



応用物理学会秋季学術講演会 注目講演プレスリリース

2023年 9月 11日

マルチモーダルAIによる機能性材料の物性予測及びパレートフロンティアの解明
Multimodal Deep Learning for Predicting Diverse Properties of Functional Materials

物性を予測するマルチモーダルAIが 科学者の探求を加速する

産業技術総合研究所 (AIST)
室賀駿、三木康彰、畠賢治

【発表概要】

- ・ 材料構造の特徴づけを行う3つの生成ディープラーニングモデルと、物性予測のモデルが含まれるフレームワーク「マルチモーダルAI」を開発
- ・ 10次元アクリルポリマー複合材料を対象とし、マルチモーダルAIを用いて、114,210の組成条件にわたる913,680の特性を予測

産業技術総合研究所の室賀駿氏らによる研究グループは、異なる種類の情報を統合的に処理することのできる「マルチモーダルAI」によって、先端材料の複雑で多様な特性を予測する技術を開発している。同技術は材料構造の特徴づけを行う3つの生成ディープラーニングモデルと、物性予測のモデルが含まれるフレームワークである。室賀氏らは、複雑な材料系である10次元アクリルポリマー複合材料を対象とし、マルチモーダルAIを用いて、114,210の組成条件にわたる913,680の特性を予測。古典的な計算機科学を基盤とした材料探索では踏み込むことのできなかった、複雑な材料系における実利的な予測の可能性を示した。

【詳細】

新たなAI技術による材料の特性予測

現代はまさに生成AIブームだ。米オープンAIが開発し、急速に社会へと浸透した対話型の生成AI「Chat GPT」や、「ステーブル・ディフュージョン (Stable Diffusion)」や「ミッドジャーニー (Midjourney)」、「ダリ・ツー (DALL E 2)」といった画像生成AIがコミュニケーションや産業のあり方を変えようとしている。

そんな中、AIによって材料科学を革新する研究が進行中だ。産業技術総合研究所の室賀駿氏らによる研究グループは新たなAI技術を活用し、高分子複合材料のような複雑な物質系の特性を予測する研究を進めている。

「材料科学では、材料の物性を予測すべく、さまざまな理論計算を用いたシミュレーション技術が研究されてきました。しかしながら、全ての研究分野が同等に発展している訳ではありません。たとえば創薬に関わる低分子化合物や一部の無機材料などは、第一原理計算や分子動力学といったシミュレーション技術により予測の研究はおおいに進められてきました。一方で、高分子複合材料のような複雑な材料系は、多くの成分や現象が絡み合っており、一筋縄ではいかいところがありました。こうした複雑な材料系に対し、私たちの研究チームは『マルチモーダルAI』を活用することに注目してきました」と室賀氏は研究の背景について述べる。

AIにおける「マルチモーダル」な性質とは、複数のモダリティ（画像や音など、異なるデータ種別）をAIによって処理することを指す。室賀氏によれば、「マルチモーダルAIは人間の情報処理に似ている」のだという。「マルチモーダルAIというのは、人間が複数の感覚器を用いて知覚した情報を脳で統合する処理に似ています。人間は目で見えた画像やテキスト、耳で聴く音声などの情報を脳内で統合し、判断をしています。マルチモーダルAIは、材料・化学分野ではまだまだ未確立な技術ですが、マーケティング、感情分析、翻訳等の分野では発展的な研究が進んでいます」（室賀）

マルチモーダルAIにおける予測のプロセスは、大きく分けて材料・プロセスの構造の「表現」、そしてそれらの情報を統合することによって特性を「推論」する過程に分けられる（図1）。材料・プロセスの構造の表現で用いられているのは「生成モデル」の一種である「敵対的生成ネットワーク (GAN)」で、物理構造情報を生成する「OM-GAN」、IRスペクトルやラマンスペクトルなどの化学構造情報を生成する「IR-GAN」「Raman-GAN」だ。これらの情報を統合し、材料科学の研究に欠かせない情報を予測する。

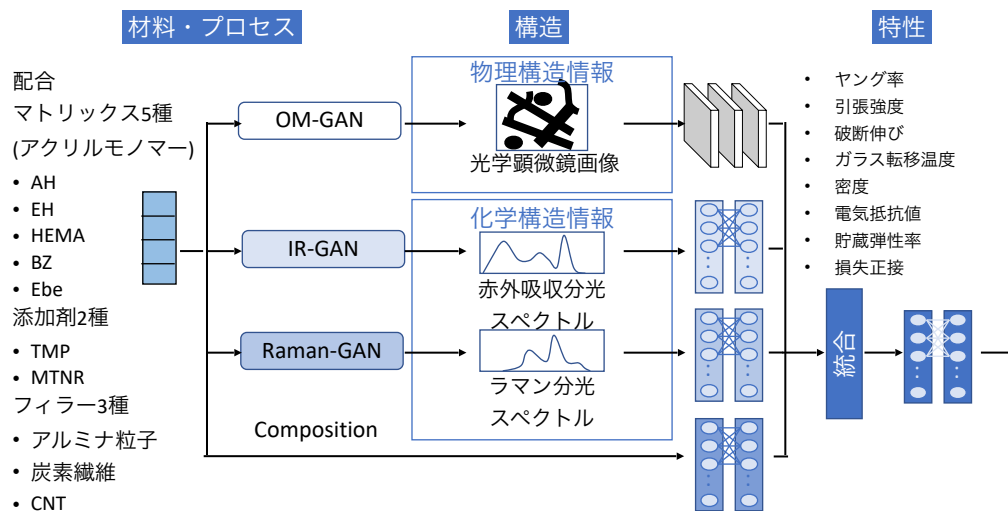


図1: マルチモーダルAIの模式図

「複数の物理構造情報や化学構造情報を突き合わせることで、実際の実験を通して定義されていない『未定義の構造』を把握することができます。つまり実際に実験をしなくても、その特性を理解でき、実際の研究開発において候補材の選定などに活かすことができます」（室賀）

