

2021年9月16日

未来社会創造事業 キックオフ公開シンポジウム
マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築

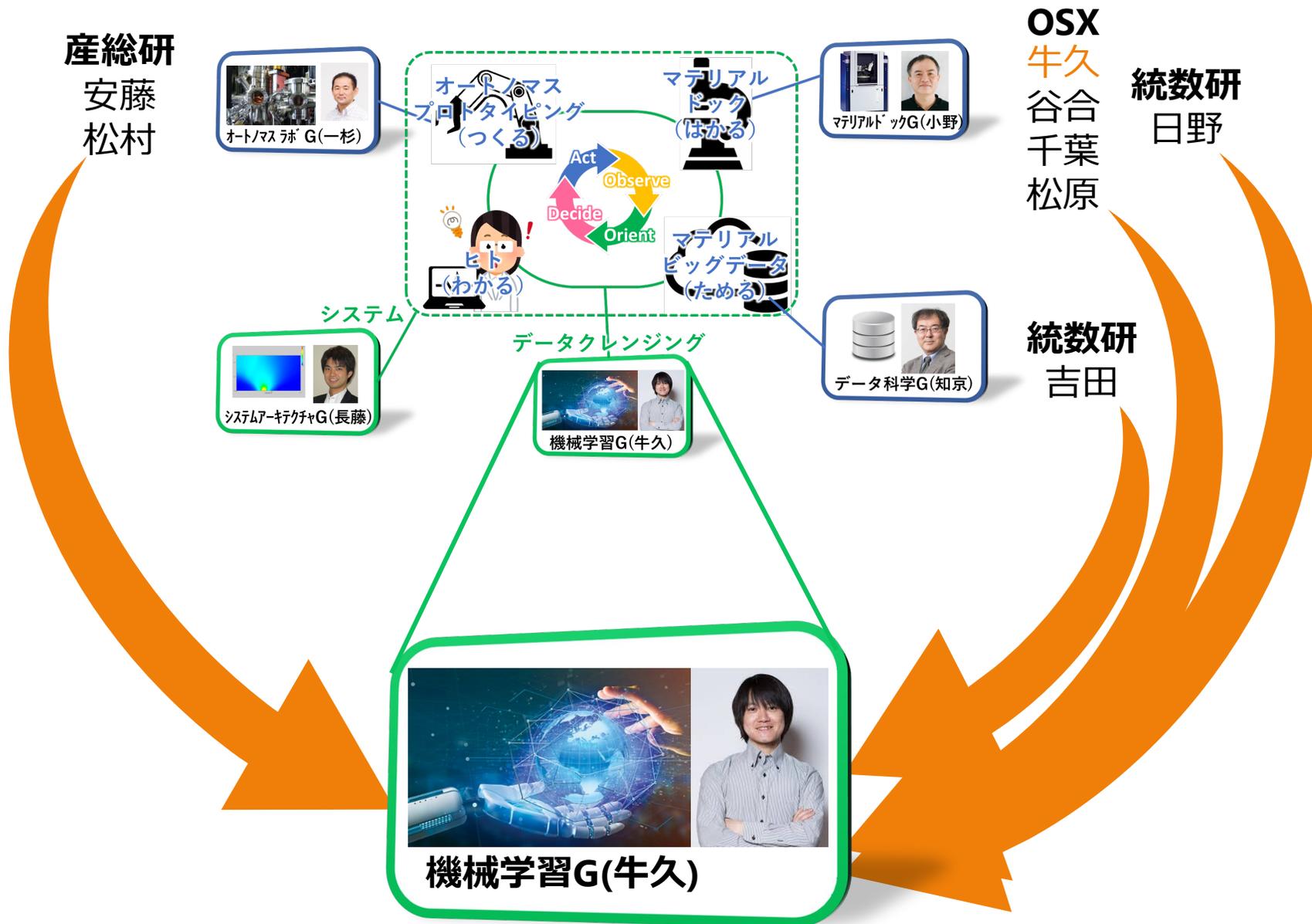
マテリアル探索のための機械学習

オムロン サイニックエックス (OSX)

  牛久 祥孝

  losnuevetoros

第5のグループ：各課題の機械学習研究者が集結





吉田 亮 (よしだりょう)
統計数理研究所



日野 英逸 (ひのひでいつ)
統計数理研究所



安藤 康伸 (あんどう やすのぶ)
産業技術総合研究所



松村 太郎次郎 (まつむら たろうじろう)
産業技術総合研究所



牛久 祥孝 (うしく よしたか)

オムロン サイニックエックス / Ridge-i



谷合 竜典 (たにあい たつのり)

