

第24期日本学術会議第3部化学委員会材料化学分科会

第2回分科会委員会 議事録

日時：平成30年5月31日（木）9：00～10：30

場所：分子科学研究所（明大寺キャンパス）研究棟3階311

（※愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地）

出席者(敬称略)：小林昭子、関根千津、玉田薫、福村裕史、栄長泰明、寺西利治、  
伊藤耕三

欠席者(敬称略)：阿尻雅文、安達千波矢、谷口功、山下正廣

議題：

1. 前回議事録確認
2. 委員長報告
3. 第24期材料化学分科会において議論すべき課題、テーマについて
4. 今後の予定

議事：

1. 前回議事録確認

特に修正の意見はなかった。

2. 委員長報告

合同分科会の日程が、12月27日に内定した。今年も重要課題についての講演が予定されている。昨日（5月30日）に開催された分子研所長招聘会議についての紹介があった。

1. 化学とAIについての現状認識について説明があった。分野によってはかなり進んでいる。
2. どのように進めていくかについての問題提起。たとえば特許の問題、AIで特許を取ろうという動きがある。化学構造ではなく、パラメータで権利を抑えようとしている。これは化学者が想像できる化学構造とは表現が違う。従って、化学の素養からはわからないものである。法整備も進んでいる。

化学についての参照基準が議論されている。質の保証をどうするのかについて、このあと提言という形でまとめていく予定。小学校から大学の理科教育、文系への理科教育をどうするのかについても盛り込まれていた。化学としては「なぜ」を強める教育が重要とあったが、科学とは何かということをきちんと教育すべきではないかという指摘が聴講者から出ていた。

すでにメールで連絡したが、化学と情報科学の融合による新化学創成小委員会が立ち上がった。委員は随時登録可能なので、参加希望があれば関根委員長まで

連絡してください。

### 3. 第24期材料化学分科会において議論すべき課題、テーマについて \_

(関根委員長) 第23期の活動の中で、材料化学は、複雑・階層構造形成のダイナミクスがかかわって物性が発現するところも特徴の1つなので、数学と化学との境界領域が重要であるとの議論があった。そこで、その方向性を見つけるためのシンポジウムを開催した。1回目として材料化学研究会を開催し、Liイオン電池材料などについて勉強した。2回目は市民公開シンポジウムを行った。23期の議論を通して、さらに横断的な連携・融合を深めることが重要である、産総研などに材料化学の拠点の設置が望まれる、また人材育成が重要、人工知能、数学を使って研究組織を結ぶ必要がある、境界領域についての勉強を継続すべきである、材料は産業としても重要であるが、サイエンス基盤の構築を進めることが重要、といった考えが出された。

24期12月の第1回目の会合では、委員の先生方から様々な意見が出てきた。応用物理での材料研究との境界領域の受け皿をどうするのかなど。

今期の議論すべきテーマとして関根委員長から以下のような提案があった。

- ① 階層構造を切り口として数学やAIとの関わりの観点で材料科学の発展の取り組みをどうするのか。無機系は扱ってきたが、有機系についてはどうするのか。
- ② 施設の設置についてはどうか。
- ③ 応用物理などが受け皿となっている材料、デバイスをどうするのか。

(玉田委員) 第23期では複雑系を数学の観点で解析するという事に集中してきたが、数学からAIに流れが変わってきた。たとえばトポロジカルなどが議論として上がってきていたが、数学とAIは観点が少し違うので、分けて考えた方が良いのではないか。またデバイスを扱う上ではAIの方が適しているように思われる。対象によってどちらが良いのかについてもよく考えた方が良い。

(栄長委員) 昨日の会議に出た感想として、他の分野との連携が重要。数学も重要だが、医学的な応用やデバイスなどの観点も重要だと考える。医療系はどう扱われているのか。

(小林副委員長) 前期はたまたま無機系の電池を扱う班員から複雑系の機構解明がこれから材料系が将来やっていくべき重要な課題で有ると提起された。その問題解決に数学が役立つという事であった。つまりトポロジカル解析や画像処理は技法のようなもので、医療系というのはその上に有る物という事ではないか。医療系はもっと先なのではないか? Li電池を例にとると、複雑系なのでよくわからずに使っていた部分を数学などを利用すればクリアできるという観点で取り上げてきた。トポロジカル解析

などを用いる数学だけでなく、複雑系についてもAIを取り入れることで研究開発が大きく進展する可能性がある。

(関根委員長) 人間に関わる部分まで考えると、従来の物理的な物性測定だけではカバーできなくなっている。たとえば人間の感性の部分をもどのように計測、数値化するかが重要になっている。

(栄長委員) パラメーターが爆発的に増えるので、数学やAIで解析できるようになると素晴らしいのではないか。

(寺西委員) 昨日の産総研の佐藤さんの講演で、触媒や合成ではAIは強力な手段だということは分かったが、材料ではパラメータが多くなり難しいかもしれない。企業には分析データが大量にあるので、進めやすいが、大学では教育も絡めて考えるとビッグデータを集めるのは難しい。教育の場にAIがどれくらいかわらせるかについては懸念している。