マルチモーダルAIの性能は、マトリックス5種、添加剤2種、フィラー3種の10次元の組成、8次元の特性予測で、1日で数十万以上の膨大な計測データ生成と特性予測が可能だという。また、室賀氏は、複雑な材料系である10次元アクリルポリマー複合材料を対象として、実際にマルチモーダルAIを用いて分析を行う実験を行った。結果として、マルチモーダルAIは十分にその性能を発揮し、114,210の組成条件にわたる913,680の特性を予測することに成功した。

科学者に新たな気づきを提供する

「マルチモーダルAIは、計算材料科学の分野において、前例のない大規模な情報空間を作り出すことができます。その性能を研究において活かすためには、この複雑性をデータ分析によって処理し、人間が理解できる形にすることです」（室賀）

マルチモーダルAIは、人間が見ることができないものを見ている。それはすなわち、入力組成10次元、出力特性8次元の18次元系における114,210点の推論である。その複雑性は人間が把握できる能力を越えている。マルチモーダルAIが実際の科学を前進させるためには、人間の科学者が扱える分析を提供することが必要だ。

「そこで、生成される情報空間の理解を単純化するための新たな分析的アプローチを提供します。具体的には、ヤング率などの物性を表現するために4つの成分に注目します。これにより物性の予測結果を視覚化することが可能です。私たちは予測結果の『地図』と呼んでいます（図2）

が、この地図にはさまざまな視覚化の方法があることから、材料探索に新たな洞察をもたらすと考えています」（室賀）

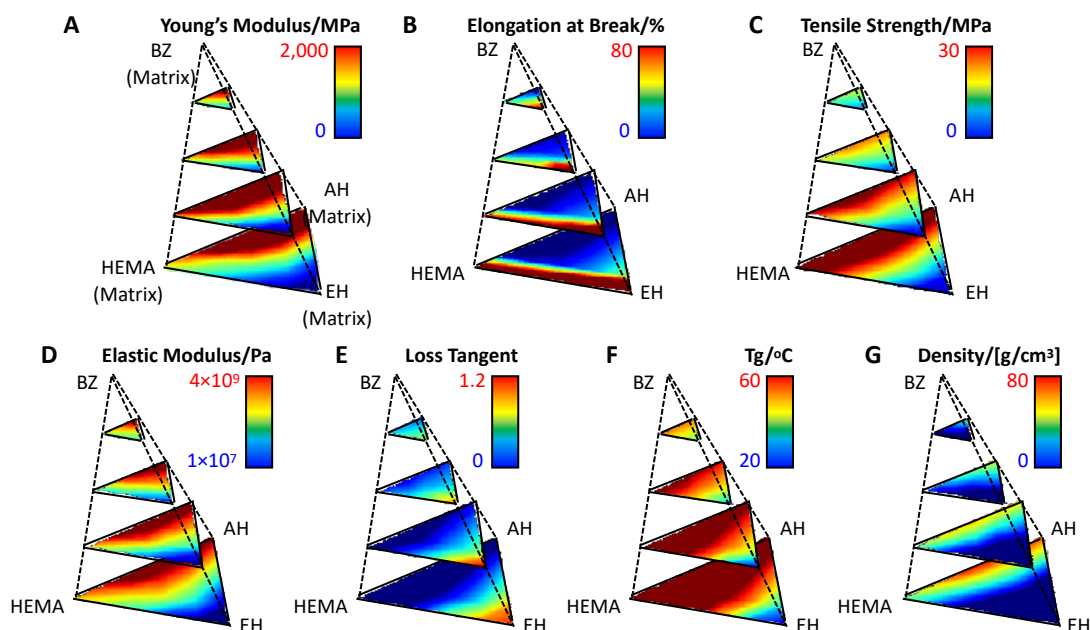


図2: 多次元の特性予測の視覚化。三角錐の各頂点に成分がプロットされており、三角錐の座標が組成比率になるように設計されている。

室賀氏は、これらの分析の提供を通し、マルチモーダルAIを用いた材料探索の将来性を「材料系科学者への新たな気づきの提供」とし、科学者の探求を加速したいと話す。

「この新たな研究は材料科学に新たな展望をもたらすことを期待しています。とくに複雑なターゲットを持つ研究領域では、これまで気づかなかったような情報から新たな気づきを得ることが可能になります。具体的にはプラスチック、ゴム、ファイナセラムックスのような粒子、繊維を含む複雑・複合系の多元的な機能を持つ分野などが該当します。低コスト化や多元的な物質の探索が可能になると考えられます」（室賀）