マテリアル革新力強化のために必要な取り組み

2020-4-24 東京工業大学 物質理工学院 教授　　一杉 太郎

準備会合一次取りまとめを踏まえ、今後必要となる取り組みについて、問いとそれに対する回答という形で文章をまとめた。

問い: 「高品質なマテリアルデータを戦略的に収集・蓄積・流通・利活用できる仕組み」と、「高品質なマテリアルデータが産学官から効率的・継続的に創出・共用化されるための仕組み」の双方を兼ね揃えた、マテリアル研究開発のための我が国全体としてのプラットフォーム(マテリアル研究開発プラットフォーム)を整備するにあたって、マテリアルデータの取扱いに関する共通指針の策定や、共通的なデータ収集・蓄積・流通・利活用のための基盤の構築を進める必要がある。その際、どのような点に留意すべきか、また議論すべき点はどこか。

マテリアルデータの取扱いに関する共通指針の策定について

参考になるモデルがある。特にマテリアル分野で注視しているのがベルギーの imec である。主に半導体デバイスや半導体用材料の開発拠点として世界中からここに研究者が集まり、技術革新とデータ共有が行われている。人が集まる理由は、**他グループのデータも活用する**ことができ、研究がはやく進むからである。そこでは、「人が集まる→技術が進む→データやノウハウが蓄積する→技術が進展する→人がさらに集まる」という**正のスパイラル**ができている。

そして、今、**imec は電池材料等、徐々にその守備範囲を広げ**ており、我が国のマテリアル研究にとっては非常に脅威である。したがって、我が国としては人材育成を含めて**戦略的にマテリアル革新力を強化**していく必要がある。

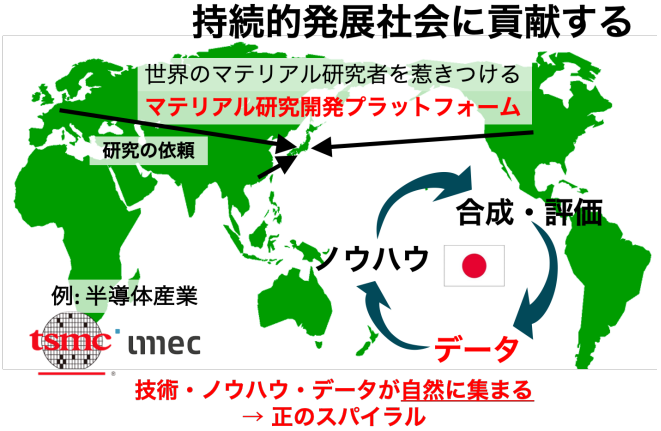

図 1　マテリアル研究開発プラットフォームでは正のスパイラルを作り出し、マテリアルを通じて社会に貢献する。

マテリアル研究開発プラットフォームを構築するにあたっても最も重要な点は、日本で「正のスパイラル」をいかに実現する

か、という点である(図 1)。以降、そのプラットフォームを前提として議論を進める。

マテリアルデータの取扱いに関する共通指針の策定において、重要なことが二つある。1 つ目が、公平性、透明性である。2 つ目がオープン・クローズ戦略である。

【公平性、透明性について】ある私企業を優先的に利する、となると有用なデータを世界中から集まることができず、活用もできない。したがって、マテリアルデータを集め、活用するマテリアル研究開発プラットフォームには高い公平性、透明性を持たせる必要がある。設立当初は公的機関が支援し、その後、**装置の使用料ではなく、データ利活用と特許から得られる収益**で自立するのが理想である。さらに、プラットフォームに参画する企業と共に、スピンアウト企業を支援して価値を生み出す。**高度なマーケティング、セールス戦略**が必要である。

【オープン・クローズ戦略】すでに、「準備会合一次とりまとめ」資料で述べられているので、より具体的に考慮すべき点を述べる。データの種類は、

1. オープンデータ(公知情報：特許や論文等の誰でも利用可能なデータ)
2. クローズドデータ(秘匿情報：企業内データ等の個々の限定されたデータ所有者が利用するデータ)
3. **シェアクローズドデータ**(限定共用情報：クローズドデータのうち、個別単位を超えた複数の単位で戦略的に共用すべきデータ)

