

Aで未来が変

鉄鋼工学におけるAI活用の可能性と課題

最近大きな注目を集めているAI(人工知能)。機械学習やディープラーニングの活用によりその応用範囲は飛躍的に広がっている。 AIは、今後の鉄鋼材料研究においても大きな役割を果すものと期待されている。今回は、AIや鉄鋼材料の研究者にお集まりいただき、 (2018年9月3日収録) 鉄鋼の研究がAIを活用してどのような未来を描くのか、その可能性について語っていただいた。

> 出席者 (敬称略)

瀬沼 武秀 岡山大学大学院 自然科学研究科機械システム工学専攻 特任教授

竹内 一郎 名古屋工業大学 情報工学専攻 教授

岡本 和也 山口大学大学院 技術経営研究科 教授·副研究科長 足立

吉隆 (一社)日本鉄鋼協会 会報委員会 副委員長 (司会)

各分野で注目を集めるAI

足立 本日のテーマは「AIで未来が変わる」です。鉄鋼工学 をより効率的に、また高度にするAIの活用とはどういうことか、 AIを使っていろいろな分野をつなげるサイエンスができないか、 などの視点でお話を伺いたいと思います。また今回は、特に材 料研究でのAI活用の可能性に焦点を当てたいと思います。 最初に出席者の皆様から、ご自身の研究内容について簡単 にご紹介いただきたいと思います。

竹内 名古屋工業大学の竹内です。現在、理化学研究所・ 革新知能統合研究センター、通称AIPセンターのデータ駆動 型生物医科学チームのチームリーダーも兼ねております。名古 屋工業大学では、学生にAI、具体的には機械学習とかデータ 科学の理論とアルゴリズムを教えてきました。また理化学研究所 では、AIを生物や医学、材料科学にどうやって使うかを研究し ており、各分野の方と一緒に研究を進めています。チーム名にあ る「データ駆動型」ですが、シミュレーション、つまり計算科学が基 本的に順方向のモデルのことで、物理的な知識を埋め込んで モデル化するのに対し、データ科学というのは逆方向のモデル であり、結果から原因を探るものです。このアプローチが「データ 駆動型科学 |と呼ばれています。私の専門は、データ科学の理 論と実践ですので、鉄鋼や材料に関しては素人です。

岡本 山口大学の岡本です。専門は光波電子工学、半導体

物性物理学ですが、現在は技術経営研究科に所属していま す。余りなじみがないと思うのですけれども、この分野は山口大 学が文部科学省から技術経営者育成に関しての委託を受 け、そのコアカリキュラム作成の中心的な役割を担っています。 「技術経営」とは経営の視点と技術の視点を融合させて、どの ようにして技術を産業にして収益を得るかという、産業創成の 方法論についての研究が主体の一つになります。私の専門 分野である半導体は「微細化」という指針をもとに進歩してき ました。しかし最近は、微細化の限界を迎え、新しいアーキテク チャーや材料が考えられ、その指針自体が変わってきていま す。鉄鋼の最終製品の基礎は、ナノ欠陥の検出と制御にある と言われていますが、半導体もまったく同じです。その点では、 半導体と鉄鋼材料は親和性が高いと思います。

瀬沼 岡山大学の瀬沼です。基本的には鉄鋼材料の研究が 私の主な仕事で、1981年に当時の新日本製鐵に入りプロセス メタラジー研究室に所属しました。そこでは、今までにない製造 工程や条件を加味して新しい何かいいものができないかという 研究をしてきました。その中で、最初に担当したのが組織材質 制御技術の研究です。当時、鉄鋼の製造では「形を作る」こと が主体でした。しかし、良質な材料を製造するには組織を制御 することが重要であると認識され、制御圧延など組織の微細 化技術が注目され始めました。当時は各工程での組織変化に ついては知る術がほとんどなく、熱延工程は金属学的にはブ ラックボックスでした。それゆえ、私たちは、熱間加工とその後の



