

# AI

# 材料研究

優れた材料を探索する。最適なプロセスを見出す。  
材料研究の様々な局面でAIの活用が広がっている。  
最近注目された研究事例を通して、  
AI時代の材料研究のこれからを考える。

## AIとデータ科学の進展

産業や社会のあらゆる場面でAI(Artificial Intelligence, 人工知能)の活用が進められている。AIとは一般的に、人間の言葉の理解や認識、推論などの知的行動をコンピュータに行わせる技術と理解されている。AIの言葉の生みの親であるジョン・マッカーシー教授は、AIを「知的な機械、特に知的なコンピュータプログラムを作る科学と技術」<sup>(1)</sup>と説明しているが、その定義は研究者によって異なる。

AIは先端科学や特殊な分野だけのものではなく、私たちの身近な生活でも活用されるようになった。2023年にOpenAI社から発表されたChatGPTは、人間の質問にフレキシブルに対応してくれる夢のような機能を持っている。

AIの中には、「大きいAI」「強いAI」と呼ばれるような人間の知的活動をそのまま再現できるようなAIや、「小さいAI」「弱いAI」と呼ばれるような個々の局面のみで使われるAIも含まれる。このように、AIという言葉は非常に範囲が広く、一般的な言葉として使われるようになった。

データ科学の時代にあって最近使われるようになった言葉に「データ駆動」があるが、これはデータに基づくサイエンスや研究の進め方を意味する言葉である。日本では2021年3月に政府が発表した第6期科学技術・イノベーション基本計画に「データ駆動という新しい科学手法を大胆に取り入れ、社会の課題に答えたいこう」という考え方が盛り込まれている<sup>(2)</sup>。データ駆動の対象はあらゆる産業や社会であり、材料研究において、データ駆動は、第1の実験、第2の理論、第3の計算シミュレーションに続く「第4のパラダイム」として注目されている。材料研究でAI活用を進めるためのアプローチの一つに、MI(Materials Informatics, 材料情報学)がある。MIは物質探索を対象とし、材料研究を情報統計学的に行う学問分野であり、データ駆動の手法を取り入れた新しい学問としてとらえられている。

現在、AI技術の進歩は目覚ましく、いまや材料研究にAIを使うという流れは当然のことと受け止められている。これまでに思いもかけない材料を発見できるのではないかと、もっと早く最適なプロセス条件にたどり着けるのではないかなど、AIの活用は、材料研究者に大きな期待を抱かせてくれる。

それでは、実際にAIは材料研究にどのよ  
うに役立つのだろうか。

### データが少なくても AIは活用できる

AI活用を進める上で、多くの人が「データを握るものが材料開発を制す」と考えており、AIを使うためには膨大なデータが必要不可欠と思われている。

材料研究でAIを活用しようとするに当たっては、ビッグデータをAI技術で解析するというイメージが浮かぶが、対象となる材料の複雑さに比べて材料データは必ずしも十分ではないという問題がある。

企業や研究機関において、材料データは時として機密案件や知的財産に該当するものであることから、これまで外部に対して公開されることは稀であった。一方で、論文や特許に掲載されている公知のデータを集めたデータベースサービスが行われ、多くの研究者が利用する国際的なビジネスとなっている。この状況に対し、物質・材料研究機構(NIMS)では、日々の研究活動から得られる実験・計算データを再利用できる形で蓄積しておき、これを研究に役立てることを目指している。

本編では、NIMSから発表された様々なAI活用の事例を紹介する。1例目は、実験データが少ない中であって、AI活用の成果が得られた研究に関する事例である。

### 【事例1】少ない実験回数で、ネオジム磁石の高特性化に成功<sup>(3)</sup>

電気自動車などで需要が高まるネオジム磁石において、磁石の特性を改善するには、材料の合金組成、および製造工程での温度や加工条件の組み合わせを最適化する必要がある。NIMSの研究チームは、熱間押出加工ネオジム磁石の作製条件と特性データにAIを適用することにより、優れた磁気特性の発現が期待される作製条件を予測し、この条件で作製することで最高水準の保磁力を示す磁石が得られることを実証した(図1)。

