

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3回分科会委員会 議事録

日時：平成30年7月23日 13:00～16:30

会場：日本学術会議6階6-A(1)(2)会議室

出席者（敬称略）：関根千津、小林昭子、阿尻雅文、玉田薫、山下正廣、谷口功、
寺西利治、（説明者）常行真司、（参考人）梶弘典

欠席者（敬称略）：安達千波矢、福村裕史、栄長泰明、伊藤耕三

議題：

1. 前回議事録確認
2. 材料化学分科会 勉強会
3. AI, MI が材料化学へ及ぼすインパクトと、その状況を前提とした方向性について
4. 今後の予定
5. その他

議事：

1. 前回議事録確認

関根委員長から簡単な説明があり、特に修正の意見はなかった。

2. 材料化学分科会 勉強会「AI, MI が材料化学へ及ぼすインパクトを探る」

① 趣旨説明

関根委員長から勉強会の趣旨説明があった。

（関根委員長）AIは技術開発のレベルを上げており、親委員会でも注力して議論を進めている。化学の素養のない人が精度の良い計算をできはじめていることに喜ばしい気持ちとともに危機感がある。AIは金融やゲームの世界ですでに人間の能力を超えているが、化学の世界ではまだだという認識がある。化学では、材料を合成し特性を測るというサイクルが重要なので、AIがデータをどんどん蓄積するという爆発的なことを起こせない状況であり、また、その分野のノウハウが必要である。材料化学では、複雑系など構造が由来するようになってくると、一筋縄では行かないところどころで爆発はまだ起きていないと思う。しかし、少ないデータで予想したり外挿するなどの手法がどんどん出てきているので、今がAIを検討する最後のチャンスかもしれない。現状を講師の先生にお話し頂いて、我々も認識を改めて、材料化学ではどのようなアプローチが必要かを議論したい。

② 講演

1) 「計算科学とインフォマティクス手法を用いた材料開発への期待」

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 常行真司教授

(谷口委員) 太陽電池の評価結果が、実証された例はあるか？

(常行教授) まだ実用化された物はないが、提案はしている。さきがけ研究の中で性能が出始めた例がある。

(谷口委員) ペロブスカイト型太陽電池など、材料性能改良のための提案があれば、ノーベル賞獲得のサポートになるのではないか。実験系で性能を上げることに役立てられれば大変よい。

(常行教授) ペロブスカイト型太陽電池を提案したのは人間であり、そこは AI にはできないが、そこから先は提案できる可能性がある。AI は、性能の外挿はできないかもしれないが、内挿は得意であり、少しの外挿は可能である。それを新しいデータとして学習し、次に進め探索範囲を広めることもできる。

(谷口委員) 全部の実験に対応することは難しいと思うが、ここをちょっとう変えれば良い等の提案ができるのであれば、実験系の人は大変助かると思う。

(常行教授) もう一つ良いことは、インフォマティクスの研究者はソフトウェアを開発してすべて公開することである。誰でも無知な状態から使えて、研究に役立てることができ。道具としてとにかく使ってみることができる。

(谷口委員) これからは人海戦術では中国等に負けるので、無駄を省くという意味では研究者に大変役に立つと思う。

(玉田委員) 結晶材料には適応するが、アモルファス材料にも適応するのだろうか。内挿であれば使えると思うが、外挿はどうか。予想を超える結果が得られることがあるのだろうか。

(常行教授) 内挿なので、予想外はそれほどない。

(谷口委員) 人の勘や経験を入れて研究を進めることで、予想外は創っていただく。実験系は性能が上がらない低迷時期があるので、推薦システムで様々な提案があると良い。

(常行教授) さきがけで、推薦システムの理論を作っている人がおり、推薦できるようになっている。推薦システムの活用が三元系相図の実験で今始まっている。

(谷口委員) 今までしらみつぶしにやっていたものに、少しでも方向性が見えると良い。

(阿尻委員) 少し昔コンビケムで網羅的に探索していたが、計算化学を取り入れ絞り込んでいく同様のアプローチがあった。今もあるが、何が問題で、それを解決する突破口は見つかったのか。そういう視点で今の AI はどうなのか。

(常行教授) その分野はあまり詳しくないが、当時と比べると圧倒的に計算が高精度かつ高速になった。それから、インフォマティクスの手法の発展が急速である。研究者はプログラムを公開し、他の研究者はそれをベースにして更に新しいプログラムを作成する。1、2ヶ月前の方法論を使っているのはダメだといわれることもある。AIはいろいろな分野で使われるので、発展は速くなる。コンビケムもまだ続けられている。