と整理されている。このうち、シェアクローズドデータを増やすことが論点となる。このデータは、たとえば、ベストな特性ではないデータ、企業の事業とは合致せずもはや秘匿しなくてもよいデータなどである。

重要なことは、**データを提供すればするほど自社にメリットがある**、という仕組み作りである。「自分がデータを共有すると、他の研究者が生成したデータをも活用でき、自社のパフォーマンスが向上する」という仕組みである。まずは、そのような考え方に理解がある研究者、企業からコンソーシアムを作るのが近道であろう。そして、ルール作りにおいて、**官製ルールを押し付けるのではなく、フレキシブルに企業の要望を取り入れる**必要がある。ルール整備については、多くデータを出した者と少ないデータしか出していない者の差について公平性、透明性という観点、データの所有権と利用権の区別、知財の仕組み、セキュリティ等、多く検討事項がある。

すでに筆者らは、独自開発した AI/Robot 物質合成システムから出てくるデータについて、データ共有スキームの議論を企業と進めている。細かい議論となるのでここでは述べないが、大きな方向性として、**プラットフォームへの入り口の敷居は低くし(安い使用料と少ない縛り)、なるべく多くシェアクローズドデータを集める**という方針で検討を進めている。

共通的なデータ収集・蓄積・流通・利活用のための基盤の構築について

我が国において、正のスパイラルを作り出す基盤(図 1)をどう構築すれば良いのか。そして、それが外部資金からのみで完全に成り立つようにするにはどうするのか、という観点で考える。

ここで重要になるのは、**世界的に見て突出した強み**があり、「**データやノウハウ**」**がその基盤に蓄積**されることである。その強みは、**ハイスループット実験(ビッグデータ形成)**と、**高度な新マテリアル予測技術**であろう。imec との大きな違いはこの二点であり、これがマテリアル研究開発プラットフォームを唯一無二として世界から研究者を惹きつける強みとなる。単に、**スタンドアローンの装置が何台も並び、その装置で作ったデータをアップロードするだけでは、有用なデータやノウハウを蓄積することはできない**。したがって、AI とロボットを活用したアプローチが重要になる。すでに**ナノテクプラットフォームや放射光施設などが我が国に揃っており、それらを土台としてシステム化**していくことで、唯一無二の拠点を日本に築くことができる。

論点は二つある。一つが、収集・蓄積の観点であり、もう一つが利活用の観点である。

【収集・蓄積の観点→ハイスループット実験】人間がデータを手で入力していることでは、まったくスピードは上がらず、データは集まらない。人間が入力するのはコスト(金銭的、時間的)がかかりすぎる。そして昨今、入手できるデータの種類は増える一方であり、例えば実験パラメータのみではなく、反応中における温度の時間変化やガス圧の時間変化、画像情報など、マテリアル特性に影響を与えるデータをも収集、蓄積しなければならない。これらを人が入力するのは困難であり、**抜本的な研究の進め方の改革が必要**となる。

そのために、**AI とロボットを組み合わせた実験スタイル**の導入が急がれる。それらはすべてコンピュータで管理されているので、合成条件や評価結果、合成中のプロセスデータ等をデータベースに登録するコストは非常に低い。つまり、データを各所からかき集めるのではなく、**拠点でデータを自ら作り出す**のである。

このような仕組みは、各装置をばらばらに購入してスタンドアローンで置いておくことでは実現できない。**実験室全体をシステム(デジタルラボラトリ)**として捉える発想が必要である。そして、将来の実験室のあるべき姿は容易に想像できる。

モビリティ(自動車)の世界で CASE という言葉がある。Connected、Autonomous、Shared、Electric の概念を示したもので、これをもとに将来の実験室像を考える。実験室でも AI とロボットを活用し(図 2)、合成や評価を担う各実験装置を Connected、Autonomous(自動化、自律化)し、**人間の知識・経験・勘を統合**して、そのプラットフォームを share する。その際、個々の合成、評価、判断を High-throughput 化し、**ものづくり全体をスピードアップ**し、かつ、**研究者が創造性を発揮**できる環境にする。