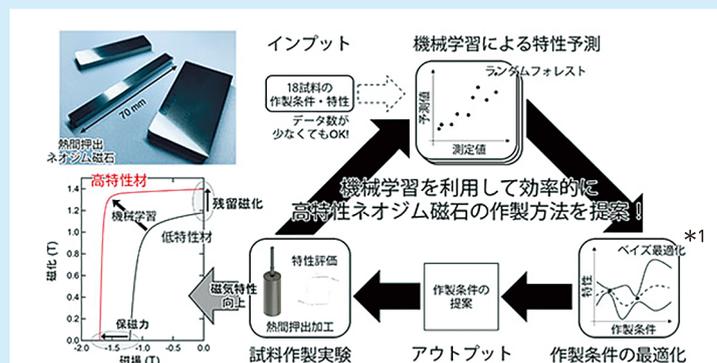
初期の実験データこそ18点と少なかったが、その後AIの提案に従って40点の追加実験を行った結果、初期条件で作製した場合と比べて約1.4倍高い保磁力を示す磁石を得ることができた。この研究成果は、限られた実験データ数から最小限の実験データを追加することによって、ネオジム磁石の最適な作製条件を見出した例といえるだろう。

### ロボット活用で 材料探索を効率よく

AIを用いることによって、材料探索の作業を効率的に行うことができる。2例目として、ロボットとデータ科学とを連携させることでリチウム空気電池の電解液の材料探索を極めて効率良く行うことができた事例を紹介する。

図1 作製した熱間押出ネオジム磁石の外観および機械学習前後の試料の磁気特性と、アクティブラーニングによる実験条件最適化プロセス<sup>(3)</sup>

製品化されている熱間加工ネオジム磁石に比べて、機械学習適用前の磁石の特性は低かった(保磁力1.2 T, 残留磁化1.2 T, 最大エネルギー積250 kJ/m<sup>3</sup>)が、機械学習適用後は同じ組成の磁石の中で最高クラスの特性を得ることができた(保磁力1.7 T, 残留磁化1.4 T, 最大エネルギー積380 kJ/m<sup>3</sup>)。



\*1 ベイズ最適化：ブラックボックス最適化問題を解決することを目的とした機械学習の手法。

**【事例2】自動実験ロボットとデータ科学の連携により、リチウム空気電池のサイクル寿命の向上に資する電解液の開発に成功<sup>(4)</sup>**

リチウムイオン電池に替わる次世代の電池として、より高いエネルギー密度を実現できるリチウム空気電池が期待されている。しかし、この電池には充放電サイクル寿命の面で課題があり、その改善のために高い充放電反応効率を引き出す電解液材料が求められている。電解液の機能発現には極低濃度の添加剤が重要な役割を果たすが、その構成成分候補や組み合わせの数が膨大であることに加え、電解液中に生成される化合物の機能発現機構は複雑であり

添加剤の選定は、これまで研究者の経験や勘に頼ってきた。

これを解決する方法として、ロボットとデータ科学的手法の連携が模索された。人力の100倍以上の速度で電解液の調合とその電池性能評価を行う電気化学自動実験ロボットを開発し、実験を行った。これによって得られたデータに対し、ベイズ最適化<sup>\*1</sup>などの科学的手法を適用し、材料探索の効率化を試みた。この結果、1万種以上の電解液材料の評価を実施し、リチウム空気電池の充放電サイクル特性の向上を実現する電解液材料を発見することができた(図2)。