(谷口委員) 新トレランスファクターの「ln」の意味は？

(常行教授) よく分からない。これが機械学習の困るところ。入力データの組み合わせの方が、分かっている構造データ数よりも多くなるので、そこから有用な物を残す。入力パラメータとしてありとあらゆる組み合わせを含め、その中から良い物を残すという発想。

(阿尻委員) 入力と出力に相関があっただけであるが、そこにはサイエンスがあるはずである。

(玉田委員) 既存の理論で説明できないところについて試みることに意味がある。学生や高校生が実験で何かを発見するのに似ている。

(阿尻委員) 近い外挿は当たる確率が高いであろう。遠い外挿先の情報を扱う研究はあるか？

(常行教授) それもある。統計数理研の吉田亮先生は、あるデータの範囲を超えるところを研究されている。

(玉田委員) 二つ違うフィッティングをかけると、遠く離れたところでも予測できるのではないか？

(小林副委員長) 高温超伝導体のデータ同化構造探索では、4つの XRD ピークを取り込んで構造解析を行ったということか？

(常行教授) シミュレーションで、ある温度ある圧力で化学組成を決めると安定な構造は見つかってもよいはずである。ただ、構造が複雑になると探索空間が広がるので有限時間のシミュレーションでは探索ができなくなる。実験データには情報が少ないにしろ、周期性を含むデータを用いて安定ポテンシャルを決める手助けをしてくれる。

(山下委員) H_2S の高温超伝導では超高压下では H_3S になっているのではないか？

(常行教授) シミュレーションは H_3S でやっている。そもそも H_2S では密度が合わない。

(山下委員) そうすると、余分な S が出るはずだが。

(常行教授) 相分離が起きている。

2) 「有機 EL 材料・デバイスのハイスループット開発」

京都大学化学研究所 梶弘典教授

(谷口委員) 材料は良いがデバイスが悪い例としてはどんなものがあるか。

(梶教授) 我々のデバイスでは、励起子が発光層以外で結合して効率が悪くなるという例があった。この例の場合、励起子ブロッキング層を入れて改善することができた。同じ材料を使っている、材料のポテンシャルをいかに引き出すかは、デバイス構造次第である。

(谷口委員) 材料が良ければ、ポテンシャルを引き出すようにデバイス構造を組むことができるということか。

(梶教授) 材料のポテンシャルを引き出せていない場合もある。例えば、青色の深みをどんどん深くしていくと、周りの分子のエネルギー準位も高くする必要がある。そこがなかなか開発できていない。エネルギー準位を高くすると、材料自身が不安定になることもあり、どう折り合いを付けるかを考える必要がある。

(阿尻委員) 有機は無機よりも難しいという話があったが、計算機で官能基等を網羅的に探索し性能を予測する難しさは何か？

(梶教授) 我々のグループでは探索空間が 1000 個もいっていないが、MIT の Alan グループは機械学習で激しい計算を行っている。巨大探索空間を扱うためディープラーニングが使われているが、素人が手を出すものでもないし、コストも高く、データ量がかかなり必要になってくるので、我々は今のところは手を出すつもりはない。従来の機械学習から始めるのがよいと考えている。もう一つの問題は、物理現象の解析がかかなり進んでおり、それ程単純ではないことが分かりつつある。そのような複雑さも扱うためには、何らかの手法を使っていく必要がある。

(阿尻委員) AI を使って新しい材料-性能間のルールを抽出できると、新たな材料が見つかる...それが化学と AI の接点。

(梶教授) 材料系と製薬との違いはデータ量の違い。従来のデータをデータベースとして整理することが重要。データベースの整理を人海戦術とするのか AI を使うのか。後で人間がチェックするのか、100%ではない状態で使うのかは議論の余地がある。一番得意なところから使っていくのが現実的なところかと思う。

(山下委員) 一つの分子にドナー-アクセプター部分を作って電子状態を計算すれば、ある程度の表はできるとは思うが、有機物の場合、立体効果を入れるのは難しいのではないか？

(梶教授) 立体効果は全部入れている。平面でドナー-アクセプターが繋がっていると HOMO、LUMO が混ざってしまうが、立てていくと分かれていく。量子化学計算をするときは構造を optimize して、立体効果を入れて HOMO、LUMO を計算している。

(小林副委員長) 立体構造として、アダマンタンを入れる発想は？

(梶教授) 研究者の感覚である。今回は solution process で作りたいということになると、aliphatic な構造が必要で、直鎖のものを入れるのが普通であるが、アダマンチル