オムロン サイニックエックス



千葉 直也 (ちば なおや)

オムロン サイニックエックス / 早稲田大学



松原 慶朋 (まつばら よしとも)

オムロン サイニックエックス / UC Irvine

マテリアル探索のための機械学習

4つのキーワード

- **順問題と逆問題**

- 材料からの物性の予測 ⇔ 物性からの材料の予測

- **実験加速**

- ハイパーパラメータ探索や測定効率化

- **マルチモーダル理解**

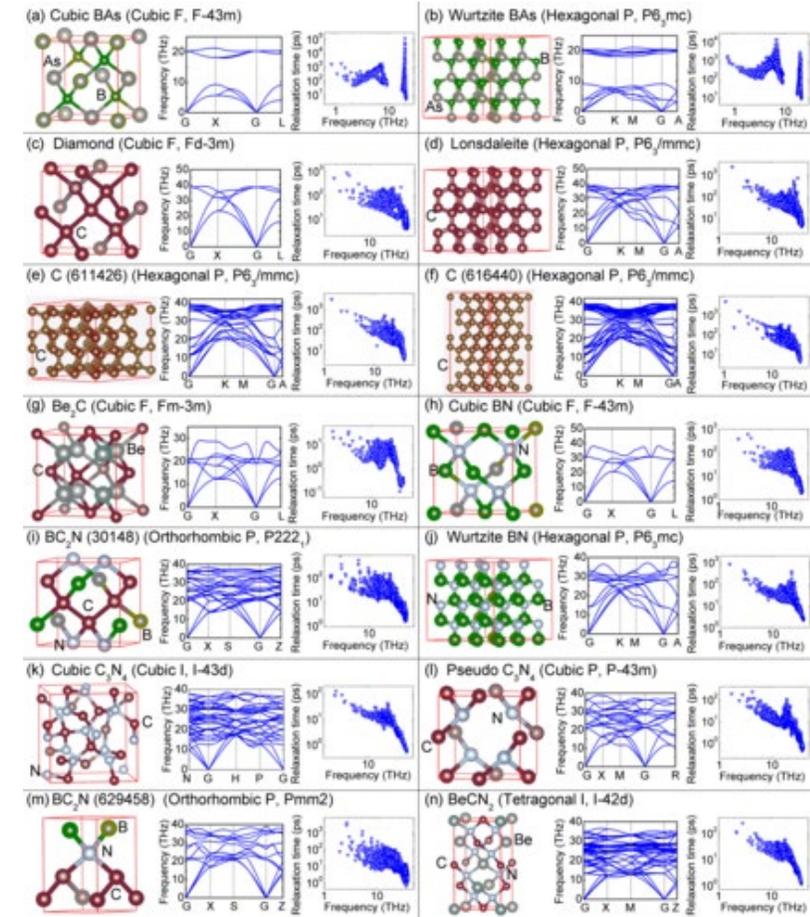
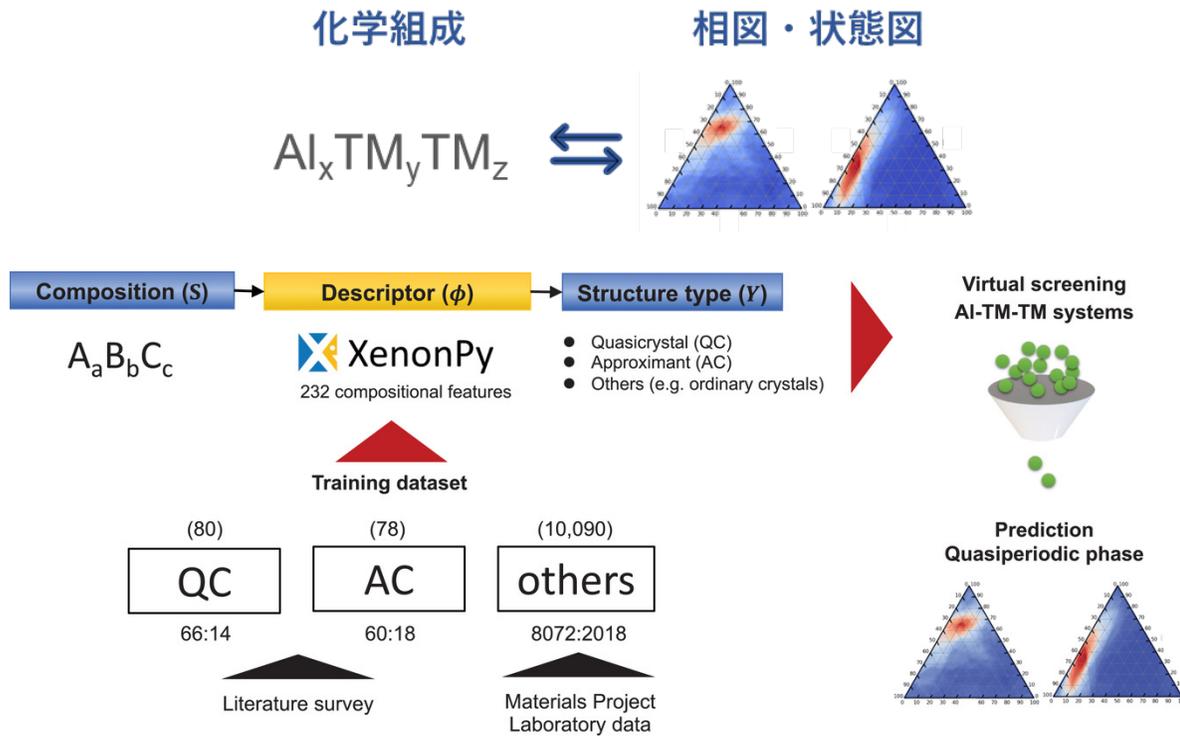
- 複数種類の情報を統合した予測/生成/検索

