

◆連載◆

《隔月連載全5回》 第2回

R & D部門における機械学習・AI・生成AI活用への データ共有の重要性

上島 豊

(株) キャトルアイ・サイエンス 代表取締役



《PROFILE》

略歴：

1992年 3月 大阪大学工学部 原子力工学科 卒業
1997年 3月 大阪大学大学院工学研究科 電磁エネルギー工学専攻 博士課程修了
1997年 4月 日本原子力研究所 博士研究員
2000年 4月 日本原子力研究所 研究職員
2006年 3月 日本原子力研究開発機構 (旧日本原子力研究所) 退職
2006年 4月 キャトルアイ・サイエンス設立 代表取締役 就任

主な参加国家プロジェクト：

文部科学省 e-Japan プロジェクト「ITBL プロジェクト」, 「バイオグリッドプロジェクト」
総務省 JGN プロジェクト「JGN を使った遠隔分散環境構築」
文部科学省リーディングプロジェクト「生体細胞機能シミュレーション」

主な受賞歴：

1999年 6月
2003年 4月
2004年 12月

日本原子力研究所 有功賞
「高並列計算機を用いたギガ粒子シミュレーションコードの開発」
第7回サイエンス展示・実験ショーアイデアコンテスト文部科学大臣賞「光速の世界へご招待」
第1回理研ベンチマークコンテスト 無差別部門 優勝

主な著作：

培風館「PSE book ーシミュレーション科学における問題解決のための環境 (基礎編)」ISBN : 456301558X
培風館「PSE book ーシミュレーション科学における問題解決のための環境 (応用編)」ISBN : 4563015598
培風館『ペタフロップス コンピューティング』ISBN978-4-563-01571-8
臨川書店『視覚とマンガ表現』ISBN978-4-653-04012-5

4 AI・機械学習などのMIの特性と 注意すべき点

前章では、「R & D部門において生成AIに期待して良いこと、悪いこと」と題し、R & D部門において生成AIの質問応答に関して、活用可能性に関して論じた。本章では、話題を前々章に戻し、AI、機械学習について、特性と注意すべき点に関して、もう少し説明を加える。AI、機械学習は、万能の打ち出の小槌ではないことはすでに述べた通りで、AI、機械学習で必要とされる予測精度を得るためにには、一般的に非常に多くの過去データとAI最適化のための設定値調整が必要である。

例えば、顔認証のAI、機械学習を現在のような使いものになるレベルにするためには、数十名規模のプロジェクトで数百万以上のデータと数年以上に及ぶAI、機械学習モデル及び設定値の調整が必要だったのである。また、飛行場でのバードストライクを判定する画像認識は、羽田空港で使えるレベルのチューニングができる、それをドゴール空港で使用すると、誤判定が多すぎて使い物にならなく、結局、各飛行場でのチューニングが必要である。

要なのが現状である。「顔認証」も「バードストライク判定」も、どのレベルの精度が必要か?という問題が实用性に大きく絡んでおり、人を雇って「判定」をしたほうが安く、精度が高いようであれば、AI、機械学習導入は見送られる。

材料開発のような分野では、恐らく、実験パラメータ数(材料種数、配合、焼結等のプロセスに関する設定値)は数百~数千に上るので、ある領域では期待する予測精度が出るかもしれないが、顔認証のようにあらゆる対象の判定は難しいはずである。また、空港の場合は、どの空港というのは簡単に指定できるが、材料開発の場合、そもそもこの適用領域というものをしっかりと指定(定義)すること自体が難しい問題なのである。