を入れると耐熱性が上がり、溶解度も確保される。このような探索もできると面白いが、現実には研究者の感覚でやっている。

3) 「ナノ材料と次世代情報化社会」

九州大学先導物質化学研究所 玉田薫教授

(山下委員) 尿検査はその場検査はできないのか？

(玉田委員) 尿中は血液中に比べてマーカ濃度が薄いので検出が難しい。高感度化や、**Lab-on-chip** のように夾雑物がある場を除けば、将来的には妊娠診断以外の検査も家庭内で可能になるだろう。将来的には予防は尿で、医療診断、特に救急の場合は血液で分けた開発が進むと予想される。

(谷口委員) 尿で色が変わる原理は？

(玉田委員) 従来法では抗体抗原反応で Ag 微粒子を凝集させて色を変えている。我々の手法では、例えば Ag 微粒子を 2 層積層しておいて、その上に微粒子を吸着させることで色を変えている。妊娠診断薬と同程度の反応でも、吸光度で 10 倍、波長シフトも加味すると 100 倍近い色変化があるところを使って高感度センサーを作製している。

(谷口委員) つまり Ag 微粒子の層を変えるということで、ある種の反応で発色させるのではないという理解で良いか。

(玉田委員) Ag 微粒子を下地に使っておくと、シグナル強度が上がる。

(関根委員長) 心疾患が未病の状態でも尿の中に分泌される成分が、こういう段階で色でセンシングできるというところまではできているのか。

(玉田委員) まだできていない。現状は、血液で ELISA 試験で蛍光で見るというところまで。検出感度を上げると尿でも見られるのではないかと目指している。

(関根委員長) 高感度に出来るかどうかを今やっているところということなのか。

(関根委員長) 色を照合して何段階であるかが分かれば良いと思う。

(玉田委員) 九大の久山町研究では町の人々の同意を得てビッグデータを取得している。3000 人のデータを追跡した結果、血液中のある成分の量と将来の心疾患との関係が明らかになった。

(谷口委員) ある種のマーカーがあると、これを押さえればよいということが分かると、対応が分かり易い。

(玉田委員) 一部すでにわかっているマーカーもあるが、新たなマーカーを探す研究も精力的に行われている。

(谷口委員) 一つのマーカーではなく、いくつかのマーカーでパターン認識をさせてという手段もあるのではないか。

(玉田委員) 分析的な手法においても、一旦分子構造を忘れて、スペクトルのパタン

解析からマーカを探す研究も企業などで進められている。

(阿尻委員) 今も久山町研究は続いているのか。

(谷口委員) 日本である種のプロジェクトがあり、地域をいくつかに分けて、生まれた子供を13歳まで追跡し、遺伝的要因があるかどうかを調べている。日本ではいくつか進んでいる。

(阿尻委員) 癌患者の抗がん剤と効き方の相関は取りやすいと思う。健常者のデータを集めるのは難しいのでは？

(玉田委員) 病院では、来院した時点からスタートするデータ収集になるので、健常者のデータは集められない。

(阿尻委員) 検診時にデータ使用を承諾するのはすごいこと。承諾した人のみをサンプリングしてはいるが...

(谷口委員) ある町、ある村を総抱えでやる方が良いかもしれない。あちこちでやる必要がある。

3. AI, MI が材料化学へ及ぼすインパクトと、その状況を前提とした方向性について

(関根委員長) AI, MI のインパクト、方向性について材料化学の観点から意見はないか？常行先生からはすごく進んでいる部分の紹介があった。梶先生の分野ではデバイスシミュレーションの技術は大分前からあって、材料というよりは各層のポテンシャルや移動度などの物理数値の置き換えで、厚みと組み合わせで、どのようにホールと電子が入っていくのかまでは、たぶんまだできていないのではないかと。

(梶教授) その時の問題は、合成してみないと移動度などが分からないところ。現在のシミュレータはパラメータを入れないと使えない。合成せずにシミュレーションしたいというのが欲求になってくると思う。

(関根委員長) デバイスが絡むところで一番問題になるのは、いろいろなデータが取れたときにデバイス構造がちょっとずつ違っていて、それを同列のデータとして扱えない場合。デバイスのシミュレーションが出来ない場合、材料系とデバイスをうまく繋げられれば良いのではないかと。

(梶教授) そういう進め方もあると思う。Unknown なことが多すぎるので、良い物を作るときにブラックボックスがあっても良い。ただ、企業は材料の置き換えをしたくない。それは、周辺材料も変える必要があるから。Flexible な考え方があっていいと思う。