- **物理的説明性**

- 数式的/物理的法則を露わに取り込んだモデル化による予測

順問題と逆問題

材料からの物性の予測 ⇔ 物性からの材料の予測

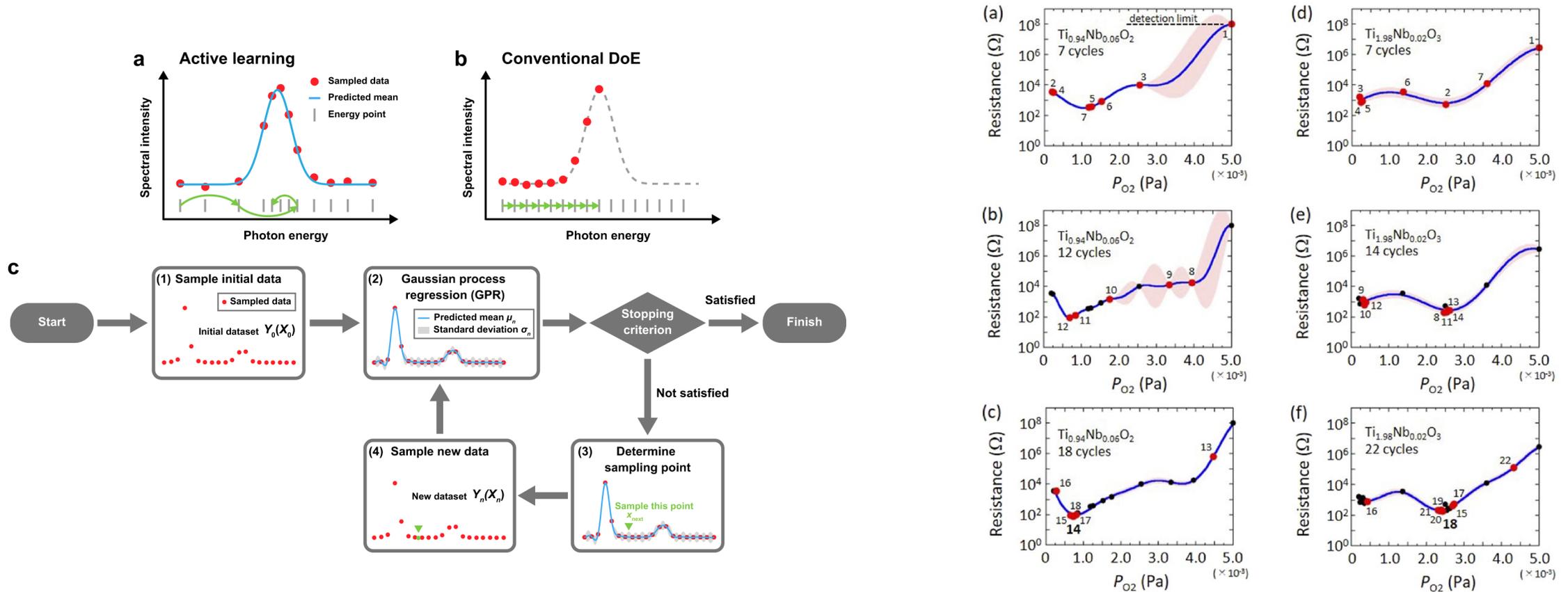


組成からの相推定 [Liu+, Advanced Materials'21]
 アルミニウム三元系からの準結晶予測