冷却による組織変化を見える化するために熱間加工シミュレータ、加工フォーマスターという新規の試験装置をメーカーと共同で開発しました。そして製造条件と組織の関係に関するデータをとり、それを定式化してコンピュータに取り込み、鋼材の化学成分と製造条件を入力することで最終的にどのような組織や機械特性が得られるかを予測するシステムを開発しました。それが組織材質予測制御システムです。この組織材質予測制御技術はその後も進化を続けて、現在もSIP革新的構造材料のマテリアルズインテグレーションシステムの開発(リーダー:東大小関教授)で最先端の物理モデルの開発が行われています。一方、組織材質を予測するモデルとして物理モデルと並行してニューラルネットを用いた機械学習モデルも進められていて、本日の話題であるAI技術を活用することでさらなる精度アップが期待できます。

本来、組織材質予測技術は、成分と製造条件が与えられるとどのような組織、材質が得られるかを予測する技術であり、これを順解析といいます。しかし、最近ではFEMによる成形シミュレーション技術が汎用化し、部品製造の可否は選択する材料構成式で判断できるようになり、鉄鋼メーカーの課題はユーザーから求められる材料構成式をもつ材料をどのような成分、製造条件で製造すべきかという逆解析が課題となりつつあります。また、組織材質予測技術は新鋼種の開発のためのツールとしての役割も期待されています。これらの技術課題に対してAI技術がどのような貢献を果たすか、大変興味のあるところです。

足立 私は、今から30年ぐらい前に鉄鋼会社に入り、その後 研究所、大学に移籍しましたが、研究対象はずっと鉄鋼材料 です。材料の特徴を評価するには、いろいろな顕微鏡や分析 方法で調べますが、従来の二次元観察では情報が限定され ますので、三次元あるいは時間軸を入れて四次元で観察しそ の特徴を数値化することに取り組んできました。しかし従来の 手動観察では非常に時間がかかるし、多くが二次元だったの で情報量が少なかったのです。そこで三次元の全自動シリアル セクショニング顕微鏡を開発しました。これを使うと、従来は一 つの試料を見るのに6カ月ぐらいかかっていたのが、半日から1 日で観察できるようになりました。また三次元の画像を元に、あ る特徴を持つ領域に色を塗りたいと思い、機械学習型の画像 処理を取り入れたところ、それまで1カ月かかっていたのが10分 ぐらいで終わるようにすることができました。ここで出た情報を 使って、従来型の結晶粒径などのメトリックな特徴値だけでは なくて、連結性、形の情報、分散、分岐現象、曲率など位相幾 何学的・微分幾何学的な特徴量を数値化することに注力して きました。鉄鋼の場合、組織は特性と深く関連するので、その 情報を徹底的に数値化し特性と関連付け、やがては逆解析 に結びつけるために、計算コストの低い機械学習に注目しまし



た。モデル式の精度を上げるため、一方、いろいろな理論モデル式のパラメータの最適化を最尤法や事後確率を使った方法で行うことに注力してきました。このように、パラメトリック、ノンパラメトリック、そして画像間の類似性の評価方法などを工夫し、特性を推定する(順解析)ことをやっています(図1)。

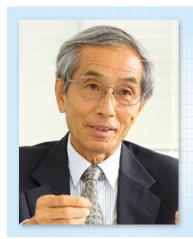
AIの長所や短所を理解する

足立 先ほど竹内先生からお話のあった生物インフォマティクスは、マテリアルズインフォマティクスから見れば、ある意味で先輩格だと思いますが、なぜインフォマティクスを生物学に取り入れようという話が生まれたのでしょうか。

竹内 私の理解だと、細かい生物の情報、例えば遺伝子やゲノムが計測できるようになったことが出発点だったと思います。 とにかくデータ量が多いので、生物学者だけでは太刀打ちできない。そこでコンピュータで分析する人が入ろうかということになったのでしょう。先ほど足立先生が、三次元で顕微鏡を作ったらデータが多くなり色塗りが大変になった、というのと少し似ていますね。