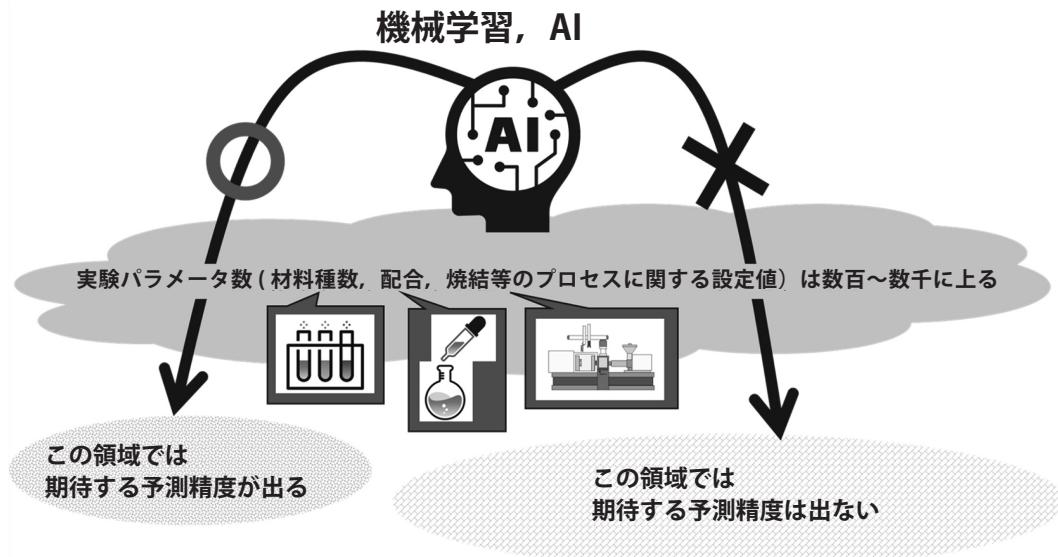


図 7 AI, 機械学習は期待する予測精度の出る領域の明確化が難しい

この領域定義がしっかりとしていないと、「利用者にこういう領域はこの AI, 機械学習は高い精度を有するので使っていいですよ」とアナウンスさえできないのである。この適用領域定義を明確にしないまま利用開放をすると、AI, 機械学習を使った方が使わない時より、材料開発が遅延してしまいかねない。また、利用者がアレルギー反応を起こしてしまい、AI, 機械学習を避けるようになってしまふ可能性もあるので、適用領域の明確化は非常に重要である。ただ、R & D 部門のように広大なパラメータ領域で、常に未知の領域への挑戦を続けるような部門では、概して、必要とされる予測精度を確保できる適用領域が確定したころには、その領域は研究対象でなくなっている可能性も高い。逆の言い方をすると、予測精度を確保できる適用領域を確定するためには、当該領域で多くの実験が必要で、これは研究において、「その狭い領域において、AI, 機械学習の性能確認のためにそんなに多くに実験を行うことが、研究加速につながるのか?」という、悩ましい問題にもつながるのである。

適用領域の話はここまでとし、ここからは AI, 機械学習と従来研究方法の関係について、考察する。AI, 機械学習は予測結果を返すが、なぜそのような結果になるのかの理由を提示しない。一方、研究というものは、その理由(仮説、理論)を考え、検証をしていくものである。また、前述した通り、AI, 機械学習の結果が常に正しいわけではないので、それがどれくらい正しそうかを研究者の独自の方法でデータ分析をし、その理由(仮説、理論)検討を行うことはやめてはいけない。それらの検討を踏まえ、最終的に AI, 機械学習が提示する実験を行うかどうかの判断は、研究者自身が行うべきなのである。

AI, 機械学習の精度が十分に高い領域が確立すれば、その領域の材料開発では、仮説、検証のためのデータ分析は不要になるかもしれないが、研究者はデータ分析を常に行っておくべきである。そうしないと、研究者のデータ分析能力が劣化し、AI, 機械学習の精度の低い領域の材料開発ができなくなってしまう。実際、AI, 機械学習の精度が十分に高い領域が確立されたのであれば、そこは、データ分析ができる研究者に材料開発をさせるのではなく、実験作業に特化した作業員が請負や派遣で実施するのが良いはずである。そして、そのような領域は将来的には AI, 機械学習と連動した自動実験に移行することも可能なはずである。



図 8 AI, 機械学習の予測精度の高い領域は、自動実験へ移行していくべき

ここまでで説明したように、AI, 機械学習は、蓄積データがあれば大きな力を発揮しうるが、評価、運用には注意が必要である。実際に、AI, 機械学習に関して気を付けるべきことを最後にまとめておく。