転移学習の活用 [Ju+, Phys. Rev. Materials'21]
 超高格子熱伝導材料の熱伝導率推定

実験加速

ハイパーパラメータ探索や測定効率化

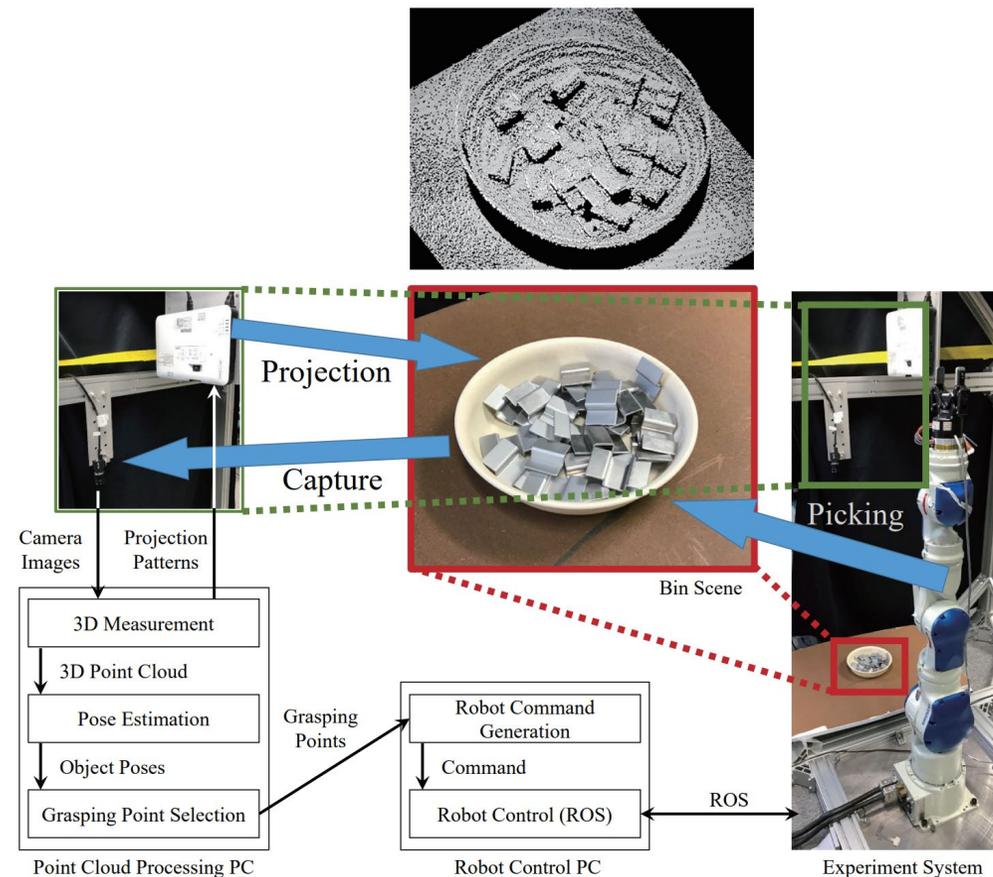
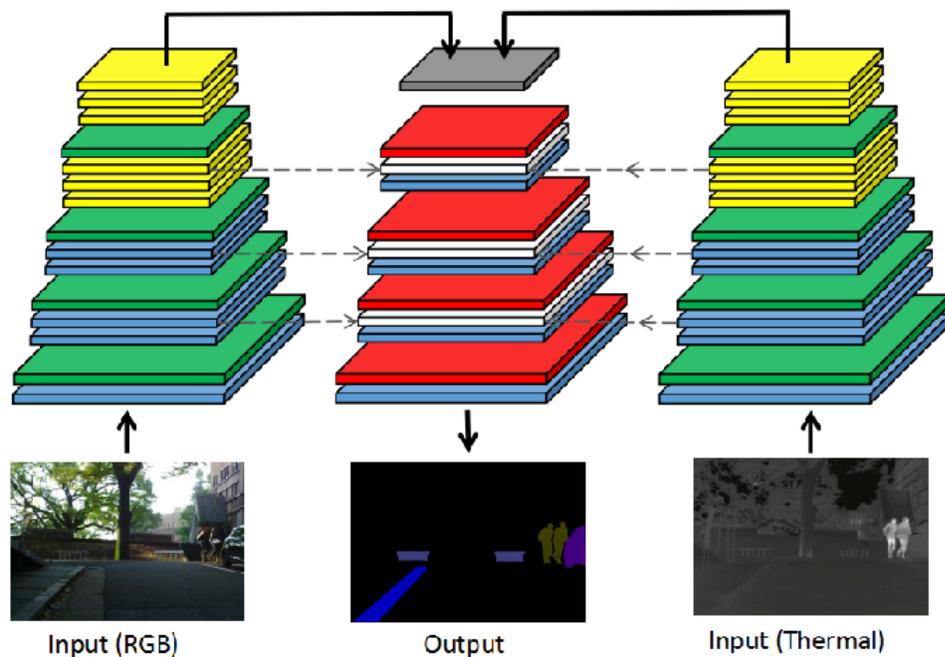


