

科学技術の潮流

JST研究開発戦略センター

154

データ科学

2009年に、理論、実験、計算に続く第四の科学方法論としてデータ科学の概念が提唱され、11年に材料開発のスピードとコストを半分にというスローガンの下、米国でマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブが開始された。この時点では、データの活用がうたわれており、人工知能(AI)も機械学習の文言も出てこない。12年にディープラーニング(画像識別モデル)が登場し、その後生成モデル、自然言語処理など次々と新しい技術

が登場しては改良されてきた。17年ごろから化学、材料研究にこうしたAI、機械学習を用いた論文が増加し始め、22年には化学、材料、生物分野におけるAIやデータ科学に関する学術誌『デジタルディスカバリー』が発刊(英国王立化学協会)された。価値する)からのデータ研究開発へのAI活用にはデータ収集が重なる。従来のデータベースからのデータ活用に加え、リチウムイオン電池などの無機材料分野では第一原理計算に、自律化に向けた取り組みが進む。トロンクスからデータ活用を背景に、自動化から自律化に向けた取り組みが進む。トロンクスからデータ活用を背景に、自動化から自律化に向けた取り組みが進む。トロンクスからデータ活用を背景に、自動化から自律化に向けた取り組みが進む。

自律化現実に

環境のデジタル変革(DX)が進む。ベンチャー企業を中心にラボオートメーション/クラウドラボといった概念も出始めている。このように10年代に入って、実験(ハイスループット、コンビナトリアル)科学、計算科学、データ科学の統合が起り、化学・材料のみならず、創薬やバイオ生産、ものづく

AI、研究開発の方法論進化

科学技術振興機構(JST) 研究開発戦略センターフェロー 島津博基

大阪大学大学院理学研究科修了。JSTでは産学連携事業担当を経て、情報、ナノテク・材料分野などで分野の俯瞰(ふかん)や研究戦略立案を担当。マテリアルズ・インフォマティクスの提言などを執筆。弁理士試験合格。



など次々と新しい技術

AIの進展	
2012年	「畳み込みニューラルネットワーク(CNN)」が画像認識で圧倒的精度
14年	画像生成のためのアルゴリズム「敵対的生成ネットワーク(GAN)」発表
17年	ディープラーニングによる分子生成アルゴリズム発表
18年	米FDA(食品医薬品局)はCNNが最終的な診断を下す医療機器を初めて承認
19年	IBMは自然言語処理技術を化学反応予測に展開
20年	製薬企業が生成モデルなどを活用して創製した新薬候補の臨床試験を開始
20年	DeepMindはたんぱく質の構造を予測するAlphaFoldを発表

出典：島津博基「マテリアルズ・インフォマティクスの発展と今後の展望」(2022年3月25日、日本化学会、発表スライド) <https://www.jst.go.jp/crds/sympo/20220325/>