電解液材料の開発は従来は試行錯誤的

に行われてきたが、今回の研究を通じて、AI駆動ロボットの活用により材料探索の効率が飛躍的に高まることが示された。

**AIと研究者の共同作業の成果**

AIがあれば、あらゆる材料研究は人の手を借りずに行えるのだろうか。3例目として、最近の研究成果で、AIの発見したパターンと材料研究者の知識のコラボレーションによって新たな知見が得られた例を紹介する。

**【事例3】AIと材料研究者の共同作業で耐熱合金の高温強度を高める熱処理法を考案<sup>(5)</sup>**

耐熱材料であるNi-Al合金の金属組織は $\gamma$ 相と $\gamma'$ 相で構成され、高い高温強度を得るためには $\gamma'$ 相のサイズと体積率を制御することが必要となる。例えば、全時間を10等分し、温度を9水準とした場合、熱処理のパターンは $9^{10}$ (約35億)通りになり、これをすべて検討することは現実的でなかった。

この中から最適パターンを探索するため、モンテカルロ木探索<sup>\*2</sup>を用いた。これは、将棋や囲碁などで有望な手を探索するために利用されている最新のAIアルゴリズムである。熱処理パターンを一つ進めるごとにAIが次のパターンを提案するという試行錯誤を実施し、110個の有望な熱処理パターンが提示された。これらのパターンはジグザグと昇温と降温が組み合わせられた複雑なもので、人間にはとても思いつかないようなものであった。

そこで、このパターンがなぜ優れているのかを材料研究者が分析したところ、共通する特徴を見出した。それは、まず高温域で $\gamma'$ 相を急速に成長させ、結晶粒径が適正サイズを超える前に降温し、その後、低温域で長時間維持して、 $\gamma'$ 相の成長を抑えつ

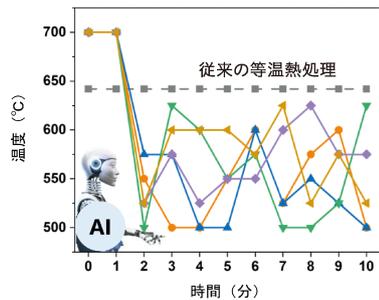
図2 研究に用いた電気化学自動実験ロボットの概要<sup>(4)</sup>

- (a) 注液部：様々な組成の電解液を自動でセルに注入し、ロボットアームで電極部へと運ぶ。
- (b) 全体像。
- (c) 電極部：上下の電極がセルを挟み、電解液の特性を一度に評価する。

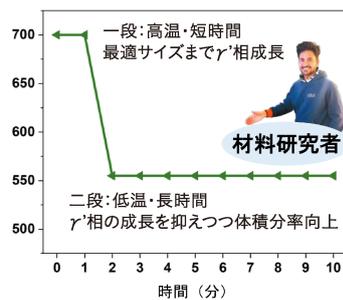


図3 AIと材料研究者の共同作業で考案した新しい二段熱処理法<sup>(5)</sup>

AIが提案した有望な熱処理パターンの例



材料研究者がエッセンスを抽出



\*2 モンテカルロ木探索：枝分かれする組み合わせを効率的に探索するAIアルゴリズム。スコアに基づいて有望な枝を選択して深掘りし、検証結果からスコアを更新するということを繰り返して、より優れたパターンを探索する手法。

# AIで加速する

## INTERVIEW

## AIの時代、より重要になる専門家の役割

材料研究の目的は人間が決めるものであり、ゴールを目指すための道にはいろいろな手段や道具がある。AIをうまく活用することによって、面白いものを素早く見つけることができる。AIはまさに夢のような道具である。

今後、AI技術が進歩すると、いずれChatGPTのような汎用的でフレキシブルなAIが、製造業や材料開発業に進出するかもしれない。AI同士が会話して目標を決め、その方向にどんどん進んでいくようになるかもしれない。また、AIが提案する最適化の対象は、部分最適からより広い全体最適へと変わっていくだろう。

