

CONTENTS

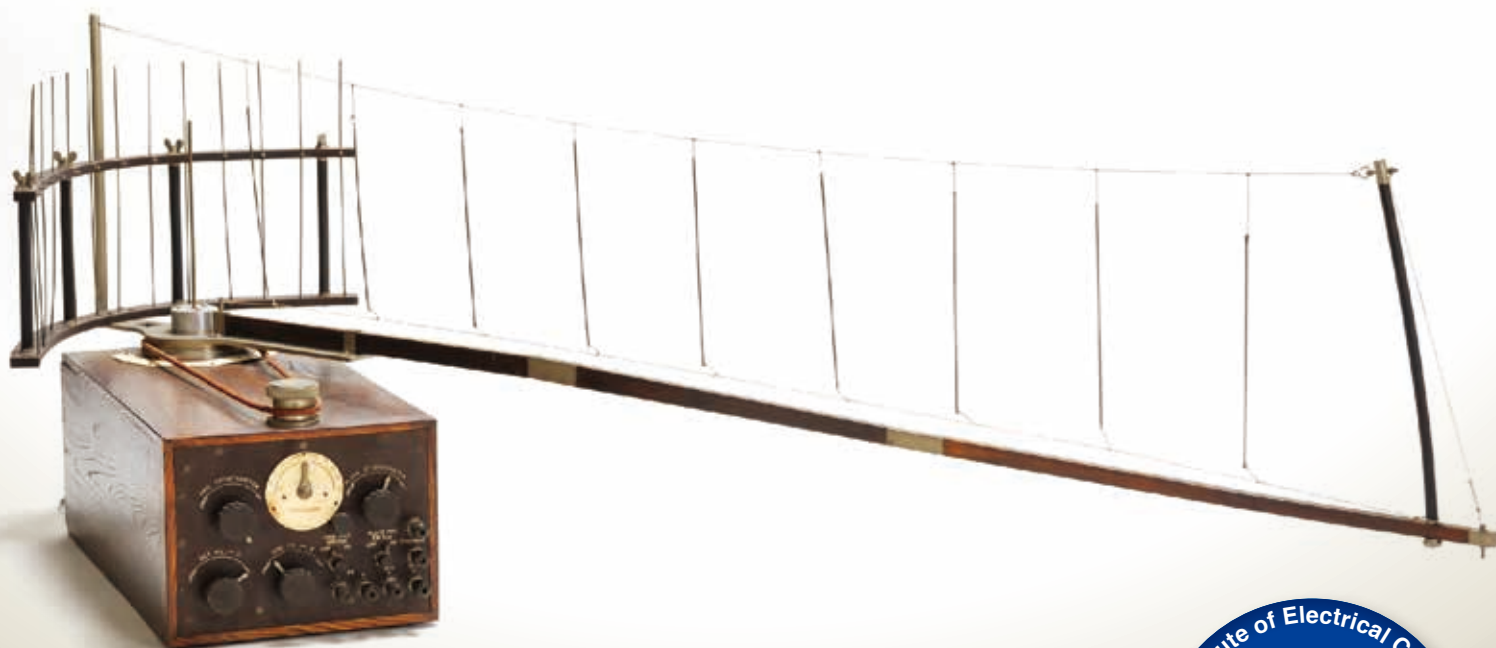
- 02 巻頭特集
科学研究費補助金
基盤研究(S)
- 04 共同研究施設訪問
- 05 TOPICS/退職にあたって
- 07 教員人事異動/
RIEC 豆知識
- 08 共同プロジェクト研究
採択一覧

巻頭
特集

科学研究費補助金 基盤研究(S) 脳型コンピューティング向け ダーク・シリコンロジックLSIの基盤技術開発

共同研究施設訪問 INSIDE the Common Research Facilities

研究基盤技術センター 工作部



八木・宇田アンテナの実験装置

八木・宇田アンテナは、世界中の家々でテレビ放送の受信用として最も広く用いられているアンテナとして有名です。本研究所の基礎を築かれた八木秀次博士と宇田新太郎博士によって大正末期(1925年)に発明されました。電気通信研究所のシンボルマークにも使われています。▶<http://www.riec.tohoku.ac.jp/ja/introduction/antenna/>

