォマティクスという概念として私が世界で初めて提唱した。

—それを踏まえ立ち上げたのが、JSTPの戦略的創造研究推進事業(CREST)です。産業界から製造業のビッグデータから知識創出基盤の確立で、6年半にわたって実施した(今年3月末に終了)。

—これは、創業においてAIをデータを活用する多岐にわたる。実際に生産するために、どういった情報や知識が必要なのか、ソフトウェアによる化学プロセスの監視と制御にまで踏み込んで、構造や物性を予測する計算化学とは逆に、データサイエンスは目的の特性を持たせるにはどういった子構造、どういった組成、どういったつくり方であべきかを提案してくれる。高分子、触媒、半導体材料など幅広い材料開発に適用できる方法だ。

## AIとロボが「自動化化学」実現

**制御にも共通モデル使用**

—プロセスインフォマティクスについて、もう少し説明してください。

—実際にプラントでものを製造する際、一定の品質をキープしと保つため、ソフトウェアで品質や物性のふれをリアルタイムに計測・監視し、正しい制御に調整するよう制御しなければならぬ。設計時だけでなく、実際に使われている中で使われていて、監視と制御ができるようになる。材料設計、プロセス条件検討、品質管理までを一貫して扱えるスキルがプロセスインフォマティクスだ。

—よく分かりました。この技術の未来はどう展開しますか。

—探索指向型実験機器

**人材とともに、土壌整備**

—自動化化学の実現に向けて今後が必要として

—「借り物のデータや解析手法だけ持ってきて、それは切り花を買ってくるようなもので、土壌がないとすぐに枯れてしまう。具体的にいろいろな事例を経験して、データ解析の素養を身につけた人材が必要になる。その上で、自動化化学を展開するためにどういった装置をつくるか、その装置にどんな機能を持たせるか、どんなデータをどうするか、全体のAIの枠組みをどうするかなど、実験研究者やロボット技術者、AI研究者と議論しながら全体をデザインしていくことになる。とくに、データ駆動型化学は効率化が目的の単なるツールではなく、フィロ

—多種類の専門家が必要なので、自動化化学の最初の装置を開発することは、国に後押ししてもらわなければならない。ただ、ひな形が一つできれば、あとは早いと思う。10年すれば、AIとロボットを使用した研究スタイルが普通になっているだろう。

〔ふなつ・きみと〕 1983年九州大学 化学専攻博士課程。84年3月豊橋技術科学大学助手。90年4月豊橋技術科学大学講師。92年4月豊橋技術科学大学助教授。04年4月東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授。17年10月奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造研究センター研究ディレクター兼務。19年8月アメリカ化学会より、データ駆動型化学分野のノーベル賞といわれる Herman Skolnik 賞を受賞。

化学で未来を変えるの

# ダイセル

Sustainable Value Together

株式会社ダイセル

よろこびを化学する

JNC株式会社 <https://www.jnc-corp.co.jp/>

〒100-8105 東京都千代田区大手町2丁目2番1号 新大手町ビル9階 TEL 03-3243-6760

JNC