計測の終了判定 [Ueno+, npj Comp. Mat.'21]
能動学習によるX線吸収分光法の効率化

ロボティクスとの融合 [Shimizu+, APL Mat.'20]
ベイズ最適化による合成条件探索の効率化

マルチモーダル理解

複数種類の情報を統合した予測/生成/検索

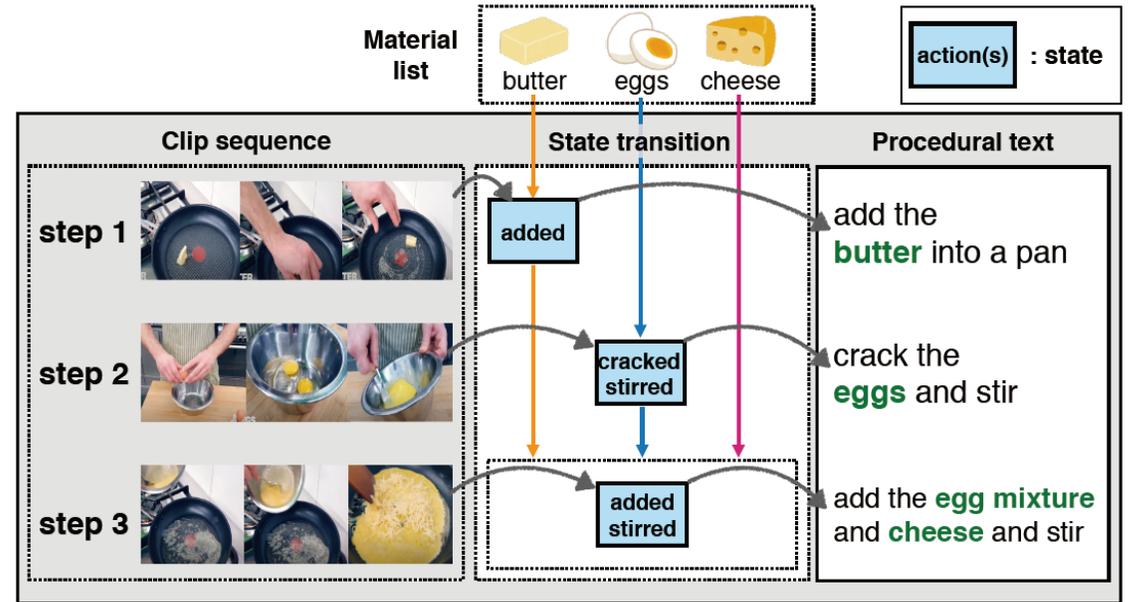
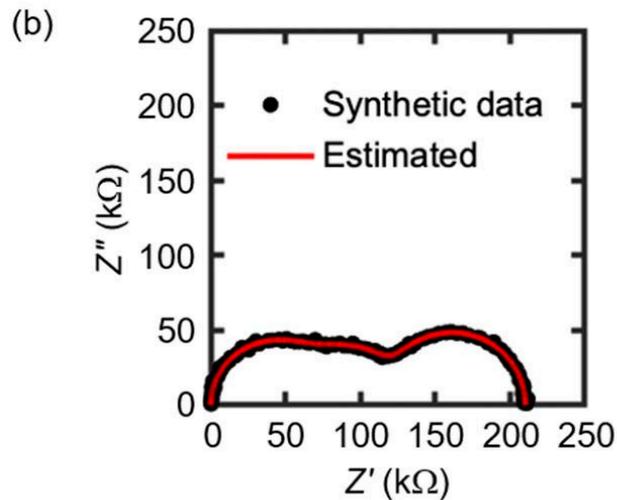
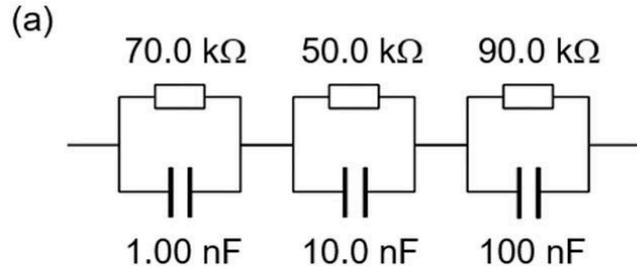