- 1) AI, 機械学習は万能の打ち出の小槌ではなく、非常に多くの過去データと設定値調整が必要
- 2) AI, 機械学習が適用できる領域を広げようとする実現が遠のく
- 3) どのような材料開発で AI, 機械学習が有効か明確にしないと反って開発を遅延させてしまう
- 4) AI, 機械学習を利用しても AI, 機械学習の結果のデータ分析をし、その理由（仮説、理論）検討を行うことはやめるべきではない
- 5) AI, 機械学習の精度が十分に高い領域は、実験作業に特化した作業員が請負や派遣で実施するのが良い

5 AI・機械学習などの MI の研究への組み込み方法

前章では、「AI・機械学習などの MI の特性と注意すべき点」と題し、AI, 機械学習などの MI の特性と注意すべき点に関して、説明を行った。本章では、「AI・機械学習などの MI の研究への組み込み方法」と題し、AI, 機械学習等を研究で活用するときに発生する様々な問題や研究者側のアレルギー反応などをできるだけ抑えられるような研究スタイルに関して、考察をする。

前章で、材料開発の場合、AI, 機械学習等の MI が必要とされる予測精度を確保できる適用領域を確認すること自体が難しい問題であること、そして、この適用領域定義を明確にしないまま利用開放をすると、AI, 機械学習を使った方が使わない時より、材料開発が遅延してしまいかねないだけでなく、利用者がアレルギー反応をしてしまい、AI, 機械学習を避けるようになってしまふかもしれない点を指摘した。

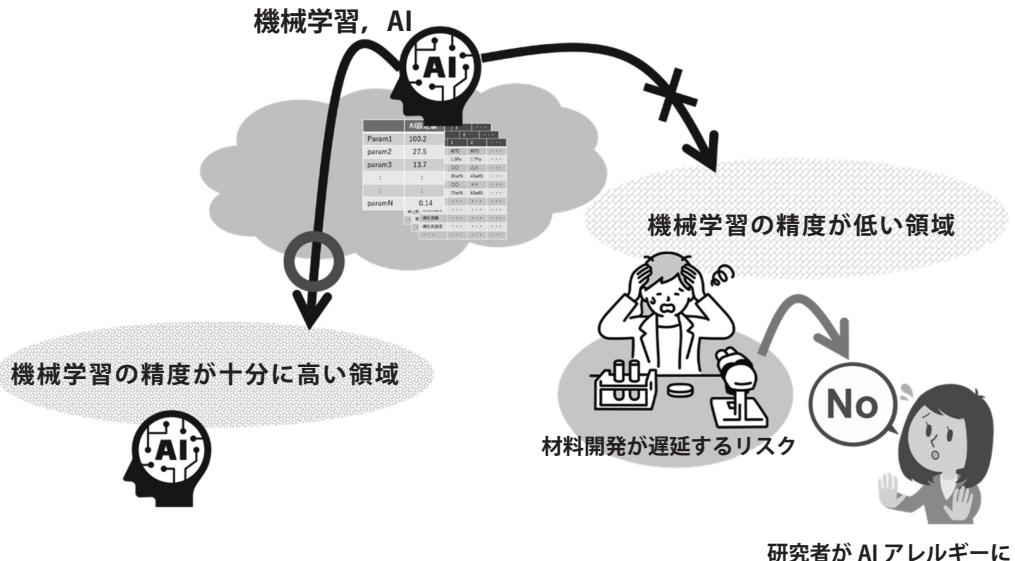


図9 AI, 機械学習の予測精度の低い領域を明確化しておかないと研究者が AI アレルギーに

しかし、難しい、難しいと言っていただけでは、いつまでたっても研究に AI, 機械学習や MI を導入できない、もしくは、研究を阻害する形での導入になってしまふことになる。

AI, 機械学習などの MI を導入しようとしている部門では、目的生成物の性能を向上させるための実験パラメータを提示させる形で AI, 機械学習などの MI を使おうとしていることが多い。しかし、この形での導入では、必要とされる予測精度を確保できる適用領域が明確でない限り、前述で指摘したように様々な問題が生じる。また、AI, 機械学習などの MI から提示された実験パラメータに単に従って実験してはダメで、提示された実験パラメータがどれくらい適切かを研究者の独自の方法で考察し、その理由（仮説、理論）検討を行う必要があるが、実はそれも結構難しい。それでは、実際の研究現場には、どのようにして AI, 機械学習などの MI を導入するべきだろうか？