巻頭
特集

科学研究費補助金 基盤研究(S)
脳型コンピューティング向け
ダーク・シリコンロジックLSIの基盤技術開発

教授 羽生 貴弘



1. はじめに

近年、人間の脳のような(ある応用では人間の脳機能を凌駕するような)高度な認識・学習を実現する新型コンピューティング(つまり、脳型コンピューティング)に関する研究開発が盛んになっています。その典型例が2014年8月、米国IBM社が発表した脳型コンピューティングLSI「True North」です。人間の脳と従来型コンピュータ(例えば、スーパーコンピュータ;略して、スパコン)の決定的な違いはその電力消費効率です。人間の脳で実行しているような高度な認識・学習は、スパコンでも実行可能ですが、スパコンによる同等の処理では電力消費が百万倍以上(10⁶~10⁷倍程度以上)必要となってしまいます。True Northの貢献は、人間の脳型コンピューティング方式を真似ることで、実時間で物体認識等を実行するのに必要な電力消費を大幅に低減した点です。脳型コンピューティングでは本質的に非同期制御が利用されていることが知られており、True Northではこの非同期制御を駆使しています。

一方、ナノスケールレベルに至る材料・デバイスの微細加工技術の進展に伴い、VLSIチップの高性能化が達成された反面、電力消費は増大の一途を辿っています。特に、待機時電力(静的消費電力)の増大は著しく、2007年には、動的消費電力と同程度まで達しています。非同期制御に基づく脳型コンピューティングにおいても、実用規模のシステムを構築するためには、この問題を非同期制御の長所を生かした形で解決する必要があります。この消費電力増大問題に対して、材料・デバイス技術に依存しない低消費電力化手法として「パワーゲーティング」技術が知られています。パワーゲーティングでは、非稼働部の電源電圧を遮断する

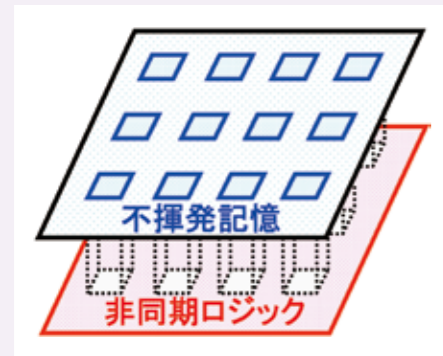


図1 提案のダークシリコン・ロジックLSIの実現イメージ

ため電源電圧からグラウンドに至る電流リークパスが無くなり、本質的な待機時電力の低減が可能となります。そのため、現在の半導体集積回路・システムでは、パワーゲーティング手法を積極的に利用する試みがなさ

れています。その典型例として、ダークシリコン(Dark Silicon; M. B. Taylor, DAC 2012)があります。ダークシリコンでは、VLSIチップ内の稼働部位を動的に変更し、エネルギー消費最小化を図っています。そこで、実用規模の脳型コンピューティングシステムを実現するためには、稼働部分に限定した局所ハードウェア部分のみで電力を消費する、極細粒度パワーゲーティングの実現が不可欠であるという考えに至りました。

本研究では、脳内情報処理で本質的に利用されている非同期制御に着目し、それにダークシリコン・アーキテクチャを積極的に活用します。これにより、パワーゲーティング機能に適する非同期回路構造とその動作原理を構築し、実用的脳型コンピューティング実現への可能性を開こうとするものです。本研究課題は、2016年度科学研究費補助金・基盤研究(S)に採択され、2020年度までの5ヶ年計画で、脳型コンピューティング向けダークシリコン・ロジックLSI基盤技術の開発を実施します。

2. 実用的脳型コンピューティング実現に向けた極細粒度パワーゲーティング回路技術

本研究では、実際に処理を実行している局所部分のみで電力を消費する極細粒度パワーゲーティング機能を、非同期回路構造に持たせるために、その動作原理を明らかにすると共に、MTJ(Magnetic Tunnel Junction)素子に基づく回路実現と、試作チップによる実証を行います。また、脳型コンピューティングへの応用例として、開発した試作チップによる視覚情報処理システムの構成と評価を行います。これを実現するために、下記のような基本的アイデアを具体化する予定です:

(1) 非同期論理回路の一方式として、シングルトラック非同期回路方式(M. Ferretti, PhD thesis at Univ. of Southern California, USA, 2004年8月)が知られています。この方式は、一本の信号線の両端に接続されたゲートの入力側と出力側から、当該信号線をドライブすることで、要求・応答信号を双方向に伝搬させるというアナログ的な動作をするという特徴を持ちます。そのため、人間の脳内のニューロンのモデル化に、より適している回路方式と考えられます。この方式では、原理的に各ゲートに超小型記憶素子を持ちます。これを不揮発記憶素子に置き換え、適切に制御することで、動作中の回路を任意の時点でパワーオン・オフすることが可

能となります。不揮発記憶素子としては、書き込み遅延・電力、書き込み回数、CMOS親和性を考慮し、磁気トンネル接合(MTJ)素子を使用する予定です。この場合、不揮発記憶素子はCMOS直上に形成できるので、記憶機能を分散化配置しても回路オーバーヘッドは極めて少ない形で実装できます(図1参照)。このようなアプローチにより、パワーゲーティング機能を付与した新しい非同期基本ゲートを考案し、集積回路上で実証する予定です。

(2) 脳型コンピュータの具体的事例として、視覚情報処理の例を取り上げ、その基本回路実現を行い、原理動作を実証する予定です。本研究で使用予定のストカスティック演算では、基本論理演算子のみで脳型視覚処理に必要な複雑な算術演算が記述できる(IEEE Signal Proc. Letters, 2015掲載)ため、上記提案手法の実証に適していると考えられます。

上記の方針に基づき、2016年度は、ハードウェアコストが少なく、かつ完全非同期制御(遅延仮定不要)が可能な非同期基本論理ゲートの典型例として、シングルトラック回路の不揮発化を試みました。シングルトラック回路には、非同期制御を実行するため、演算機能に加え、状態記憶(トークン)機能が内蔵されています。この内部状態と出力側の状態(出力クリア検出部)により、入力信号をリセット(次の入力信号の取り込み準備)し、自律的(かつ非同期的)に演算を実行する仕組みです。

図2は提案のパワーゲーティング機能付きダークシリコン非同期基本ゲートの構成例です。パワーゲーティング機能を付与するためには、状態記憶回路部に内蔵する記憶機能を不揮発化する、つまり不揮発記憶素子(Nonvolatile storage device; NVD)を用いて実現すれば可能となります。加えて、外部からのパワーゲーティング実行命令(Poff_req)を受け付けた際、電源電圧をオフにする制御信号(Poff_ctrl)を誤動作することなく(トークンを正しく制御して)生成するため、調停器を付与しています。このように、2016年度はダークシリコン非同期基本ゲートを開発し、その研究成果は、非同期回路とシステム実現に関する世界最高峰の国際会議ASYNC2017(5月、米国 サンディエゴ)において発表しました。