複数のモダリティの統合 [Ha+, IROS'17]
多種のデータを組合せて認識を高精度化

新たなモダリティの理解 [Chiba+, ROBOT'19]
3次元構造データの理解とロボット操作

物理的説明性

数式的/物理的法則を露わに取り込んだモデル化



物理モデルによる推定 [Miyazaki+, AIP Adv.'20]
電気化学インピーダンス分光の等価回路

現象の言語的な説明 [Nishimura+, ACMMM'21]
作業工程マルチモーダル情報の言語記述

NEDO 人工知能 (AI) 技術分野における大局的な研究開発の アクションプラン・シンポジウム

～日本が目指すべきAIの社会実装の方向性～

日時：6月15日 (火) 09:30～12:00 参加費：無料

オンライン開催



札幌市立大学
学長

中島 秀之氏



東京大学
先端科学技術
研究センター教授

稲見 昌彦氏



OMRON SINIC X 株式会社 PI
株式会社Ridge-i
取締役 CRO

牛久 祥孝氏



株式会社
経営共創基盤
共同経営者
マネージングディレクター

川上 登福氏



東京大学
教授

松尾 豊氏



花王株式会社
エグゼクティブフェロー

丸山 宏氏



産業技術総合研究所
人工知能研究センター
副研究センター長

村川 正宏氏

今後10年間のアクションプラン

AIを積極的に活用すべき分野

AIの技術開発の方向性

深層学習

意味理解のAI

記号推論と深層学習の結合による意味理解のためのAI

深層強化学習の新たなアーキテクチャの創出

シミュレーション

演繹と帰納の融合

シミュレーション×機械学習（演繹+帰納）の方法論の確立

分子設計のためのAI

部分最適化

全体最適化／人とAIの関係性の多様化

製造プロセス全体を最適化するAI

人の学習工程の解明とAIによる学習支援

人体の個人別モデル化（ヒューマンデジタルツイン）

ビッグデータ依存

スモールデータ駆動

脳の活動の研究によるメタ認知を備えたAIの開発

転移学習技術の確立

画像・音声など、個別の認識精度の向上

モダリティを統合した環境認識

多品種少量生産の効率化に向けたAI技術の開発

無人搬送車（AGV）などのための環境認識技術の精度向上

多様な情報から医師に選択肢を提示できるAI

取り組むべきAI技術開発

これまで

今後10年間

シミュレーション×機械学習（演繹＋帰納）

期待される社会像

社会実装例

効率的なシミュレーションによる材料探索・創薬、自動運転などの推進

機械学習を組み合わせたシミュレーションの分野・手法を整理・開発して多分野に展開し、上記分野などの技術開発を加速する。

社会像に向けた取り組み

分野と方法論の組み合わせを整理し、他分野への適用を図る

人間の知識に基づく演繹（前向き推論）と、データに基づく帰納（後ろ向き推論）を組み合わせ、双方のメリットを持つ予測・推論手法を開発。気象予測におけるデータ同化など、現状はいくつかの分野において個別に試みられているシミュレータ×機械学習の手法を整理し、総合的に開発。まだ着手されていない分野・手法を同定し、開発した手法をそこに適用していく。

取り組むべきAI技術開発

演繹と帰納、双方向の推論による手法を開発

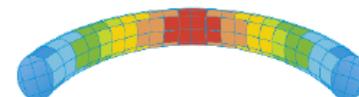
演繹的手法としては、シミュレータを用いて機械学習の訓練データを生成。データが得られにくい事象をカバー。帰納的手法としては、機械学習を用いてシミュレータのパラメータを調整（データ同化）、高速化する。