ここでは、合成、評価、次の判断という **PDCA サイクルが自律的**に進んでいき、目的に到達するまで実験が進行する。これを **closed-loop と呼び、世界で非常に急速に立ち上がりつつある**。このデジタルラボラトリとマテリアルズインフォマティクスを組み合わせ、現在より **100 倍速い材料開発スキーム**を確立することが考えられる。このような考え方がマテリアル研究開発プラットフォームに必要だろう。すでに筆者の研究室では、一つだけの実験パラメータであるが、closed-loop で新マテリアルを合成することに成功している。

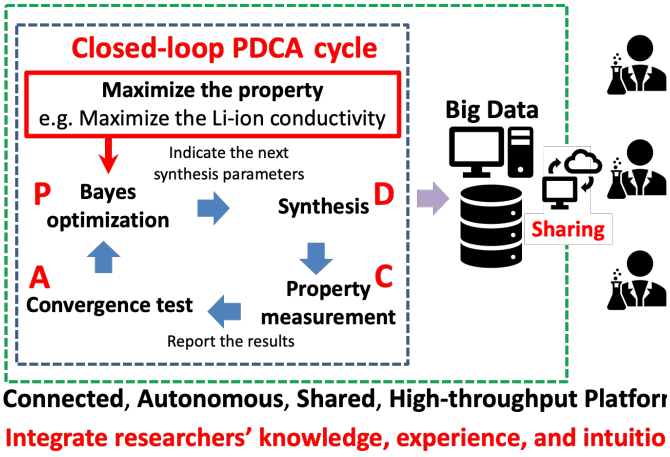

図 2　将来の実験室(デジタルラボラトリ)の概念図。自動的に PDCA サイクルが回り、マテリアル開発が進む。すでに筆者の研究室では、一つだけの実験パラメータであるが、closed-loop で新マテリアルを合成することに成功している。

このようなデジタルラボラトリ構築あたり、ロボットは高価なのでそのような研究スタイルは不可能だという指摘を受ける。しかし、**ロボットは日本の産業の強み**であり、安価になりつつある。たとえば、デンソーの cobotta というロボットは、通販で三百万円以下の価格で販売されている。人件費を考えると、大学でも導入しうる金額に下がっている。我が国の全研究室をシステム化すべきというわけではなく、拠点であれば導入しうる。

このような**ロボットと後述する AI 技術を強化することは、日本の産業基盤の強化**に直結する。**経産省、文科省をはじめとする官庁、さらに産業界が一丸となって拠点形成に取り組み、そこから生まれる技術(マテリアル、ロボット技術、AI 技術)を速やかに産業に展開すべき**と考える。

【利活用の観点→高度な新マテリアル予測技術】

いったんデータの収集・蓄積が進むと正のスパイラルに入ることができる。その鍵が新マテリアル予測技術である。現在の**マテリアルズインフォマティクスの課題の一つにビッグデータが存在しない**ということが挙げられる。それが上記のデジタルラボラトリで解決するので、予測精度を上げることができる。そして、**AI 技術の開発を進め、マテリアル予測技術を磨く**。この予測技術に、**日本の研究者や技術者が持つ良質の知識・経験・勘を統合**すれば、**日本でしか構築し得ない AI システム**となりうる。これがマテリアル

研究開発プラットフォームのもう一つ武器となるだろう。

AI 技術の進歩は著しい。説明可能な機械学習や symbolic regression 等、人間の研究者に「気づき」を与える AI も発展してきている。これら技術を活用し、**単なる相関関係から確たる因果関係**の理解へとつなげ、**学理構築にも貢献**することができるであろう。

問い: データ駆動型研究開発やスマートラボラトリといったデジタル技術の活用を進めることで、生産性の高い、世界で最も魅力あるマテリアルの研究開発環境の整備を推進するにあたり、議論すべき点はどこか。

マテリアル研究開発プラットフォームの整備にあたり、圧倒的に不足しているのが、そのような拠点構築に貢献しうる、**マテリアルと情報科学・ロボットの視点を持った人材**である。製薬やバイオ関連では海外で多くの研究例が出てきている。しかし、**マテリアル分野は、世界的に見ても、プレーヤがいまだ極めて少ない**。したがって**チャンス**である。我が国が世界をリードするには、AI・ロボット、そしてデータを活用した研究スタイルの有用性を理解したマテリアル研究者、技術者をいち早く育てる必要がある。