633



瀬沼 武秀

岡山大学大学院 自然科学研究科 機械システム工学専攻 特任教授

足立 生物学では、横のビッグデータと縦のビッグデータとがあり、データの数が増えると同時にデータの中身の幅が広がる。そういう時、AIを活用せざるを得ない状況になってきているということですね。材料学でも、いろいろな分析機器で測定できるようになって、同じような現象が出ていると思います。岡本先生、分析機器のAIの分野はどういう方向に向かおうとしていると考えたらいいでしょうか。

岡本 例えば走査型電子顕微鏡があれば、そこから得られる情報は元素の情報だったり形状の情報だったりする。ここに別の機器で得たいろいろな大量なデータをつなげ、それをAIがディープラーニングで得られた情報を出力することによって、今まで人間が感じなかったものが見えるかもしれないと思います。ただしその場合、現時点において、結果は出るのですが、なぜそうなったかという論拠が出てこない、という問題があります。

足立 確かにディープラーニングだと、どういう特徴量を抽出してきているのかさえ、人間が判断できなくなってきている。AIのユーザーの側は十分説明はできないのだけれども、推定精度は優れているということを理解した上で使うことが重要であって、長所や短所を十分理解した上で使う必要がある。ですから、材料研究者も機械学習やディープラーニングの基礎知識を学ばなければいけない時代に来ていると思います。

岡本 そのアプローチには「データ駆動型」と「数理モデル型」がありますが、このうちデータ駆動型アプローチは、少量のデータを統計処理によって特徴量を抽出して機械学習して状態を識別し予測をとるものや、大量のデータをそのままディープラーニングに入れ込んで識別し予測をとるものがあります。一方、数理モデルのアプローチでは、実験データが極めて少ない場合に計算科学でデータを補完して、AIによって各対象に符合する拡張数理モデルを創ります。これらを適材適所で使い分けることになります。

足立 AIが出した結果の論拠を説明しなければいけない時と、説明しなくてもいいからとにかくいい精度を出したいという時

がある。ケース・バイ・ケースですね。材料学の分野は長くいろい ろな先駆者の方々が理論式を作ってきたので、そういう知識を 有効に使えば予測ができます。でも材料などの工学分野は、全 般に使えるデータが少ないと思います。

岡本 もしかしたらデータはあるのかもしれませんね。例えばオペレータがいろいろ話したり残したメモもすべてデータなのだけれども、それらに大切なヒントが隠れているかもしれません。それをきちんとマイニングすることによって、価値のあるデータを抽出することができるかもしれないと感じます。

竹内 知識をどうやって取り入れるか、という問題もあります。 情報工学ではコールドスタート問題、ウォームスタート問題という 言い方をしますが、機械学習を何もないところから作るのがコー ルドスタートで、それはなかなか難しいと言われています。ウォー ムスタートというのは、ある程度うまく初期化して、残りをデータで 微調整しようというもの。ただ、どうやって知識モデルを取り入 れるかという点は当然考えなければなりません。

足立 ウォームスタートのように、ある程度知識なり理論式があって、そのデータをうまく使ってAIを活用していくというやり方をする時、どういうデータを入れるのか。いろいろな分析機器で測定したデータには分散がありますが、だいたいは平均値だけを使っているわけで、本当は分散も含めてデータを入れなければいけないと思うのです。例えば、材料の破壊を考えますと、大きい結晶粒が1個でもあると壊れる、ということが、頻度は少ないですがあり得ます。そういう分散も入れて考慮しなければいけないと思います。

竹内 ウォームスタートのやり方の一つとして、先ほど足立先生が昔のデータと今のデータが違うというお話をされました。例えば材料aのデータと材料bのデータも違いますが、材料bに関して何かを知りたい時に、材料aの知見をウォームスタートに使うという方法があり、そのような方法を転移学習と言います。昔のデータを使って今のデータをモデル化する時は、本当は違っているということをきちんと意識した上で行う。機械学習の研究者はそういうふうに解釈しているのだと思います。

足立 昔とったデータも、十分活用できるということです。ならば、そういうデータを捨てるべきではないですね。

竹内 常にデータがないという状況ですので、きちんと信頼度を定量化したり、あるいはどれだけずれているかというバイアスを定量化した上で、それを活用する。それも含めて、うまくモデル化するというスタンスが必要だと思います。