様々なシミュレーション手法

マルチエージェント



有限要素法



多数の要素を実際に動かしてみるマルチエージェント、メッシュに分解して個々の状態を見る有限要素法など、様々な手法がある

転移学習技術の確立

期待される社会像

社会実装例

新たな材料開発によるカーボンニュートラルへの貢献

AIによる材料探索によって、低コスト高効率な新たな材料を開発し、クリーンエネルギーの普及を図る。

社会像に向けた取り組み

より高効率な太陽光発電やバッテリーなどの開発に向けたAIによる材料探索技術の開発

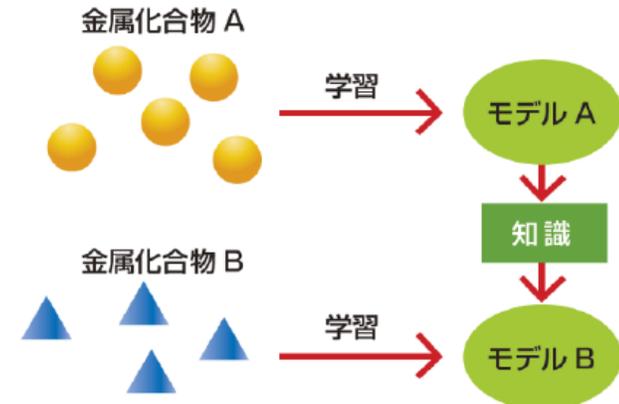
有機化学やバイオの材料開発の手法ではうまくいかない重い原子を扱える、相対論的な効果も踏まえたAIによる材料探索技術の開発。

取り組むべきAI技術開発

スモールデータを的確に扱える転移学習技術

少ない試行回数しか得られない実験データ、あるいは人口の少ない地域の風習など、スモールデータからの学習に際して、類似する他のデータの学習で得られた知識を転用することで、精度良く学習できる転移学習技術を開発する。

スモールデータに転移学習で対応



例えば目的とする金属加工物の実験データが少なくとも、違う加工物を学習した知識を転移することで、効果的な対応が可能

分子設計のためのAI

期待される社会像

社会実装例

新たな感染症に対応できるバイオ医薬品の迅速な開発プラットフォーム

生体分子設計などの分野において、開発プラットフォームの整備によって新規の感染症に対するワクチンやバイオ医薬品開発の迅速化。

社会像に向けた取り組み

多ノイズでデータが少ないなど、機械学習や高精度なシミュレーションが難しい分野での開発基盤整備

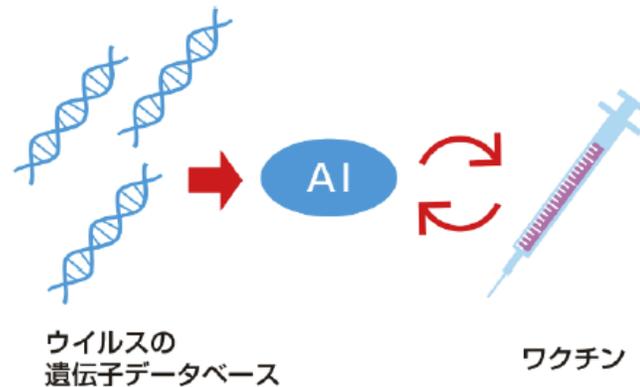
ノイズが多い場合の機械学習手法や、量子計算シミュレーションが活用できない場合のシミュレーション技術の開発。

取り組むべきAI技術開発

分子などの設計のためのAI

生体分子を扱う領域の設計に際しては、現状は分子構造を「Transformer」などの大規模言語モデルを活用して、文字列として扱っている。分子構造自体を扱えるなど、データ駆動型の研究開発の基盤となるAI技術を開発する。

ウイルス遺伝子を学習してワクチン開発



ウイルスの遺伝子を学習してワクチンを作成、治験結果からさらに品質の高いワクチンをといた開発基盤の平時からの整備

製造プロセス全体を最適化するAI

期待される社会像

社会実装例

AIを活用したプロセス最適化による産業競争力の向上

材料・設計探索から製造プロセス全体をデータ駆動型として最適化。製品開発の効率化と産業競争力向上を図る。

社会像に向けた取り組み

無機化学の領域で活用できる共通基盤としてのAI技術開発

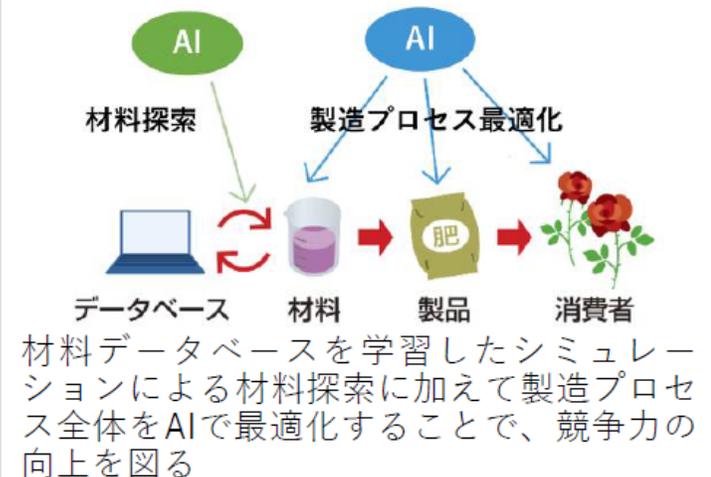
有機化学や創薬ではAIはすでにより活用されているが、無機化学などでも同様に材料探索に活用できるAIを開発。材料探索の際、最終製品を踏まえた評価が必要となるため、材料探索だけでなくプロセス全体をAIによって最適化する。