以上より、**「AI・ロボットを活用した新しい研究スタイル」という文化の醸成**が重要である。今、たとえば、応用物理学会、日本化学会、日本物理学会の会員の中で、AI やロボットを使った研究が今後ますます重要になる、という意識を持っているのは 10%程度ではないかと感じる。AI・ロボットについて多くの講演を行ってきたが、聴衆の反応を考えるとその程度である。特にアカデミアには、研究スタイルに革新をもたらすことに抵抗感を感じる方が多い。**文科省・経産省には「AI とロボットを活用した研究開発」という文化を、アカデミアと企業に創ることを期待**したい。

新しい研究スタイルの浸透に向け、AI ロボットシステム導入のための研究予算を作ることが考えられる。先に述べたように、ロボットは人件費に比べて安い時代である。技術が進歩し、ティーチングも非常に簡単になっている。**付加価値を生まない繰り返し作業はロボット化していくべき**であり、徐々に AI とロボットに研究作業を任せていく文化を育てる必要がある。

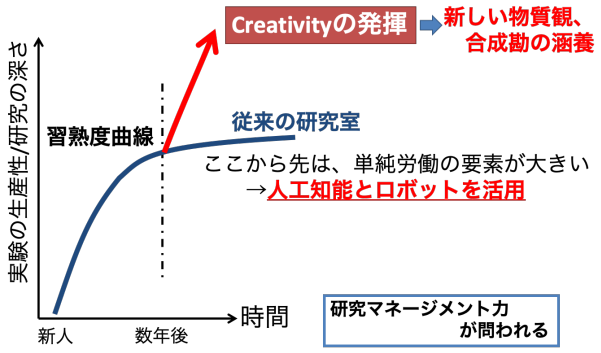

図 3　より創造的な研究に取り組む時間を増やしたい

するとその**浮いた時間を付加価値がより高い研究に振り分けることが可能**となり、我が国の競争

力が増すだろう。もちろん、従来の進め方である、**勘・コツを重視するという進め方と並立させるべき**である。

もう一つ重要な点は研究費である。AI とロボットを活用したマテリアル研究開発の方向性は、今後、揺るぎないものである。したがって、**速やかに大規模投資を行い、10 年後に自立していくというイメージ**を共有することが必要である。政府、産業界が一丸となって、**10 年間で 1000 億円程度投資しても、その後の新マテリアル開発費でペイできる**と考えている。

問い: マテリアル×デジタル融合の専門人材(M×D 人材)を育成するにはどのような観点が重要か。

まずは目指す人材像を明確にしたい。私は東京工業大学の物質・情報卓越教育院(図 4)において副教育院長を務めており、企業との連携を担当している。すでに 22 社が会員企業となり、資金をいただきながら学生を育てている。この活動を通じ、企業の方々と人材像について意見交換する機会が多い。

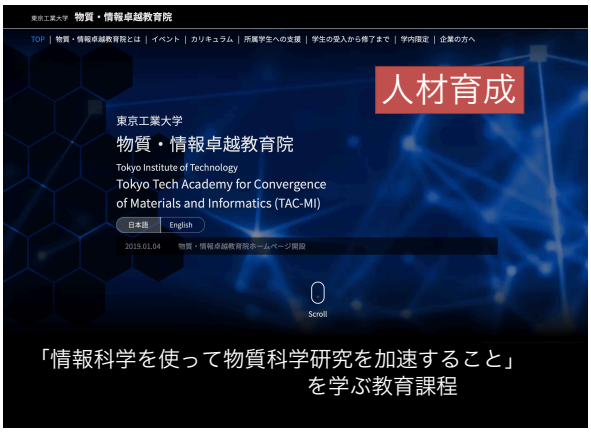

図 4　物質・情報卓越教育院のトップページ

その観点で、もっとも重要、かつ、現実的に育成可能な人材像が明確になっている。それは、「**マテリアルの実験家、あるいは理論家でありながら、情報科学をツールとして使いこなす人材(M×D 人材)**」である。まずは、マテリアルのことを深く知っているということが重要である。その上で、機械学習(ベイズ最適化やスパースモデリング、深層学習)のソフトを、あたかもワードやエクセルを扱うのと同じように、使いこなせる実験家である。ここでは、このような M×D 人材育成について議論する。