(関根委員長) 昨日の佐藤さんの講演の中で、プリンストンの例もあってAIの利用はかなり進んでいる。不安があるからということでは留まっているのは良くないのでは。講演の中でヒントとなったのは、質の良いデータの意味を誤解してはいけないという点である。失敗データは質の良いデータと考える必要がある。特定の分野で少ないデータで解を見つけていくことも重要になっている。もっと積極的にAIを使うべきではないか。

(小林副委員長) 企業ではロボットを使ってデータを集めるなど、もっとAIよりになると思ったが、最終的な判断は人間が行っているようで少し安心した。AIと研究者は住み分けることができる。一方で富士フィルムの浅見氏の指摘では、大量なデータを識別するために統計処理が重要になってくる。現在、簡単に使えるソフトがあるので、統計処理を行う事が容易になってきた。材料の人達も統計的な処理を用いて大量のDATAから、これ迄に取り出せなかった重要な結果を得るようにすべきである。

(玉田委員) 生物の分野ではAIの利用がもっと進んでいる。中国ではがん生細胞のデータを自動化を使って大量にとっている。最初のスクリーニングは人間の意思が入らずにデータを収集し、その次の段階から人間が入っている。分析データもノイズも含めすべて取っている。日本ではメカニズムの解明が優先してデータの収集が限定的になる傾向があるが、それに対してアジアでは、ロボットを使って恣意的なものを入れずにビッグデータ解析をすることを優先している。

(福村委員) AIは、からあげとプードルの画像認識はできるが意味はまったく理解していない。医学の世界では、2、3年以内のがん細胞と正常細胞の区別はAIが行うようになる。理由はわからなくても区別ができています。ただしAI向きとAI向きではない

仕事がある。東ロボ君の苦手な科目は国語である。

最近の高校生などはAIを使いこなしている。AIは道具として考えればよい。ビッグデータが集まる分野では道具として使えば良い。

①について言えば、研究会でいろいろな立場のAIの研究者を読んで話を聞くのが良いのではないかと？

②施設は化学では難しいのではないかと？

③、④については、日本化学会の提言で、今後10年以内に実現する課題の中に材料化学に関するものがあつたのではないかと？いまの一番の問題は中学生は理科が嫌いになっていることである。タイで教えたときの学生の質問の中に化学の勉強が何の役に立つのか？という質問が多かつた。材料化学教育が重要なのではないかと。アジア全体の問題だが、化学が何の役にっているのかももっとわかりやすく説明することが重要である。自動車産業では、蓄熱材料などが重要になっている。電池の効率は上がっているが、暖房や冷房のエネルギー消費が問題となっており、材料が解決のためのキーとなっている。そのような材料はAIでは出てこない。AIにこだわらずに材料化学の面白いテーマを考えてみてはどうか？国立情報学研究所の新井紀子さんの講演が面白い。

(小林副委員長) 私達の身の回りの物は皆“もの”であり、そのものを作っている化学、新物質を創っていく化学という認識が乏しいのではないかと？

(関根委員長) AIは道具として使うのが良いと思う。②は置いとくとして、①を排除するのでもなく、④も含めて考えてはみてはどうか。安達先生から、京大の梶先生が有機デバイス特性の計算による予測でかなり進んだ研究をしているとの情報があつた。また有機薄膜太陽電池の効率をAIで向上させたという論文が出ていた。デバイスの場合には、通常は条件が多すぎて大変なはずだが、その論文では細かい条件には目をつぶることによりAIの活用ができたと書かれていた。

(玉田委員) AIはツールなので、それを材料科学の中にどう組み入れれば良いか考えてはどうか。先程のがん細胞のデータでは、日本ではがん細胞の断片の観察のみだが、中国では生きたままデータを取っている。日本の発想はAIについて行っていない部分がある。日本がAIをどのように使っていくかが重要。

(関根委員長) いままで計測されていなかった材料の物性やデバイスとAIとの関係性を明らかにしてみたい。勉強会を秋から冬に開催したい。AIは道具であるという観点で講演者を推薦してほしい。候補者としては、新井先生(情報研、関根先生依頼)、梶先生(京大、寺西先生依頼)、常行先生(東大、小林先生依頼)、玉田先生(九大)などが考えられる。8月開催(1~9日のどこか)。委員の先生方に予定を聞

く。講演会の後にアドバイザーとして分科会を開催したい。

(小林副委員長) テーマは材料におけるAIということになるのか？

(玉田委員) 材料系については、ある程度決めなくてもよいのか？

(関根委員長) 材料については決まっていない。感性など従来の計測ではカバーできなかった材料や応用物理に関わる材料なども含めたい。確かに材料系をしぼった方が報告書をまとめやすい。

(玉田委員) 高分子や複合材料の分野はどうか。

(伊藤委員) 産総研の森田さんはどうか。細野先生が講演などでよく話されることとして、AIは絨毯爆撃のようなもので、ある程度のあたりを付けた上で最後は研究者が重点個所で地上戦を行って勝負をつけることになる。見過ごしていた部分を気づかせてくれることに価値がある。

(関根委員長) 研究会では、自分の研究紹介だけでなく、分野全体を俯瞰して紹介してもらおうということではどうか。あまり各論に入ってしまうと良くないではないか。栄長先生の関連ではどうか。

(栄長委員) 理工系と生物系の融合の委員会を行っているので、だれが良いか考えてみたい。

#### 4. 今後の予定

8月をめどにシンポジウムを開催。10月から2年目に入る。

以上

伊藤（東京大学）記