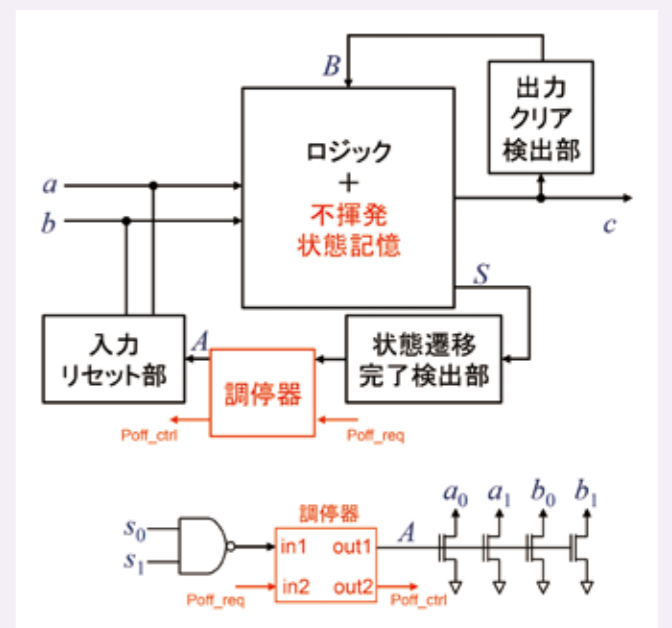


図2 提案のダークシリコン非同期基本ゲートの基本構成原理

3. おわりに

本研究開発については、非同期制御に基づく大規模システム的设计・実装を取り組んだ経験(JST-CREST「ディペンダブルネットワークオンチッププラットフォームの構築」、H20~H25;研究代表者:米田友洋氏)を有する国内有数の研究者である米田氏(国立情報学研究所・教授)&今井氏(弘前大学・教授)を研究分担者として推進します(図3参照)。本研究推進で得られた知見を基本ゲート設計に適宜フィードバックすることで、提案する非同期基本ゲートおよびそのロジックLSI設計上の改良点を詳細に詰めることが可能になります。またMTJ素子を用いたチップ試作のため、本学国際集積エレクトロニクスセンターの協力(研究分担者:池田教授、村口准教授)の下、実施する予定です。このような研究実施体制の下、実用的規模の脳型コンピューティングLSI実現に向けた基盤技術の研究開発に取り組んで参ります。

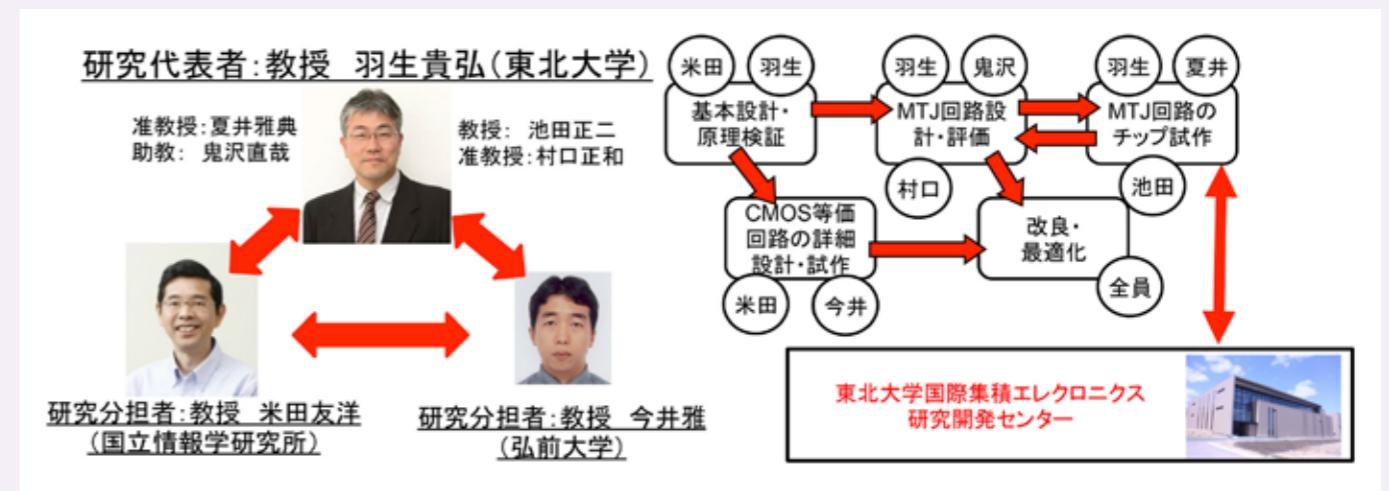


図3 研究実施体制

共同研究施設訪問

INSIDE the Common Research Facilities

研究基盤技術センター

工作部

工作部は、所内研究室からの製作依頼に基づき実験機器の設計・製作を行っております。ステンレス・アルミ・銅といった金属加工がやはり多いですが、最近ではテフロン・アクリルのような樹脂材の加工も多くなっており、所望形状も年々複雑になってきているというのが特徴的なところだと思います。工作部工場に設備されている工作機械は旋盤、フライス盤、溶接機等で、基本的にいずれも手動で操作する汎用機です。最新鋭というわけではありませんが、大変快適に使っており、依頼される全ての製作案件に対応できております。

また、工作機械を利用してもらうこともできます。利用の前には必ず利用講習会を受講してもらうなど安全面のサポートにも力を入れています。必要や要望に応じてマンツーマンで手引きを実施しておりますので、機械工作が初めてという教職員・学生でも利用できま

す。外来利用者用の工作機械も同様に汎用機で、旋盤、フライス盤が設備されています。若干小型でするので工作物の大きさは限られますが、性能的には問題はありません。また、穴あけ、曲げる、叩く、切るなどの基本的で単純な工作の際にも、設備してある、ボール盤、作業定番、万力、コンターマシン、シャーなどが非常に重宝いたします。こちらの簡単な器具の使い方等に関しても、丁寧に手伝いするというかたちでサポートしております。