研究者のひらめきをAIに載せる

瀬沼 鉄鋼材料の研究開発にAIを生かせるか。これは興味 あるテーマですね。つまり、AIは人間の頭脳と同じような発想



の展開ができるのか。すなわち、AIに創造力を付与するアルゴ リズムを入れられるかが、AI研究の成果を材料開発に生かせ るかどうかにつながるのではないでしょうか。

例えば、組織制御で残留オーステナイト(残留γ)を含む組織を作り込むことで高強度鋼の延性を大幅に向上させることができます。残留γは量が多く、その中のカーボン濃度が高いと安定して、伸びがよくなります。成分や製造条件によって残留γの量ならびにそのカーボン濃度が決まるので、AIはその最適化を求めるのに有効なツールになると思います。しかし、クエンチ・アンド・パーティショニングやデフォメーション・アンド・パーティショニングなどという残留γ鋼の新プロセス技術をAIは提案できるでしょうか。残留γ量を増やし、そのカーボン濃度を高めるという技術指針の延長でAIが自己学習しながら先ほどのような革新的なプロセスを提案できれば、研究開発で重要な、"ひらめき"を有した人間の頭脳を代替したAIだと思います。

今のところ研究者はAIを研究の補助として活用しようと考えていますが、もしAIが自ら考え、創造的な研究開発能力を有するようになると、研究を支援してくれるありがたい味方から自分たちの職を奪う恐ろしい競争相手になるかもしれません。

定立 瀬沼先生が言われた研究者のひらめきとは、ある意味でジャンプですね。このような鉄鋼材料の新しい機能を、AIは見つけ出すことができるのか。もう一つは、研究者が持っている知識をAIに載せようとした時に、どうやって記述子という形で数値化するのか。この二つの問題があると思います。例えば先ほどの残留ヶ鋼では、残留ヶの体積率、残留ヶの数密度、カーボン濃度や、マンガンによる転位の密度と分布と性格がどう変わるか、などの点を数値化する。その時に記述子は十分なのか。記述子が十分でなかったら、ニューラルネットワークの中間層が増えてしまうことになるでしょう。十分な記述子が与えられているかどうかの検証にもAIは使えるのではないかと私は思っています。

竹内 AIは研究者の味方になるのか。私はイエスだと信じて



竹内 一郎

名古屋工業大学
情報工学専攻

教授

います。今まで機械学習とかAIというと、データが与えられてそこから何かを得るということでしたが、「材料研究者と同じようなことをするAI」とは、次にどういう実験をするかを決める能力を持っているAIではないでしょうか。強化学習や能動学習は、次にどういう実験をするか、を決めるためのAIなのです。例えば、AIが「次にこの実験をしてください」という提案をした。それに従って実験をしてよい結果が出てきたとしたら、優秀な研究者は、なぜそうなったかをフィードバックして分析することができると思います。そういう意味では、研究者のひらめきも有効ですが、機械学習が「次に何をやるとよい」というひらめきも、別の角度のひらめきとして使えるのではないでしょうか。

足立 能動学習あるいは強化学習では、そもそもデータは少ない。例えれば、人間が赤ちゃんから大人に成長していく過程をやらせているのが能動学習、強化学習です。それは、親が子どもにやっていいことを教える時、報酬を与えたり逆にペナルティを与えたりして、子どもは報酬を与えられた方に行きたいので、そちらの方に育っていく。それと同じようなことを機械学習にやらせるというのが強化学習なのです。だから、結果がよかったら報酬を与えるということをやらせて、少ないデータからでも自律



5



岡本 和也 山口大学大学院 技術経営研究科 教授·副研究科長

型にいい方向に持っていかせる、というのが強化学習だと理解しているのですが。

竹内 そうだと思います。ただ重要なのは、その報酬をどう定義するかは、研究者や人が決めなければいけないと思います。 そこもすべて自動でやるとなると、SF的というか、ちょっと現実から離れた話という気がします。