実際の研究現場に AI, 機械学習などの MI を導入するためには、大きく二つのハードルがある。まず、一つ目のハードルは「必要とされる予測精度を確保できる適用領域が明確でない」ことを前提にしなければならない点である。そもそも「必要とされる予測精度」 = 「従来の方法で研究者が生成物の性能改善に要した試行錯誤回数」を明確化すること自体、難しいはずである。実際、性能改善のケースごとのばらつきが多く、平均値に意味があるので、性能改善難

易度毎の分類が必要だが、その分類自体相当困難であり、「必要とされる予測精度」を明確化することは諦めたほうが良い。もう一つのハードルは、「AI, 機械学習を使うべきでない領域に使ってしまうと、材料開発が遅延して、利用者がアレルギー反応をしてしまう」ことである。これは、「適用領域を明確化する」とことと等価だが、そもそも前提の「必要とされる予測精度」を明確化すること自体が困難で、もし、それができたとしても、「適用領域」というものを厳密に定義することも同じぐらいに困難で、利用者に悪影響をもたらすという問題である。したがって、AI, 機械学習を使った方が使わない時より、材料開発が早くなるようにできればいいのだが、AI, 機械学習の開発者、メーカーとしては、それは保証できないはずである。「必要とされる予測精度」とその「適用領域」を明確にしないまま AI, 機械学習などの MI を利用しても、材料開発が現状よりも遅延しなければ、アレルギー反応は起こらないはずである。例えば、以下のようにすればアレルギー反応は抑えられる。

- 最初は、従来の方法で、つまり、過去データと属性的経験則も生かしながら自力で試行錯誤する。この方法の試行錯誤が煮詰まってきたと感じたら
- 次に、実験計画法などの統計的手法に則った実験及び解析を行なう。この方法でも要求される性能改善に到達しなければ、
- 最後に、AI, 機械学習などの MI に頼ってみる。