最後に、技術職員の世代交代に伴って若年化が進んでおります。工作部にベテランの技術職員が在籍していたことは記憶に



工作部工場にて



工作部利用者講習会の様子

新しいところです。当時と比べると技術力不足や経験不足が否めませんが、業務の中でのスキルアップは勿論、研修の機会も有効に利用して、日々努力を重ねているところです。

(末永 保)

ユーザーコラム User Column

平野研究室では、薬物による副作用を正確に検知できる新しいバイオセンサーの開発に取り組んでいます。センサーチップは、ナノ・スピンドル実験施設のクリーンルームで作製していますが、測定時に用いる容器(テフロンチャンパー)は、全て工作部に加工していただいています。このチャンパーは、図1のように2つのブロックに分かれており、各ブロックの真ん中には溶液槽があります。片方のブロックの側面には窪みがあり、そこに微細加工したセンサーチップを置き、もう一つのブロックで挟めば測定容器の出来上がりです(図2)。この容器に測定溶液を入れて電極を置き、センサーチップの中に、心臓の細胞膜を模倣した人工細胞膜を形成すると、薬物副作用の中でも特に重篤と言われる、副作用性不整脈の危険性を検知できるセンサーを作ることができます。



図1 測定用チャンパーの模式図

図2 製作いただいたチャンパーの例

初期の2007年頃は比較的シンプルだったチャンパーも、最近では非常に複雑な構造に進化しました。この進化を支えているのが工作部の皆さんで、加工が難しいといわれるテフロンから、複雑かつ精緻なチャンパーを生み出して下さっています。一時、工作部への加工依頼リストが平野研ばかりになってしまったため、外部業者にも加工の打診をしたことがあったのですが、構造が複雑過ぎて機械加工できないと断られてしまいました。機械加工では作れないほどの難しい構造を、匠の技で

加工していただいていたのか、と工作部の技術力の高さを改めて再認識させられた出来事でした。このように精緻なテフロンチャンパーを使って、私たちは、このセンサーを個人個人の体質を反映した薬物副作用検出へと発展させ、未来のテーラーメイド医療の実現に役立てたいと考えています。そのためには、製作依頼するチャンパーもますます複雑になっていくと思いますが、工作部の皆さん、これからもどうぞよろしくお願いいたします。

(平野 愛弓)

TOPICS

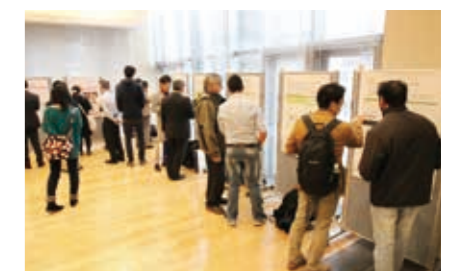
電気通信研究所・トピックス

TOPICS 1

平成28年度 共同プロジェクト研究発表会

電気通信研究所は、情報通信分野における唯一の全国共同利用・共同研究拠点として、所内外の研究者とともに「共同プロジェクト研究」を遂行しています。その成果を報告・発信する平成28年度共同プロジェクト研究発表会が、平成29年2月23日(木)に電気通信研究所本館にて開催されました。これまでで最高187名(一般91名、学内96名)の参加を得て、大変盛会でした。午前中のセッションでは、大野所長による通研および共同プロジェクト研究事業の紹介と、「国際共同研究推進型プロジェクト成果報告」3件が行われまし

た。午後からは「組織間連携プロジェクト成果報告」4件、「若手プロジェクト成果報告」3件、ならびに「情報通信研究拠点プロジェクト成果報告(ポスター発表)」86件が行われ、いずれのセッションにおいても活発な質疑応答と議論がありました。また、今回より全ての口頭発表が英語で行われ、外国人研究者の参加も増して国際性がより高まりました。発表会終了後の「意見交換と懇親の集い」では、和やかな雰囲気の中で、70名を超える所内外の参加研究者による意見交換・情報交換が行われ、「共同プロジェクト研究」をますます発展させていく上



で大変有意義な催しとなりました。なお、共同プロジェクト研究の応募手続きは、平成29年度募集分よりWebベースでオンライン化され、応募者の利便性が高まりました。(尾辻 泰一)