足立 実際に、AIを活用して効率化した事例についてご紹介します。いろいろな入力データを利用する際に、どれが重要だったかを判断する規準の例として、赤池情報量規準(AIC)やベイズ情報量規準(BIC)があります。BICではデータの数まで入れて補正が加えられていて、AICよりも厳しく入力変数を選択します。このような機械学習の方法を使えば、入力変数の重要性が評価できるので、入力変数を機械学習で選ぶという使い方があると思います。

竹内 私自身、マテリアルズインフォマティクス関連のプロジェクトをやって3年になりますが、実際の実験と機械学習がうまく融合したという例はそれほどありません。それより、シミュレーションと機械学習が融合した、という成功例はいくつか聞いています。

足立 そういう意味では、例えば第一原理計算でもフェーズフィールド法でもいいので、モデリングした結果を数値化して、それを機械学習と合わせて精度のいいモデルにしたり、逆解析もやるというわけですね。それはどちらかというと物質探索、例えば超電導材料でどういう元素の組合せがいいのかとか、そういう場合にはよいようですね。でも物質探索と材料開発はちょっと違うところがあって、材料開発ではデータに階層性があり過ぎて結構複雑なデータでやるので、そこが物質探索と違うところだと思います。

瀬沼 機能材料の一例で、ゴムメタルというすごく弾力性のある材料があります。その開発者が「状態図の原理原則に則って、こういう状態になればその特性が出ることがわかっていたから、最適になるような成分設計をいろいろ試してみた」と言っ

ていました。それは人間の頭脳でやったのですが、AIでやれば すごく単純にできるのではないかと思います。

先ほど逆解析の話をしましたが、材質制御では、例えばAIを使って順解析で成分、操業条件から組織、材質を予測することは、比較的精度よくできると思います。しかし逆解析で「こういう組織がいいです」とAIに投げかけた時に、それを操業条件や成分に展開するアルゴリズムはできていないので、現状ではいろいろな成分系で操業条件を変えた順解析をコンピュータで大量に行いデータベース化して、その中で合うものを選んでいくという方法になります。

定立 材料の特性のうち、強度や強度・延性バランスは変数が一つや二つと比較的少ないですね。材料組織の因子は、10個ぐらい入力変数があります。ところがプロセスではもっと多くの入力変数があります。特性を最大化したい時に、組織をこうしたらいいという逆解析はできます。しかし、ある組織のために、どういうプロセスにしたらいいか、目的変数自身が多次元の情報になっているような場合、そのためのプロセス条件を求めるために逆解析をするには、どういう方法がいいのでしょうか。

竹内 プロセスにはたくさんパラメータがあって、しかも時間軸で流れているので、一見すると自由度が多いように思いますが、実際にそうでしょうか。というのは、プロセスパラメータが10個あってそれを乱数で決めたら、そもそもプロセスにならないということになりますね。ですから、それぞれのパラメータについて、ここからここの範囲をとるべきだとか、1番目のパラメータがここだったら2番目はここにとるべきだとか、そういった制約が実はたくさんあるのだと思います。

岡本 デジタルツインで代表される、リアル空間とサイバー空間の二つを考えると、産業の中で生まれたたくさんのデータは、サイバー空間の中で知識化され、この過程でAIが活用されます。ここで、求められるAIチップは、アーキテクチャーやそれに合わせたデバイス、アルゴリズムに合わせてどんどん進化していく。こうしてサイバー空間で得られた結果をリアル空間に送ることによって、製造の効率化を図る。この流れの中でポイントとなるのは、設計、製造の過程でAIをどのように使うかです。AIから原理を導き出すか、あるいは原理に基づいた知識をAIに入力するのか。こういうことはすべて創造性の世界になってくるので、日本ならば日本の特徴を生かせる可能性があると思います。

例えば半導体ラインでは、製造したチップの結果を適宜、ライン内での検査計測のエンジンで読み、その結果をフィードバック、最適化して製造工数を減らします。今までは人間がやっていたのですが、AIによってデータのマイニング等の処理をすることによって、ラインとシステムを一元化するという流れが注目されています。