機械学習, AI を効果的に使った新しい研究の進め方

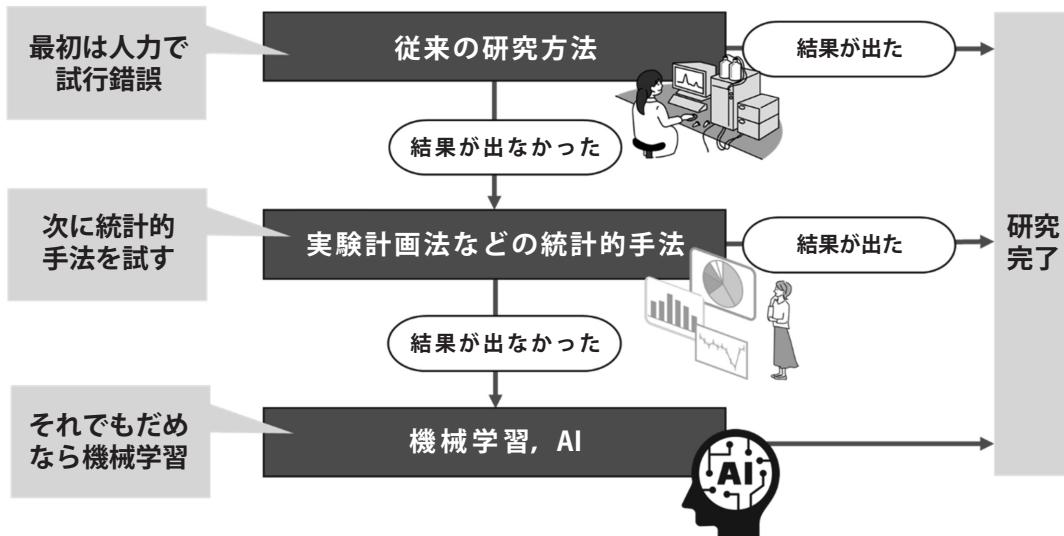


図 10 AI アレルギーを起こさない AI, 機械学習を使った研究の進め方

この手順であれば、すでに自力での試行錯誤を十分行った上で、それも自力では解決できなかったわけなので、AI, 機械学習などの MI で解決できなくともアレルギー反応は起きないはずである。しかし、この方法だと、今までの 3 倍も試行錯誤が増えてしまう可能性がある。それを抑制するために試行錯誤を開始する前に、開発期限などを参考にして、試行錯誤に掛けられる最大試行回数を最初に見積もっておき、自力、実験計画法、AI、機械学習などの MI に 1/3 ずつ割り当てるようにするとよい。ある意味、今まででは自力で何とかするしかなかったので、試行錯誤が煮詰まってきたと感じても、無駄と感じながら試行錯誤をやめられなかったのだが、この方法ではあっさりギブアップが許されるのである。そして、後半は、ある意味自分の責任は軽くなり、実験計画法や AI、機械学習などの MI の責任は重くなるので、少しは気持ちちは楽になれるはずであり、実験計画法や AI、機械学習などの MI に感謝の念を抱けるかもしれない。

実は、AI、機械学習などの MI は、もう少し、活用範囲を広げることができる。a, b) を実施するときに、実験前に AI、機械学習などの MI にどんな結果になりそうか聞いてみるのである。

a) 最初は、従来の方法で、つまり、過去データと属性的経験則も生かしながら自力で試行錯誤する。

b) 次に、実験計画法などの統計的手法に則った実験及び解析を行なう。

a) ではある程度、良い結果が得られそうな算段がある実験パラメータの実験を計画しているはずである。その自分の判断と AI、機械学習などの MI の判断を突き合わせるのである。自分の判断と AI、機械学習などの MI の判断が近ければ、自分の判断にも自信がもてるだろうし、AI、機械学習などの MI に対して、「なかなかやるな」という感情を持てるのではないだろうか？実際の実験の結果が予想通りであれば、自分と MI で称えあい、予想とは全く違う結果でも「お互いまだまだだな」と慰めあえる。自分の判断と AI、機械学習などの MI の判断が全く違うようであっても、a) の段階では MI の判断に従う必要はない。実際の実験の結果が自分の予想通りであれば、MI に対して、「やっぱりお前はまだ半人前だ」と言い放てばよく、MI 予想の方が近ければ、真摯に自分の負けを認め、MI の優秀さを認めるができると思う。どうだろうこの方法であれば、MI が愚かでも、賢くでも MI アレルギーは起こらないし、それどころか同じ研究に対峙する同士として、親近感さえ覚えられるようになるのではないだろうか？

b) の時では、自分が計画した実験パラメータではないので、どんな結果になりそうかは、a) に比べると予

想できないことが多いはずである。ただ、自分なりの考へで、どのような結果になるか推測することは、推測力を鍛えるためにもよいことなので、是非、推測を試みてほしい。そして、MIにもどんな結果になりそうかは聞いてみて、a) の時と同じように一喜一憂してみればよい。こうやって、自分の推測と MI の推測を常日頃突き合わせることで、お互いの強い部分と弱い部分がわかるようになってきて、お互い頼れる相棒になっていけるのである。実際、相手がいることで、自分の弱い部分が意識できるようになり、単に弱いということがわかるだけでなく、改善もされていく。MI も自分の推定が当たったり、外れたりした結果をどんどん取り込んでいくので、改善されていく。

この話は、単なる物語として、書いているのではない、将棋の世界では、まさにこれと同じようなことをして、AI と対話をしながら、自分の弱いところ、AI の弱いところを意識し、改善していくことで、双方、強くなっているのである。研究の世界では、将棋のようにまだ AI が圧倒する状況ではないが、AI との付き合い方には学ぶところが多いはずである。

6 R & D 部門におけるデータ蓄積、共有、利活用の実情

前章では、「AI・機械学習などの MI の研究への組み込み方法」と題し、AI、機械学習等を研究で活用するときに発生する様々な問題や研究者側のアレルギー反応などをできるだけ抑えられるような研究スタイルに関して、説明を行った。本章では、「R & D 部門におけるデータ蓄積、共有、利活用の実情」と題し、AI、機械学習等を研究で活用するための大前提となるデータ蓄積、共有、利活用の実情に関して、紹介する。R & D 部門に関わらず、データが共有、利活用されるためには「データが管理された状態」になっている必要がある。データ共有、利活用の実情の話の前に、「データが管理された状態」とは、何を意味しているのかを説明する。「データが管理された状態」とは、データを生み出した実験及び解析を第 3 者が再現するために必要な情報が記録され、それを必要な時に迅速かつ確実に探し出せる状態に保っていることを意味する。