取り組むべきAI技術開発

材料探索に加えて製造プロセス全体を最適化するAI

材料探索へのAI活用に加えて、需要の変化が生産、ひいては設計や材料探索に反映されるまでのリードタイムを最小化するとともに、プロセス全体をコスト・品質・環境負荷・レジリエンス（復元力）など、多目的に最適化するAI共通基盤を開発する。

材料探索とプロセス全体をAIで最適化



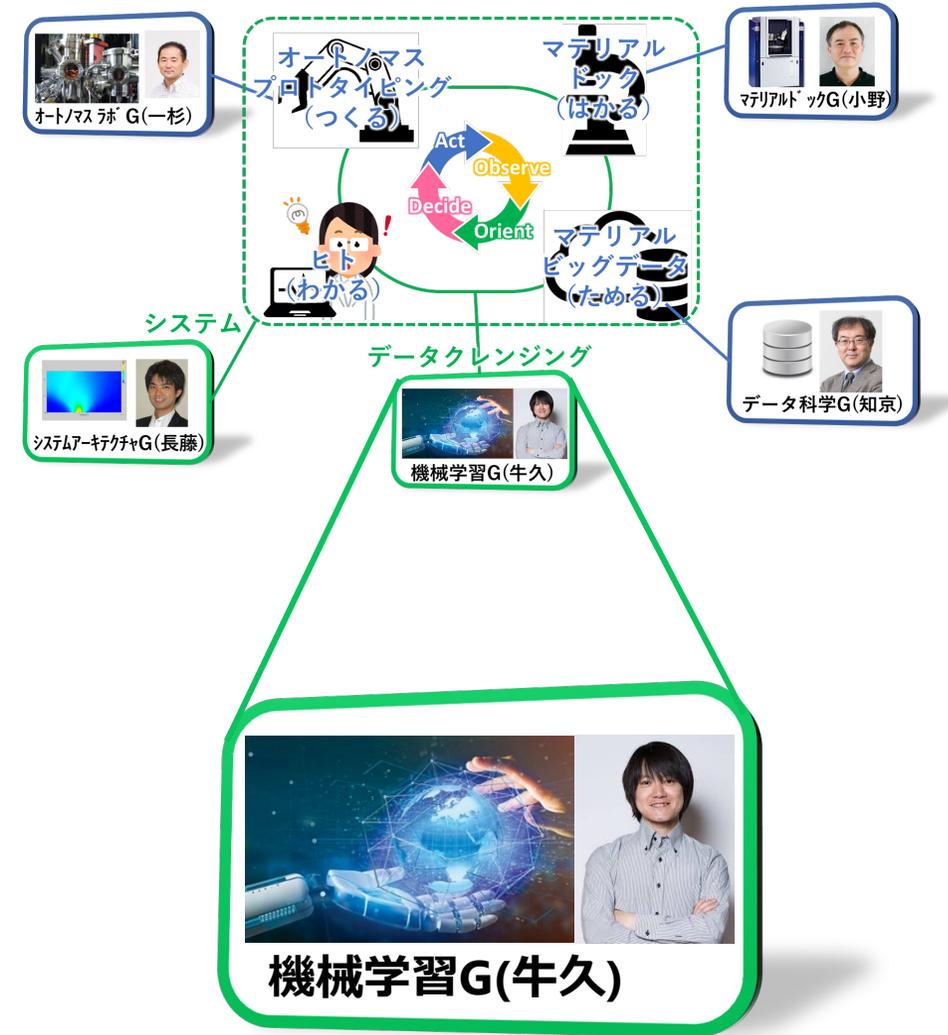
まとめ

- **機械学習グループ**

- 吉田、日野（統数研）
- 安藤、松村（産総研）
- 牛久、谷合、千葉、松原（OSX）

- **ミッション**

- 順問題と逆問題
- 実験加速
- マルチモーダル理解
- 物理的説明性



Materials Informaticsへの応用はAI分野としても今後の重点領域