TOPICS 2

通研国際シンポジウム

「Ultra-realistic Acoustic Interactive Communication on Next-generation Internet (ISURAC 2016)」開催報告

通研国際シンポジウム(ISURAC 2016)が宮城蔵王を会場として2016年5月20日~21日に開催されました。このシンポジウムは、平成23年度に採択された日本学術振興会日中韓フォーサイト事業「次世代ネットワークにおける超臨場感音響相互通信の実現」の最終セミナーとの共催で開かれたものです。日中韓フォーサイトは次世代を担う若手研究者の育成と交流を目的としたもので、私たちの事業では5年間にわたり今回のシンポジウム



を最終回として12回のセミナーを重ねてきました。日中韓3か国に加え、ドイツとポーランド、オーストラリア、イギリスを含め7カ国から音響情報通信関連分野の第一線の研究者と若手研究者65名が集まり、真剣な議論が行われました。

シンポジウムは、基調講演と招待講演、若手研究者によるポスター発表と、計3つのセッションに分けられ、基調講演は、ドイツ、ポーランド、オーストラリアとイギリスの研究者が、「Spatial sound perception & technology」と「Speech & music signal processing」に関する最新の研究動向を示しました。招待講演には、国内の研究者7名を招へいし、3次元空間音響と音声情報、および音楽情報に関する最新の研究成果の紹介およびディスカッション



が行われました。ポスターセッションでは若手研究者による32件の研究発表が行われ、国内外の専門家の審査により5件の優秀発表を選出し、表彰を行いました。

今回のシンポジウムにより、日中韓フォーサイトプロジェクト成果の更なる深化が実現できました。また、国際的な広範囲の専門家との相互交流と深い議論を通じて、周辺技術の研究を行う世界規模の研究者との、より大きな共同研究への発展も充分に見込まれるなど、有意義な国際会議となりました。(鈴木 陽一)

TOPICS **3** 通研国際シンポジウム 「Dependable Wireless Workshop 2016」開催報告

2016年11月9日(水)、10日(木)の2日間にわたり通研本館にて通研国際シンポジウム「Dependable Wireless Workshop 2016」が開催されました。IoT (Internet of Things) や第5世代携帯電話システム(5G)、ならびにそれ以降の時代において、より一層重要となるディペンダビリティの高い無線通信ネットワークの実現のために、無線通信システムやその関連技術について広く議論することを目的



として本ワークショップは企画され、電子情報通信学会スマート無線研究専門委員会(SR研)にも協賛頂きました。

初開催の今回は、2009年から通研と部局間協定を締結している米国ラトガース大学WINLAB(Wireless Information Network Laboratory)の研究4名と国内各大学(京都大学、慶應義塾大学、電気通信大学)の無線通信システム分野の研究者3名をお招きし、さらに東北大学の関連部局の研究者5名を加えた計12名による講演が行われました。各研究者からは、IoTや5Gを主なターゲットとし、ヘテロジニアスネットワーク技術、D2D(Device-to-Device)技術、スマートスペクトラム技術、非直交多元接続(NOMA:



Non-Orthogonal Multiple) 技術、分散アンテナ信号処理技術、ハードウェアセキュリティ技術、符号化技術など、各専門分野の最新技術についての研究が発表されました。参加者32名のアットホームな雰囲気の中で、有意義な質疑応答が活発に行われました。(末松 憲治・亀田 卓)

退職にあたって



庭野道夫 教授

本年3月末をもちまして東北大学を退職することになりました。1987年1月に宮城教育大学より半導体工学分野の宮本信雄先生の研究室に異動したのがついこの間のように思い起こされます。異動した当時は、理学部物理の学生のときに学んだ原子核物理学や、就職後に携わった固体物理学の分野に身をおいていた自分にとって、半導体工学は全くの異分野に見え、この分野でやっていけるのかと不安でした。しかし、宮本先生をはじめ研究所の諸先生方や同僚の皆様のご指導を頂き、また、半導体工学もその根本は物理であり、物理がある程度分かればやっていけるだろうと自分を鼓舞しながら、何とか30年間を無事に勤め上げることができました。思えば、通研に異動した頃は、半導体工学分野がまさに隆盛を極めた時期であります。折しも、通研に超微細電子回路実験施設が新設され、通研はまさに半導体研究の拠点となっていました。そのような環境の中で、多くの刺激