求められる専門家としての素養

足立 それぞれの分野ごとに重要な因子をいかに数値化するかが、記述子の設計に深くかかわっていると思います。それはその分野の専門家や、それぞれの会社の強みでもあります。そこにしかない記述子を持っているか否かが重要なのでしょうね。

岡本 独自の知識や強みを外部に流すと、結局そのベンダーが重要な暗黙知や差異化因子というのを持っていってしまい、 そこにロックインされてしまうのですね。だから日本の企業はできる限り自分たちでやっていかないと、いわゆるベンダーロックに陥ってしまって、海外に勝てなくなってしまう恐れがあります。

足立 鉄鋼材料の強化機構では、ホール・ペッチ、ベイリー・ハーシュなどの式があります。一つ一つはパラメトリックのパラメータをきちんと正確に評価すればいいモデル式ができると思います。ところが実際の材料の強度は、各強化機構の足し算をしないといけないのですが、これが単純加算ではない。それぞれの強化機構の加算則はバラバラ。そのような時、機械学習でそれぞれの強化機構の割合なりm乗のきき方について、パラメトリック推定してしまうというやり方はできるかもしれないと思います。

瀬沼 足立先生が例に出したようにAIは予測精度を高める有効な技術だと思います。しかし、AIによる機械学習モデルで精度のよい予測ができてしまえば、強化機構の加算性に関し、研究者は転位論の教科書を読み、考える機会を逸し、研究開発に必要な基礎基盤能力が弱体化してしまう懸念があります。しかし一方で、AIの出してきた加算則を参考にすることで強化機構の本質にヒントを得る可能性もあります。すなわち、AIを念頭にこれからの材料研究者は多様的対応が求められているのかもしれません。

足立 AIの使い方の例ですが、実験をできるだけ少なくし、いい特性を発現するような実験をしたいという時、ベイズ的最適化というやり方があります。入力変数が20個あって20回実験しないと最高の特性が得られないというのなら、これは効率が悪い。もし、二つの実験しかできず入力変数が二つだけの場合、二つの点を直線で結ぶと、左端のところが平均値が高いので、次はあの辺の実験をやったらいいと考える。またその間は不確定性が大きいのでそこも実験を行うべきである。つまり活用と探索のバランスが大切であり、それを評価関数で表現して次の実験計画を立てると効率がよくなります。

竹内 つまり、わからないところを調べに行くモードと、わかっているところをどんどん攻めていくという、二つのバランスをうまくとろうということですね。

足立 先ほどのような方法で、デュアルフェーズ鋼 (DP鋼) の

7

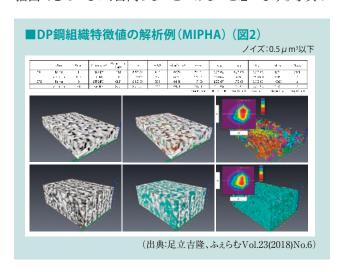
強度を最高にすることを考えました。いろいろなパラメータを初期データとして、これをニューラルネットワークの順解析で勉強させ、ベイズ的最適化を使って逆解析すると、平均値よりも高い3のぐらいまで大きくすると特性が上がります、と提案してきました。複雑系であっても、少ない実験でいいところにたどり着く確率が増えてきます(図2)。

竹内 材料の研究者にとって役立つのは、AIがリサーチクエスチョンをデータからリストアップしてくれることだと思います。本来、研究者は、データを見てこの特徴が大事だとか、今度はこれを試すべきだとか、自分の知識に基づいて仮説を生成して実験をしますが、AIを活用して、データから仮説を生成することができるわけです。先ほど、岡本先生がサイバー空間とリアル空間の話をされました。サイバー空間の方でAIが動いていて、リアル空間の方に研究者がいます。AIが「こういう仮説はどうですか」と提案する。研究者はそれを受け、自分の判断も含めて実験すると、さらにデータがとれる。そうすると、AIがまたアップデートされて、また新たな仮説が提案される。それによって研究が促進されるというのが、AIとの理想的なかかわり方ではないでしょうか。