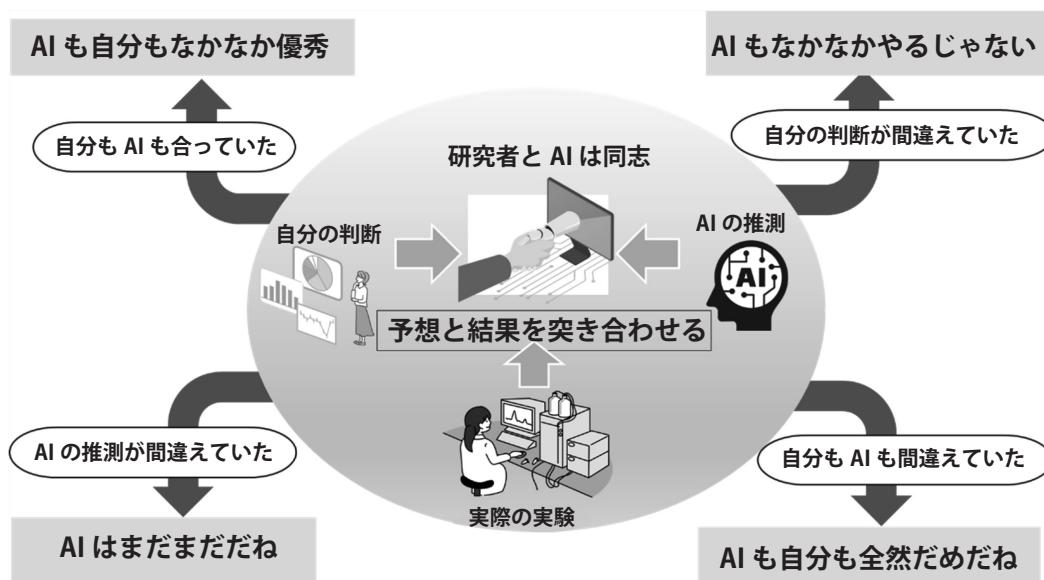


図 11 AI、機械学習との理想的な付き合い方



図 12 実験及び解析を第 3 者が再現するために必要な情報を記録

そういう観点において、ほとんどの R & D 部門におけるデータは、管理された状態というレベルには達しておらず、単なる蓄積と呼ぶのが相応しいというのが実情である。公的、民間の様々な R & D 部門を見てきた結果、データがどのように蓄積されているのかを、以下で紹介する。

一人で完結できるような実験や解析では、ほとんどの情報は研究者の頭の中のみにあり、注目しているパラメータのみを研究ノートにメモ書きをされているだけの場合がある。実験や解析結果の比較評価がある程度難しい課題に対しては、実験や解析の情報が Excel に書き写され、比較しやすいように纏められ、個人 PC 内に保存されていることもある。複数の人が関わった実験や解析の場合は、他の人への実験や解析の引き渡し（依頼）に必要な情報のみは、フォーマットが揃えられた用紙もしくは Excel が準備されていることが多いが、それ以外の部分は、上記状況と変わらない。これらの状況は、「データを生み出した実験及び解析を第 3 者が再現するために必要な情報を記録し、それを必要な時に迅速かつ確実に参照できる状態に保っておく」という観点に立つと、「データ管理」ができていない状態ということになる。これらの状況では、研究者本人は何らかの形で頭の中では整理ができていると思っており、以下ではこの状態を「属人的なデータ管理」と呼ぶこととする。