を受けながら研究できたことは私にとって大変幸運であり、また大きな財産となりました。しかし、研究の流れは時と共に徐々に変わるものであります。私が教授を拝命しました2000年頃には半導体集積回路工学は成熟期を迎えつつありました。教授として一つの研究室を任せられ、その先退職までの20年間程をどのような研究を続けるか、随分思いあぐねました。結果、半導体工学を基盤とした有機エレクトロニクスとバイオエレクトロニクスをと思い、新しい異分野融合研究を始めました。始めた頃はまさに手探りの状態でしたが、化学や生物・医学分野の多くの研究者のご指導を仰ぎながら、そして何度も壁にぶち当たりながらも、わくわくする研究を楽しむことができました。このように自由気儘に研究をやらせて下さいました、通研という懐の深い研究所に心より感謝致しますと共に、研究の多様性を活かしながら、通研が今後益々発展しますことを心より祈念致します。

通研だより



- 【平成28年度】
- 平成28年6月1日付け
- ◇昇任
 - ①本岡 尚文 教授
旧所属：大学院情報科学研究科 情報基礎科学専攻 准教授
新所属：システム・ソフトウェア研究部門 環境調和型セキュア情報システム研究室 教授
 - ②上野 雄大 准教授
旧所属：システム・ソフトウェア研究部門 ソフトウェア構成研究室 助教
新所属：同 准教授
- 平成28年6月30日付け
- ◇辞職
 - ①上出 寛子 助教
旧所属：人間情報システム研究部門 情報コンテンツ研究室 助教
 - ②坂中 靖志 特任教授
旧所属：国際化推進室 特任教授
- 平成28年7月1日付け
- ◇昇任
 - ①山末 耕平 准教授
旧所属：情報デバイス研究部門 誘電ナノデバイス研究室 助教
新所属：同 准教授
- 平成28年7月19日付け
- ◇採用
 - ①塩崎 充博 特任教授
旧所属：総務省 総合通信基盤局付
新所属：国際化推進室 特任教授
- 平成28年9月15日付け
- ◇採用
 - ①曾 加蓮 准教授
旧所属：国立台湾大学 客員助教
新所属：人間情報システム研究部門 高次視覚情報システム研究室 准教授
- 平成28年9月30日付け
- ◇任期満了
- ①BOUBANGA TOMBET Stephane Albon 准教授
旧所属：ブロードバンド工学研究部門 超ブロードバンド信号処理研究室 准教授