このような人材について言及する時、特にアカデミアから頻繁に問われるのは、そのようなツールを、中身の原理を知らずに使って良いのか、という点である。もちろん、原理が分かっていた方が良いが、そのための労力との兼ね合いである。完全に理解するには、高度な数学的知識が要求されるということもあり、現段階では、中身の原理をある程度知っていれば情報科学ツールとして使っていても良いと考えている。我々が XRD や SEM をつかうのに、どこまで深く知っているだろうか。深く知る必要がある時に学

べば良い。したがって、**困ったときに情報科学の専門家に質問できる程度の知識**でまずは十分である(もちろん教育院では原理までしっかり教えているが、どこまで理解して利用しているかは不明である)。

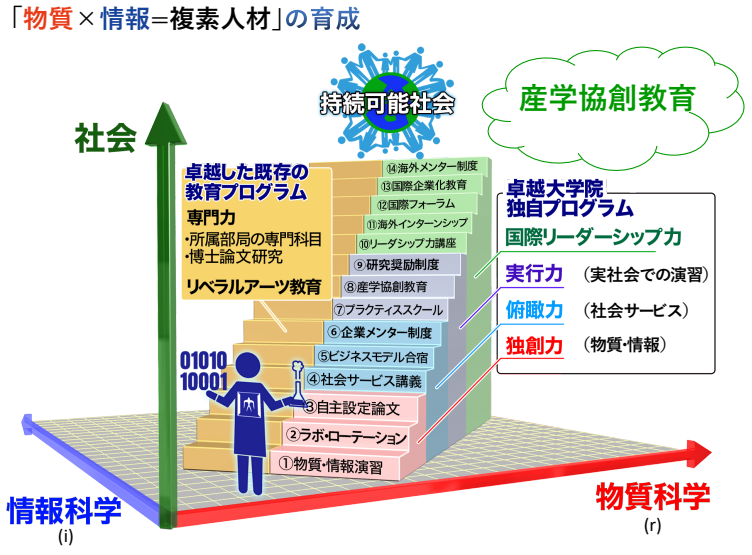

図 5　東京工業大学 物質・情報卓越教育院の取り組み

この議論で最も重要なことは、「**どの問題にどのツールを適用すると効果が出るのか**」という**課題設定の目を養う**ことである。**私自身の経験では、課題設定が良ければ、情報科学ツールはマテリアル研究を大きく加速できる**。そして逆に、課題設定が悪ければ、情報科学は全く役に立たない。M×D 人材にとって、この課題設定の目を養うということが非常に重要であると考えている。

これは座学だけでは学べない。そのために、1. 座学と同じだけの時間、演習を行う、2. **ラボローテーション**、3. **物質・情報プラクティススクール**を実施している(図 5)。ラボローテーションとは、実験系の学生さんが情報系や計算のラボを体験するもので、物質・情報プラクティススクールとは学生と教員が 6 週間企業内にこもり、**最新の情報科学を使ってマテリアル企業の課題を解決**するものである(添付資料(東京工業大学 物質・情報卓越教育院パンフレット)参照)。この物質・情報プラクティススクールは世界で唯一であると考えている。これらを通じて、実践力を磨き、課題設定する目を養っている。

このような人材が産業界に入れば、研究開発だけではなく、生産技術、製品企画、サービス構築等、あらゆるセクターで活躍できることは確実である。それは、産業界としての生産性革命につながるだろう。

そのような人材育成を行うにあたり、産業界には、大学院教育にもっと関心を持っていただきたい。大学院で良い教育が行われれば、企業でもすぐに活躍できる。したがって、大学と企業は一蓮托生と言える。大学教育への理解をもっていただくとともに、資金提供をお願いできれば考えている。

様々な大学における M×D 人材育成を、経済産業省、文科省、内閣府をはじめ、政府全体で後押しすることをお願いしたい。具体的には、そのような文化の醸成、税制面での優遇等、大学と産業界のリンクを強化する政策をお願いしたい。

問い: 世界中から優れた人材を惹き付け、外国人の活躍・定着を促すために重要な点は何か。

世界から優れた人材を惹きつけるという点で、**唯一無二の強みがある拠点**を作ることが近道だろう。つまり、ハイスループット実験と新マテリアル予測技術に圧倒的な強みを持つマテリアル研究開発プラットフォームが、「正のスパイラル」を作りだせば、自然に外国人研究者の活躍、定着が進むだろう。