瀬沼 研究者としては、例えば強度・延性バランスの優れた材料を作りたいとする。引張試験や組織のデータを見て、これが大切だからここのところを攻めよう、というフィードバック的なアルゴリズムを、AIが自動的にやるということですね。

竹内 そうです。今までは研究者が見てやっていましたが、システムが複雑になりパラメータが増えてくると、研究者が見ただけではわからない。コンピュータはそういう力技はできるので、例えば「これとこれの組合せがこうなっている時に引張強度が強くなる傾向があるのではないですか」というようなリサーチクエスチョンを返すようなイメージです。

足立 例えば、材料の組織を見る時、我々は写真を端から端まで穴が開くほど眺めて、組織の写真が訴えている特徴量を抽出できているか、自問しないといけないと思います。写真が



訴えている情報を、過不足なくすべて抽出するということが大切です。そこには、位相幾何学とか微分幾何学などの数学や情報工学が有用だと思っています。

竹内 AIは、無から何かを生み出すことはできません。一方、山のように候補を出してその中でどれが怪しいかというのを選ぶことや、最初に用意していたものを組み合わせてこれがいい、とか提案することは、AIにはできます。最初の記述子を用意するところは、それこそが人や各企業の財産だと思います。

今後必要な人材育成と特許戦略

足立 機械学習と材料の関係についてお話を聞いていると、結局、記述子をその専門分野の研究者や企業の人たちがどれだけ設計できるかにかかっているようです。例えば結晶学的な集合組織の割合、粒界の性格の割合、内部応力の情報など、あらゆる情報を数値化する。これが重要だろうと研究者が思うのであれば、数値化する。また、実験そのものもAIを使って効率化したいですね。

岡本 その探索過程があるからこそ、学生とか企業が育つという面もあるかもしれませんね。つまり、効率化がすべて、というわけではないようにも思います。

瀬沼 組織材質予測制御技術に関する人材育成について述べると、今までは物理モデルを開発してきた研究者とニューラルネットワークを用いた機械学習モデルを開発してきた技術者が独立していました。しかし、これからは物理モデルの中にAIを活用して合わせ込み係数などの精度アップを果たせる両方の技術に精通した研究者が、期待される姿かもしれないと思います。

足立 鉄鋼の分野で、昔はプロセスと特性を直接AIで乱暴につなげようとしたのですね。そうではなく、大切なのは、理論とか研究者の考えている材料組織を、真ん中に入れて考えないといけないということです。「物理モデルに基づいて、ここが重要だから、その記述子を入れましょう」というように。そうすると、もう少し汎化能力の高いモデルができるのではないでしょうか。プロセスと特性だけでも、ある程度は機械学習でできますが、それでは汎化能力が低くなる。そういう意味で瀬沼先生が言わ

れたとおり、物理現象をきちんと理解した上で、その記述子は 重要だから入れようという観点は重要だと思います。一方で、 AIは人間が気付いていない記述子間の交差項が重要である と提案してくる可能性があり、新たに人間が検討するきっかけ を与えてくれることがあると思います。

瀬沼 そういうことができる人材は、どうしたら育成できるのでしょうか。

足立 材料関係の大学の専攻では、そういうことを今までやってこなかったのです。最近になって情報を統合、融合する材料デザインの研究が重要だと考え、私が在籍する名古屋大学では大学院の方で機械学習も含めた統合型材料デザインという講義をやるようになりました。近ごろは、どこの大学でも情報工学のセンスを持った材料研究者を育てないといけない、という考えが芽生えてきています。

竹内 鉄鋼材料でも、鉄鋼の中からそういう人材を育てないとなりませんね。

瀬沼 鉄鋼業界では既に、生産技術などでAIを使って具体的にいろいろなことをやっています。そういう技術者が材料研究者とタイアップしたりして、協働で刺激しあうのも意義があると思います。