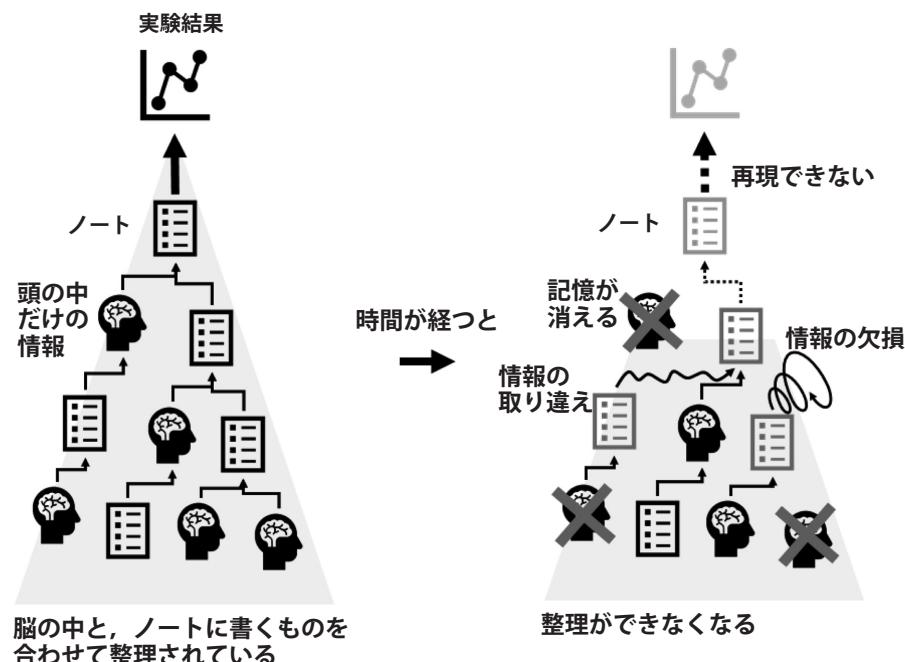


図 13 属的なデータ管理とその特性

「属人的なデータ管理」状況では、実験及び解析の詳細なことは、実際の実施者しかわからない状況になる。当然のことながら実施者以外の人が実験条件や結果内容を知ろうとした場合、実施者にそれらを聞くしかない。実施者から実験及び解析を第3者が再現するのに十分な情報を提供してもらえば問題はないが、実験データをそういうことができるような状態で蓄積している研究者はほとんどいない。そもそも、どれだけ整理好きの研究者でも、「○○の実験・解析情報、データ」が欲しいと言われたところで、該当するデータを探し出すことさえ、相当困難なことが多いはずである。該当するデータが漏れなく、間違いなく提供されることは、ほぼ不可能と考えてもいいかもしれない。このような状況の中、データの授受を行うと、間違った情報を基に実験や解析を進めることができが発生し、間違った結論が導かれたり、検討を進めたのちに始まりに立ち返って、再実験や再解析を行わざるを得なくなることもある。共有した結果に間違いがあったり、再実験や再解析を行う羽目になった結果、データ提供者の信頼が失われ、データ共有の意欲がなくなってしまい、データの共有、利活用は次第に廃れていってしまうのである。

このような蓄積状況のデータを使っているようでは、当然、AI、機械学習が研究の役に立たないのは理解できると思う。ただ、「AI、機械学習が研究の役に立たない」という事実には、少し注意すべき点がある。従来型の解析や分析では、X-Yプロットのように実データに立ち戻り、解析、分析結果を解釈することを行う。したがって、このようないい加減な蓄積状況のデータを使うと、データ自身に問題があることに気づくことが多い（もちろん、必ず気づくとは言わないが・・・）。しかし、AI、機械学習では、データをAI、機械学習プログラムに入力してしまうだけで、個々の実データに立ち戻り、結果を解釈することは行わない。したがって、データ自身に問題があることは気づきようがない。AI、機械学習の予測精度が悪いのがAI、機械学習のモデルのせいなのか？誤ったデータを入力してしまったからなのか？は、分離できなく、わからないのである。つまり、AI、機械学習を活用しようとすれば、従来型の解析や分析以上に、データの信頼性の確保が必要ということになる。