例えば、AIが自動車を作ろうとして、予想外のデザインを提案したとする。その時、なぜこのデザインなのか、この材料でこの作り方をするのか。その理由が人間に理解できなくなるようなことはないか。万一トラブルが起こっても人間には対処ができず、トラブル対応さえもAIに頼らざるを得ないようなことにはならないかと思

出村 雅彦さん

国立研究開発法人物質・材料研究機構  
技術開発・共用部門 部門長

うことがある。

これからの研究者には、AIが出した回答に対して、なぜ良いのか良くないのかを説明することが求められる。言い換えれば、AIの回答の背後にあるメカニズムや理屈を解き明かすのは人間の役割ということである。これまで、人間がすべてのメカニズムを把握できてきたわけでは必ずしもないが、それでも、トラブルが起こった時には材料研究者は過去の経験に学び、問題点を一つ一つ解決してきた。これからも専門家としての責任は重いものになる。「本当にわかる」ことがますます重要になると思う。

つ体積分率をゆっくり増加させる、というものであった。つまり、この熱処理条件のポイントは、AIが見出した熱処理パターンに見られる昇温・降温の繰り返しではなく、高温・短時間と低温・長時間を適切に組み合わせることにあることが明らかになったのである (図3)。

この二段熱処理法はAIの発見の提案を材料研究者が実証・解析することにより初めてとどり着いたものであり、AIと人間の共同作業から新しい考え方が生まれたことを示す好事例だといえる。

日本の材料研究の  
優位性を生かす

今回紹介した事例のように、AIはうまく活用すれば今後の材料研究に大いに役に立ち、様々な課題解決に活用されていくと

思われる。

今後、AIの活用が期待されるテーマの一つに、金属積層造形用材料の開発がある。金属積層造形は、2次元断面を造形、積層させて3次元製品を得る技術だが、3次元データから直接製品を造形でき、従来の製造プロセスでは難しかった複雑構造の製品が製造できる。外形が複雑構造というだけでなく、金属材料の結晶組織やその異方性などの制御が可能と期待されている。しかし、金属積層造形が普及すると、鍛造、鍛造、切削などこれまでの金属製造・加工技術がなくても、材料やプロセスの“レシピ”さえあれば誰でもどこでも同じ製品を製造できる。これまで日本が蓄積してきた金属製品製造技術から見れば、ある意味で破壊的なイノベーションとも言える。日本のものづくり技術の優位性を保つためには、材料とプロセスの優れたレシピ作りが必須であり、そこでのAIの活用は強力なツールとして

大いに期待されている。特に金属材料は、温度によって状態や結晶構造が変化するため、最適な材料を設計して狙った特性を得るには、金属材料研究に関する膨大な知識が欠かせない。ここで期待されるのが、これまで日本に蓄積されてきた金属の深い知識や研究のバックグラウンドを生かした展開である。膨大なデータを蓄積・処理できるAIの活用、あるいはAIとの協同はそのための有力な方法の一つとなる。同時に、AIを実践できる人材育成が重要であり、AIが導き出した“仮想”の結果を“実体”に仕上げる技術も求められる。

道具としてのAIを人間がどう使いこなすか。日本のものづくり技術の優位性を今後とも保つために、AIとのより良い関わり方が求められている。

## 文 献

- (1) <https://www.ai-gakkai.or.jp/whatsai/Alfaq.html> (2024年2月20日閲覧)
- (2) <https://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/index6.html> (2024年2月20日閲覧)
- (3) G. Lambard, T.T. Sasaki, K. Sodeyama, T. Ohkubo and K. Hono: Scr. Mater., **209**(2022),114341.
- (4) S. Matsuda, G. Lambard and K. Sodeyama: Cell Rep. Phys. Sci., **3**(2022),100832.
- (5) V. Nandal, S. Dieb, D.S. Bulgarevich, T. Osada, T. Koyama, S. Minamoto and M. Demura: Sci. Rep., **13**(2023), 12660.

## 材料研究の進化