教員人事異動について

- 平成28年10月1日付け
- ◇昇任
 - ①平野 愛弓 教授
旧所属：大学院医工学研究科 医工学専攻 准教授
新所属：人間情報システム研究部門 ナノ・バイオ融合分子デバイス研究室 教授
 - ②加納 剛史 准教授
旧所属：人間情報システム研究部門 実世界コンピューティング研究室 助教
新所属：同 准教授
 - ◇採用
 - ①林 禎彰 助教
旧所属：人間情報システム研究部門 生体電磁情報研究室 研究支援者
新所属：同 助教
- 平成28年10月22日付け
- ◇採用
 - ①KNAP Wojciech Maciej 客員教授
旧所属：仏国立科学中央研究所-モンペリエ第2大学 チャールズスクローン研究所 首席研究員
新所属：ブロードバンド工学研究部門 ブロードバンド通信基盤技術(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)
- 平成28年11月1日付け
- ◇採用
 - ①DIETL Tomasz Stanislaw 客員教授
旧所属：ポーランド科学アカデミー物理学研究所 教授
新所属：情報デバイス研究部門 磁性デバイス(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)
- 平成28年12月19日付け
- ◇採用
 - ①LINDEMAN Robert William 客員教授
旧所属：カンタベリー大学 教授
新所属：人間情報システム研究部門 マルチモーダルコンピューティング(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)
- 平成29年2月2日付け
- ◇採用
 - ①NG Wai Tung 客員教授
旧所属：トロント大学 教授
新所属：システム・ソフトウェア研究部門 情報社会構造(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)
- 平成29年2月15日付け
- ◇採用
 - ①WOLFRUM Bernhard Lars 客員准教授
旧所属：ミュンヘン工科大学 准教授
新所属：人間情報システム研究部門 マルチモーダルコンピューティング(客員)研究室 外国人研究員(客員准教授)
- 平成29年3月1日付け
- ◇採用
 - ①ALTINSOY Mehmet Ercan 客員教授
旧所属：ドレスデン工科大学 教授
新所属：人間情報システム研究部門 マルチモーダルコンピューティング(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)
- 平成29年3月31日付け
- ◇定年退職
 - ①庭野 道夫 教授
旧所属：人間情報システム研究部門 ナノ分子デバイス研究室 教授
- ◇任期満了
 - ①馬 騰 助教
旧所属：人間情報システム研究部門 ナノ分子デバイス研究室 助教
- ◇辞職
 - ①中村 隆喜 准教授
旧所属：附属21世紀情報通信研究開発センター 研究開発部 ストレージ分野 准教授
- 【平成29年度】
- 平成29年4月1日付け
- ◇昇任
 - ①阿部 和多加 准教授
旧所属：情報デバイス研究部門 物性機能設計研究室 助教
新所属：同 准教授
- ◇任用更新
 - ①高崎 和毅 助教
所 属：人間情報システム研究部門 情報コンテンツ研究室 助教
 - ②大脇 大 助教
所 属：人間情報システム研究部門 実世界コンピューティング研究室 助教
 - ③高橋 秀幸 助教
所 属：システム・ソフトウェア研究部門 コミュニケーションネットワーク研究室 助教
 - ④山岸 裕史 特任助教
所 属：情報デバイス研究部門 誘電ナノデバイス研究室 特任助教
- ◇採用
 - ①但木 大介 助教
旧所属：大学院医工学研究科 医工学専攻 産学官連携研究員
新所属：人間情報システム研究部門 ナノ・バイオ融合分子デバイス研究室 助教
 - ②SALVADOR CASTANEDA Cesar Daniel 特任助教
旧所属：人間情報システム研究部門 先端情報システム研究室 研究支援者
新所属：同 助教
- 平成29年5月1日付け
- ◇採用
 - ①GROSS Warren Jeffrey 客員教授
旧所属：マギール大学 教授
新所属：システム・ソフトウェア研究部門 情報社会構造(客員)研究室 外国人研究員(客員教授)

(平成28年6月1日～平成29年5月1日現在)

RIEC豆知識 20 マテリアルズ・インフォマティクス

囲碁や将棋の世界では人工知能がトッププレイヤーを凌ぐほど実力をつけてきていると盛んに報道されて注目を集めています。実は材料科学の分野でも、機械学習やデータ科学を活用して有益な材料を効率よく開発するための研究が始まっています。この新しい研究分野のことをマテリアルズ・インフォマティクスと呼んでいます。しかしご多分にれず、この研究分野も米国が先行しており、その発端はオバマ前大統領の政権時代に「Materials Genome Initiative」と呼ばれる政策が開始された2011年に遡ります。新材料の開発を2倍に加速することを謳って巨額の予算が投入され、各研究機関がしのぎを削って研究を進めています。

実際の、いくつかの成功事例も報告されていますが、今後、政権交代による影響がどのような形で現れるか、注視していく必要がありそうです。さて、マテリアルズ・インフォマティクスの概略について以下に説明してみよう。いま所望の機能をもつ材料を探査することを目標とします。まず初期候補となる材料群の諸性質を収録したデータベースを構築します。収録するデータは実験結果でもよいのですが、大量のデータを取得するために経験的なパラメータを必要としない第一原理計算という数値計算手法を利用することもあります。次にデータベースに収録された情報を元にして、所望の機能を最適化する

新たな候補材料を予測します。この段階でデータ科学のどんな手法を用いるかに応じて、いくつかの流儀が生じるわけです。そして新たに得られた候補材料の諸性質をデータベースに加え、予測精度の向上を図ります。このような手順を繰り返して最適な材料を効率よく見つけることができます。マテリアルズ・インフォマティクスはまだ緒についたばかりの研究分野ですが、材料開発に携わる研究者からの期待は大きく、今後の進展がとて楽しみます。一方で、私のような古いタイプの研究者にとっては、これまでに自分が蓄積してきた知識が不要になるのではないかという一抹の不安や寂しさも同時に感じています。(白井 正文)