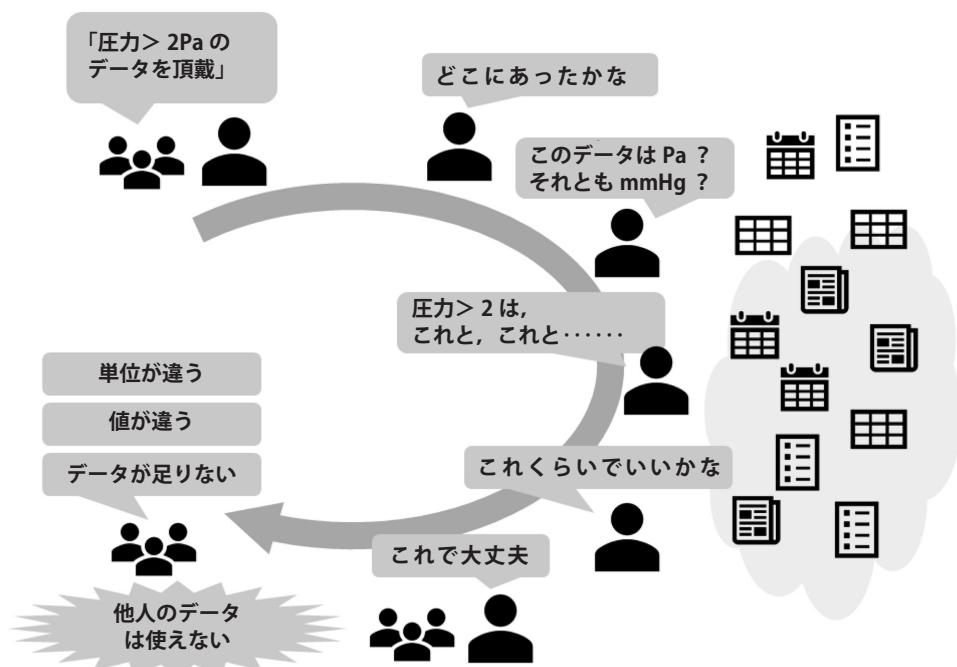


図 14 属的に管理されたデータが引き起こす問題

「属人的なデータ管理」状況が生み出される直接的原因は、そもそも第3者が再現するのに十分な情報が記録されていないことと、記録されているものに関してそれが何を示す値なのか、つまり、その値の項目名に関して、人によって、また、同じ人でも時期によって、その項目名の同一性が保たれていないことである。これらの解決方法は、研究開発リーダーのバックナンバー及び書籍「研究開発部門への DX 導入による R & D の効率化、実験の短縮化」の私の執筆部分に詳しく記載しているので、そちらを参照してほしい。

13) 上島豊, 他
ケムインフォマティックスにおけるデータ収集の最適化と解析手法,
技術情報協会, (2023), p39-74

14) 上島豊, 他
実験の自動化・自律化による R & D の効率化と運用方法,
技術情報協会, (2023), p159-199

15) 上島豊, 他
少ないデータによる AI・機械学習の進め方と精度向上、説明可能な AI 開発, 技術情報協会, (2024), p112-127

参考文献

- 1) 川田重夫, 田子精男, 梅谷征雄, 南多善, 上島豊, 他
PSE book 一シミュレーション科学における問題解決のための環境
(応用編), 川田重夫, 田子精男, 梅谷征雄, 南多善 共編, 培風館,
(2005), p69-82
- 2) 谷啓二, 奥田洋司, 福井義成, 上島豊
ペタフロップスコンピューティング,
矢川元基 監修, 培風館, (2007), p183-202
- 3) 牧野圭一, 上島豊, 視覚とマンガ表現, 臨川書店, (2007),
p1-5, 221-229
- 4) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」6月号, 技術情報協会, (2023),
p63-68
- 5) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」7月号, 技術情報協会, (2023),
p86-91
- 6) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」8月号, 技術情報協会, (2023),
p78-82
- 7) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」7月号, 技術情報協会, (2024),
p77-84
- 8) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」9月号, 技術情報協会, (2024),
p73-81
- 9) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」11月号, 技術情報協会, (2024),
p85-96
- 10) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」1月号, 技術情報協会, (2025),
p74-82
- 11) 上島豊, 月刊「研究開発リーダー」3月号, 技術情報協会, (2025),
p68-73
- 12) 上島豊, 他
研究開発部門への DX 導入による R & D の効率化、実験の短縮化,
技術情報協会, (2022), p195-221