上記の議論は、WPI プログラムで外国人研究者の活躍、定着を目指すための議論と全く同じである。そのため、別の論点で一言述べたい。

昨今、日本の研究力低下が叫ばれている。具体的には論文数が一つの重要指標になっており、その総数の減少が研究力低下を反映していると認識されている。この研究力低下は社会的な構造変化もあり、ある程度受け入れざるを得ないと考えている。

心配なことがある。研究力が低下しているというネガティブな面のクローズアップが続くと、「日本全体が暗い雰囲気になってしまう→ますます学生は理系から離れ、博士進学数も減る→大学も弱体化→技術で勝負するあらゆる産業界に人材が集まらない→産業界が沈む」という**負のスパイラル**に陥ってしまうと危惧している。

そこで、統計データの中でも、日本の将来をプラスに考えられる指標や切り口に注目し、**ポジティブにとらえられることは皆で共有し、建設的な議論**を行っていければと考えている。ネガティブな情報に加え、ポジティブな情報も同時に議論して、**日本全体の風潮が必要以上に暗くならないように注意**しなければならない。つまり、**マーケティング、広報戦略が非常に重要**である。

学生や研究者は皆一生懸命頑張っている。「大学が元気で良い人材を育てて産業界や社会に貢献する → 社会は大学をより一層支援するようになり、大学がさらに元気になり研究・教育がレベルアップする → 良い人材を輩出し、産業界も潤う」。ここでも、正のスパイラルが理想である。

そのような国でこそ、外国の方々は仕事をしたいと思うし、生活をしたいと思うのではないだろうか。

問い: 次代を担う児童・生徒・学生に対してもマテリアルの研究開発の魅力を提供・発信するために有効な取組

これは、大変重要なことである。**文科省・経産省が果たすことができる役割は大きい**。ここでも情報発信の仕方、つまり、**マーケティングが重要**である。**企業はマーケティング・広報に膨大な資金をつぎ込んでいる**。そのようなセンスで、上手な情報発信を期待する。文科省・経産省内に専門のマーケティング部署を作り、マテリアルのイメージア

ップを図る戦略作りと実行を強く期待する。それは良い学生をマテリアル分野に集めることに大きく寄与するだろう。

大局的に、「マテリアル」のイメージアップ戦略が必要である。今、宇宙や深海はロマンがあるとされている。実は**マテリアル研究にもロマンがある**。考えられるマテリアルは 10^{60} 個以上とされ、膨大な数である。したがって、有用なマテリアルに出会うチャンスは多数あり、**我々の目の前には未開拓のフロンティアが広がっている！**

図 6　**マテリアル開発研究には夢がある!**

そして重要なことは、世の中のイノベーションの多くにマテリアルが関わっていることである。携帯電話が実現してライフスタイルが変わったのも、人工知能が実現するのも、マテリアルの革新があったからこそである！(EU の報告では、イノベーションの 70% にマテリアルが関わっているとのこと)

今、マテリアルは複雑になり、さらに元素数も増えており、多次元空間内への探検となっている。そして、我々はその**マテリアル探検を行うための探査機(= AI ロボットを活用した実験システム)を手にしつつある**。したがって、**マテリアル研究者にとって、挑戦がどんどん進められる大変良い時期**になったと考えている。

そして、**良いマテリアルを発見できれば、社会にすぐに貢献しうる**。

マテリアル研究とはなんと夢に満ちあふれているのだろうか！

まとめ

以上、長々と書いてきたが、現在の日本における産業界・学界の強いマテリアル基盤をさらに発展・強化するにあたり、重要なことをまとめる。

1. AI とロボットを活用した**新しい研究開発の進め方**を確立し、**産業界と学界、政府が一丸**となって、マテリアル研究を進めること
2. そこで発展した、マテリアル、AI、そしてロボット技術は世界最先端なものに磨かれ、そこから**スピンアウトした技術が産業界と社会を潤す**
3. さらに、そこで育った **M×D 人材は、社会のあらゆるセクターで活躍する**

以上に加え、マテリアル研究開発プラットフォームの設立に際して、過去のプロジェクトにおいてデータ共有がうまくいった例とうまくいかなかった例について原因を精査し、その結果をフィードバックすることが重要であることを指摘し、脱稿とする。