(谷口委員) AI もいろいろな使い方をして良いのでは。ちょっと助ける、出口まで助けるなど、いろいろな AI の使い方があっていい。

(関根委員長) 日本の研究は進んでいて良いと思ったが、日本の技術をどう強み・競争力に変えていくか。プログラムは公開になっているが、蓄積されたデータが最重要

なのではないか。

(玉田委員) イノベーションは爆発でなければならないと聞いた。どの分野で何をやったときに変革が生まれるのかという目線で見ると、そんなに多くはない。政府は爆発的な変化を期待している。

(関根委員長) ある閾値を超えたときに爆発が起こる。是非日本で起こしたい。手法等はどんどん進んでいるが、公開になっている以上、競争力に結びつくしくみができていない。

(梶教授) 創薬系の企業では全部オープンにせず、囲い込んでいる。材料系の企業はこれからの段階。日本の中で良さを取りまとめていくステージではないか。

(阿尻委員) 「情報科学との融合による新化学創成小委員会」で議論がいくつか進んでいるが、三つの phase で AI が入ってくると思われる。「何を創るか」、「どうやって創るか」、「工業プロセスでどう動かしていくか」。有機合成の研究者は二番目に敏感である。創薬では、経験の中から材料を探索し全合成を考えるが、どうやって考えればよいか分からない。最近の Science で、従来のデータを全部解析するとコンピュータが予測したという報告がある。全合成の人たちは、自分たちは何をやればよいか分からなくなる。

(関根委員長) 合成ルートを全部集めると分かってしまうという意味ですね。

(阿尻委員) そうです。その合成経路が以前の論文のものと全く一緒になった。教育の観点からも、有機合成の研究者は AI の教育をやらなければいけないと思っている。今回の話は「何を作ればよいか」ということ。計算科学の進展やデータ量の増加を考えると、発想から何かをやるより、外部から入ってきてしまう。その場合、材料化学としてどこに自分のスタンスを置けばいいのかを考えておかなければならない。同じアナロジーで言うと、次にすることの参考として捉え、新しい有機合成のあり方を作れると考える研究者もいる。AI が出してくる相関がなぜ出るのかというサイエンスのネタを出してくれるという視点もある。

(谷口委員) 解明できるかどうか分からないが、重要な意味があるのだろうと思う。そこから新しいイノベーションや分野開拓の種になる気がする。

(阿尻委員) イオン半径という発想を持ってきたことが、相関を取る上で大きな進展になる話があった。相関とのコミュニケーションがあった気がする。こういう発想を入れると、もっと効果的に相関がとれるのではという考えは、AI とのコミュニケーションで出てくるのではないか。

(梶教授) トランスファクターを替えようという発想はなかなかないが、それがきちんと出来るということは、教科書レベルの話も新しくできるということ。

(関根委員長) ある特性を予測したいとき、効いているパラメータが入っていれば AI が選別してくれるが、入っていない場合は、研究者が複合的なパラメータをセンスで

選ぶことになる。

(梶教授) いわゆる QSAR ですね。descriptor がたくさんあって、それと property との相関をどうとるかという話と同じ。相関に因果関係があるかどうかにもっていけるかどうかも重要。

(関根委員長) 相関関係があれば、因果関係にいて、また新しい発見があるかもしれない。相関が取れるまでの descriptor をどう設定するか。

(玉田委員) 外挿にいかず内挿で良いのであれば、相関関係が得られさえすれば理屈がわからなくてもよいのではないか。

(関根委員長) 外挿の中にあるのか内挿の中にあるのかどちらでも良いので、欲しい物が見つかればそれで良い。

(玉田委員) 全合成は合成そのものが目的ではなく、そこから置換基の効果など、酢種々の反応を追跡することが目的だと聞いた。コンピュータを使うことで見直される分野もあるかもしれない。

(谷口委員) まずは、やりたいという人間の夢や希望が必要。AI はその手伝いに使えばよい。

(阿尻委員) 学問が消えることも含めて、AI でサイエンスが変わる可能性がある。もう一つは、全合成は特にそうなのかもしれないが、教育はどうするか。ある程度基礎を教えておけば、全部パソコンが解決してくれるので良いのか。

(谷口委員) 何割かの自由な領域を残す必要がある。何もやらなくて良いということにはならない。とんでもないことをやるのは OK だが、それだけではダメ。何が必要かは、今後議論が必要。

(阿尻委員) 物理と違って化学は曖昧模糊としたところがある学問。化学は AI で全体が大きく変わる学問なのかもしれない。

(関根委員長) 今まで化学だから演繹的にやっていたということもないが、パラメータが多いので、起点から徐々にやっていくやり方が馴染んでいたけれども、AI でやり方が大きく変わりそうだから、やり方を変えていかなければならないのかという思いがあるのかもしれない。