足立 AIで出てきた知見を特許戦略にどう結びつけるか、ということについてはいかがでしょうか。

岡本 今、AIや機械学習などに絡む特許出願数が大幅に増加する傾向があります。日本の出願数は大きくは変化していませんが、米国や、特に中国の数が多くなっている。そこで日本は、特許庁が審査基準を改定し、データ、データ構造、学習済みモデル等の請求項もプログラムに準じて保護されるようにしています。事実、機械学習関連の特許査定率が9割程度まで高められています。特に大切なのは、学習アルゴリズムが公知であっても、適用分野が新しいか、あるいは用いる入出力データなどが新しければ、機械学習を用いた特許は査定される可能性が高い、ということです。ただ、AIの強化学習については海外の大手IT系企業が基本特許を押さえていますし、他にも機械学習を用いたサービス、AIの分散並列処理なども海外の大手企業に押さえられています。そこで日本としても、こういう状







況に対峙するために、AIおよびIoTを含むアイデアを早期に具現化し、特許出願しておくことが必要だと思います。

足立 なるほど、機械学習のコンセプトを使えば比較的特許になりやすい、というわけですね。

岡本 ただし、基本特許や周辺特許が既に権利化されている場合、それをきちんと理解した後に研究開発を進めないと、アイデアが産業に応用される時にすべてが無駄になる可能性があることも、知っておくべきことです。日本は、比較的このあたりの認識が弱いように感じます。

足立 機能性材料では、合金元素の組合せにより特性が出る傾向を持つデータがあって、それを機械学習に入れてしまえば、中身がわからなくても、この組合せが最適だということになりますね。少し恐ろしい話ですね。場合によっては、最高特性の出る機能性材料を開発した会社が、材料メーカーではなく情報関係の企業になるかもしれませんね。

岡本 特許は論文と異なり、その出願には国内で少なくとも数十万円、外国では翻訳を含めて数百万円程度かかる。それほど価値のあるものといえるでしょう。AIに関する特許戦略はこれまでと異なる次元で世界各国が注目して取り組んでいるので、日本もそれに対峙してきちんとしたシステムを作って知的財産の戦略を練っていかないといけない。先ほど申し上げたように、技術はできた、でも実用化して商品にしようとした瞬間に、使えなくなってしまう、ということがないように。

瀬沼 鉄鋼技術に関しては十分な事前調査をしますが、AI 技術についてはだれがどのような基本特許を持っているかは 気が付かないことがあると思います。まさか、海外の大手IT企 業が基本特許をもっていることなど想定外かもしれません。自 分たちが頑張って開発したAIを用いた鉄鋼技術が、異分野の海外企業から急にクレームが来るようなことは避けたいですね。 岡本 特許出願人はよくマーケットを見ています。マーケットが

成長から飽和になって、権利行使すれば勝てるとなると侵害の訴えが来るおそれがある。最近では、まずarXiv(アーカイブ)に論文を投稿して、早期に公知にしてしまう、そういった戦略もあると思います。AIは夢のある技術なのですけれども、ビジネスとか産業になった場合、今後は熾烈な分野に変わる可能性があると感じています。

瀬沼 鉄鋼の研究者は、権利化の重要性は理解していても、 その権利を行使して補償金を得るという戦略には疎いところが あると思います。こういう話を聞くと、AI技術を活用した鉄鋼研 究の特許では、私たちも視野をもっと広げて他分野からも特許 収入が得られるような知的財産化を狙うべきですね。

岡本 技術経営の研究では、こういった戦略を練って、できるだけ日本に収益をもたらす仕組みは何かを考えています。海外と無駄に争うわけではなく、合法的にきちんと技術を磨いて、だれもが互いに価値と収益を得るための仕組みを考えていく上で、知的財産というのはとても重要な役目を果たすと思います。

足立 今日はいろいろな視点から議論していただきました。材料分野では、機械学習をまだまだ入れていないところがたくさんあります。情報工学の先生たちの動向などを見ながら、一方で材料研究者が新たな機械学習を生んでくるような、ニーズからシーズを生み出すということもあるはずです。またセンスを持った人材を育成していくということはたいへん重要で、大学も企業も協力しながら人材育成をしていきたいと思います。本日はありがとうございました。