

Article 表紙解説

—マテリアルズインフォマティクス—

Cover Comment: “Materials Informatics”

畑中 美穂
Miho Hatanaka

奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構研究推進部門,
先端科学技術研究科データ駆動型サイエンス創造センター
Institute for Research Initiatives, Division for Research Strategy,
Data Science Center, Graduate School of Science and Technology, Nara Institute of Science and Technology.
hatanaka@ms.naist.jp, <http://mswebs.naist.jp/LABs/hatanaka/index-j.html>

三宅 陽一郎
Youichiro Miyake

株式会社スクウェア・エニックス
SQUARE ENIX CO., LTD.
y.m.4160@gmail.com, <https://miyayou.com/>

Keywords: materials informatics, AI.

1. はじめに

今号(2019年5月号)の特集の一つは「マテリアルズインフォマティクス」で,こちらは応用物理学会と人工知能学会との連携企画です。表紙もそれに合わせて,畑中美穂先生にお願いして作成していただきました。畑中美穂先生は本特集でもご寄稿いただいておりますが,先生の研究室のホームページも「マテリアルインフォマティクス」のコンセプトを明確にするイラストが満載されており,今回の表紙もお願いすることとなりました。

では,畑中先生のインタビューを掲載いたします。

2. 畑中美穂先生インタビュー

Q1. 普段のご研究について教えてください。

A1. 理論化学・計算化学と呼ばれる分野を主戦場としています。おおざっぱに言うと,分子レベルのシミュレーションみたいなものですが,厳密にはシミュレーションではないので,量子化学計算と呼んでいます(この説明は長いので割愛します)。もともとは,量子化学計算の方法論を提案したり,量子化学計算を駆使してさまざまな化学現象のメカニズムを解明したりしていました。人工知能という言葉はもちろん知っていましたが,別の分野のお話だと思っており,

勉強したこともありませんでした。研究に機械学習を取り入れようと思ったのは3年ほど前のことです。現在は,実験化学屋さんと手を組み,実験・計算の両サイドからデータを集め,機械学習を取り入れることでより良い材料を発掘することを目指しています。

Q2. 今回の図案の意図などを教えてください。

A2. よく知られている化合物達を,情報の技術に適用するためにデジタルな情報として捉え直すことで,新しい側面を発見したいという意図を込めました。三つの化合物はいずれもさまざまな分野

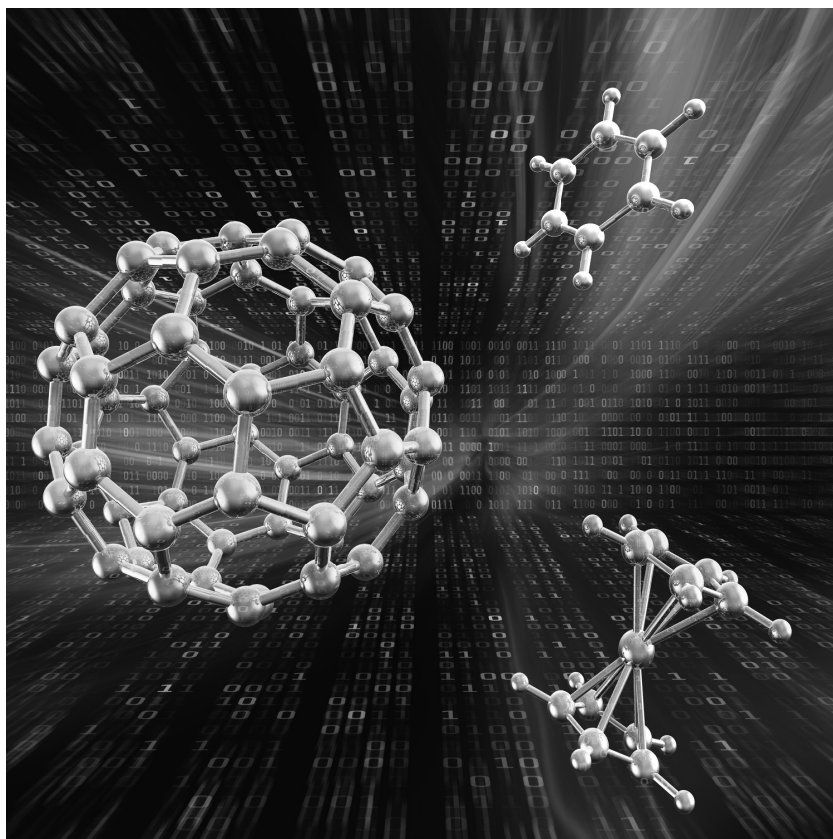


図1 今号のイラスト © 畑中美穂

で利用されている化合物で、白がベンゼン、黄色がフラーレン、ピンクがフェロセンです。

Q3. 人工知能についてどのように思われているか教えてください。

A3. 科学はもともと、データ駆動と理論駆動の両輪で進んできました。まず実験結果があり (1)、それを説明するための法則の発見や理論の構築がなされ (2)、その法則・理論をもとに実験結果が予測できるようになる (3)、という一連の流れを繰り返してきたわけです。材料科学と人工知能の出合いも、この歴史に沿った自然な流れだと思っています。(2) と (3) を人工知能が担うというイメージです。材料科学は、データを集めるのに時間もコストもかかるうえに、重需要なデータほどオープンになっていないので、人工知能が革新的な材料を発見するという段階に至るまでは、まだまだ乗り越えなければならない山が

たくさんあります。人工知能を最大限活用できるよう、データを収集しやすい環境を構築することが急務だと考えています。

最後に、べた塗り分子の絵をキラキラに仕上げてくださいサイエンス・グラフィックス株式会社様に感謝申し上げます。

3. 展 望

畑中先生のインタビューの中にあるように、サイエンスは「データを取る、データを分析する、モデルをつくり予測する」、のが基本で、これは現在、人工知能が行っていることと全く同じです。その意味で「人工知能が科学を行う」のは自然なことで、将来の科学の一翼は人工知能が担うものと予想されます。

2019年4月9日 受理

—— 著 者 紹 介 ——

畑中 美穂は、前掲 (Vol. 34, No. 3, p. 357) 参照。

三宅 陽一郎 (正会員) は、前掲 (Vol. 34, No. 3, p. 384) 参照。