(谷口委員) 最後は、材料を形にする必要がある。

(関根委員長) 産業界からの方がこういう特性の物が欲しいという要望が強く、誰がそこに最初にたどり着くか、それまで粛々とやっていたことがすぐにできるようになり、しかも化学的素養のない人でもできるようになりそうである。データを蓄積できる人達が強くなる。

(玉田委員) 日本学術会議で AI を取り上げる理由がよく分からない。世界はかなり進んでいる時に、日本も対応を急げと言うことなのか。

(阿尻委員) 当たり前のように AI は入ってきているので、教育は今まで通りでいい

かを考えることが一つの理由。学問の体系やあり方を考え直す必要がないのか、共通の視点としてあると思う。

(関根委員長) 親委員会ですることではない。化学は日本の産業のなかでも稼いでいる方であるが、大きく変わるのではないかという危機感がある。材料設計からいいものを創るというサイクルが速く、一番安く創れるのは誰かというビジネスに変わるのではないかという危機感がある。学術の基礎を産業界が使うという流れが短くなる可能性があるのではないかと思ったのが経緯。

(阿尻委員) 相関は、あくまでブラックボックスだが、それができると、大学の先生にわざわざ相談に行かなくても出来てしまう。なぜ出来るのかというサイエンスを取り出して、学術に持って行くことに注力すればよいのではないか。

(玉田委員) ブラックボックスにも良い点と悪い点がある。知識が無くとも良い物を創れる人が出てくると考えるといいことである。

(関根委員長) これまで専門性によって区別されていた壁が取り払われるから、他分野の人が競合者になる可能性があるという危機感がある。化学は自動運転と違い弊害が少ないので開発時間とお金が大幅に短縮できるが、我々がメインプレーヤーとしてやれないと意味がない。そのために、どういうやり方で、どういうデバイスとの組み合わせで、どういうふうに入材が育っていくのかということ。

(山下委員) 従来の学問体系と AI の方向性は異なる。中国では AI を取り込んでおり、半年ぐらいでシステムが全て変わる。レンタサイクルは半年で 1000 万台になっており、バーコードで 1 日乗り放題で 1 元。習近平は、次は AI だと言っているが、日本は全くまとまっていない。AI の学問的、政治的位置づけは異なるから、日本うまく統一しないダメ。世界の流れの中で日本はどうやっていくか、AI は重要な課題だと思う。日本の方向性がまだ見えていない。

(玉田委員) AI に抵抗があるのはなぜか。AI のリスクが具体的に想像できない。

(山下委員) 想像しないものがやってくる恐怖ではないか。前も言ったように、囲碁の対戦で韓国のチャンピオンと対戦したときに、2 回連続で AI が勝って、3 回目にチャンピオンが定石をはずしたところ、AI はついてこれなかった。だが次の日にその手を入れておくと、また AI が勝ったが、まだ人間が AI を支配できている。

(阿尻委員) 棋譜ではなく、基本的なルールだけを AI に教えておいて対戦させると、AI は新しい定石を作ったらしい。そこまでいくと、人間の手を完全に離れてしまう。

(玉田委員) 人間の脳にも癖がある。人間の脳が完璧とは限らない。

(関根委員長) 生理的に嫌なこと、自分の研究のテリトリーを知らない人に侵される恐怖、データがたまらないこと。それと、データベースを作ることが進まない。日本人はデータベースを作るのが下手なのではないか。

(小林副委員長) いろいろ議論がされているが、包括的にデータを作ってみるに供

給するなど、まとめて利用することが必要。

(関根委員長) 公知ではなく特殊なデータベースがオープンになっていることはあるか？

(阿尻委員) 情報研の喜連川先生の話であるが、日本はデータを重要視していて、日本の大学で全データを 10 年間保存するのは日本だけかもしれない。これは日本の強み。Negative data も含めて保存されているが、効果的な使い方をされていない。

(山下委員) 日本はシステム化が下手くそ。東北大では、学科、学部、全学で別々のフォーマットで業績リストを作っている。統一したフォーマット作りさえできていない。

(玉田委員) 九大はエルゼビアに外注しているがそれで十分に足りているように思う。

(谷口委員) 上手に使えないと意味がない。

4. 今後の予定

1 年目の残りはメールベースで審議する。12/27 は統合分科会なので、連絡事項がメインになる。

5. その他

特になし

以上

寺西 (京都大学) 記