

総合科学技術・イノベーション会議有識者議員懇談会 [公開議題]

議事概要

- 日 時 令和4年7月7日(木) 9:52~11:00
- 場 所 中央合同庁舎第8号館6階623会議室
- 出席者 上山議員、梶田議員(W e b)、梶原議員、佐藤議員(W e b)、  
篠原議員、菅議員(W e b)、波多野議員、藤井委員  
(事務局)  
森総理補佐官(W e b)、合田審議官、高原審議官、覺道審議官、  
阿蘇審議官、松尾事務局長、井上事務局長補、渡邊事務局長補、  
奈須野統括官、辻原参事官、次田参事官、赤池参事官  
(慶應義塾大学理工学部化学科)  
畑中准教授
- 議題 「総合知」の本年度の普及啓発(キャラバン等)の進め方  
先端研究等に関する報告:計算化学による機能性材料の理解の深化と効率的  
設計

○ 議事概要

午前9時52分 開会

○上山議員 皆様、おはようございます。定刻になりましたので、只今より総合科学技術・イノベーション会議有識者議員懇談会を始めます。

議題に入る前に、事務局の人事異動について事務局からの報告をお願いします。

○次田参事官 ありがとうございます。事務局の方ですが、7月1日付で科学技術・イノベーション推進事務局統括官として奈須野太が着任しております。

○奈須野統括官 奈須野です。経済産業省から来ました。よろしくをお願いします。

○次田参事官 同じく7月1日付で科学技術・イノベーション推進事務局事務局長補として渡邊昇治審議官が着任しております。

○渡邊事務局長補 渡邊です。よろしくお願いたします。

○次田参事官 あと、私、総括参事官として次田が着任しておりますので、今後どうぞよろし

くお願いいたします。

以上です。

○上山議員 ありがとうございます。

それでは、議題にまいります。今日の議題は「総合知」の本年度の普及啓発（キャラバン等）の進め方についてです。

第6期基本計画でも記載しました「総合知」に関する推進方策については、この木曜会合の場で昨年7月から計6回にわたり議論を重ね、昨年度末に中間取りまとめをされました。本日は「総合知」の本年度の普及啓発、特にキャラバンなどの進め方について事務方から報告等があります。

まずは事務方の辻原参事官から「総合知」の本年度の普及啓発（キャラバン等）の進め方について説明をお願いいたします。

○辻原参事官 おはようございます。

それでは、資料1を御覧いただきたいと思います。「総合知」の本年度の普及啓発（キャラバン等）の進め方についてというものです。

まず、概要です。

この目的ですが、2020年度に取りまとめた総合知の基本的考え方と戦略的な推進方策、これを広く社会に発信して総合知の活用を推進すること、また、総合知の活用事例の収集、それから、推進方策の改善・強化に向けた情報収集等を行うということを目的にしております。その方法ですが、シンポジウム、ウェビナー、ワークショップ等を組み合わせたキャラバンを実施したいと思います。この中で得られた情報を整理しまして、今後、有識者議員懇談会で御議論いただき、総合知の戦略的な推進方策にも反映をしていきたいというふうに考えております。

次に、進め方です。

図と合わせて御覧いただきたいと思いますが、まず7月から各地の大学等でワークショップを開催したいというふうに考えております。たまたまですが、本日、第1回のワークショップを東北大学で行う予定にしております。10月頃にウェビナーをまた開催したいという予定をしております。それから、来年の1月から2月に大規模なシンポジウムを開催という流れでいきたいと思っております。こうした中で得られた情報については、ポータルサイトのコンテンツとして活用、発信することも考えております。

11月、2月頃には有識者議員懇談会にてこれらの活動の報告を予定しております。

次のページを御覧いただきたいと思います。

それぞれどういった形で開催をするかというイメージを記載しております。まず、ワークショップですが、7月から順次開催ということで、趣旨・目的としては総合知を推進するために中間取りまとめの周知と参加者との意見交換を行うということにしております。参加者については、研究者、研究管理者を想定しております、大学、企業、自治体、学協会等とやっていきたいというふうに思っております。1回当たりの参加人数は30人から40人程度ということで、これを5回から7回、目安としては月1回程度実施をしていきたいというふうに思っております。実施内容については、まずは総合知の解説を内閣府担当者から行いまして、その後、参加者から総合知の活用事例紹介等をいただいて、その後、意見交換という形で進めていきたいと思っております。

次に、ウェビナーです。

趣旨・目的ですが、こちらの方は幅広い層への情報発信ということで、参加者については主に大学等の研究者及び研究管理者、研究管理者の中には大学の経営層であったり管理執行を行っている方々にも参加していただきたいというふうに思っています。参加人数については100人から200人規模で、これはウェブでありますので、このぐらいの規模かなというふうに思っております。

実施内容については、まず基調講演ということでCSTI議員、上山議員はじめお願いをしたいというふうに思っております。総合知の活用事例紹介と続いて、最後にパネルディスカッションという形式で行いたいというふうに思っております。活用事例紹介については大学とかプロジェクトでの取組、二、三名程度をお願いしようかというふうに思っております。パネリストとしてはCSTI議員一、二名、それから、事例の講演者という形でやっていきたいというふうに予定をしております。

次に、総合知のシンポジウム、こちらは来年の1月から2月頃に予定をしたいというふうに思っております。目的ですが、大規模な集客を図って幅広い層への情報発信と意見収集を目的とするということにしたいと思っております。参加者については研究者、研究管理者に加えて企業や自治体関係者、一般市民も対象にしたいというふうに考えております。こちらはリアルと、それから、ウェブのハイブリッドでやりたいというふうに思っておりますが、大きな会場を借りて200人から300人程度でやりたいというふうに思っております。ただ、コロナの状況もございますので、その辺も考えて場合によっては完全オンラインということもあるかなというふうに思っております。

それから、実施内容ですが、こちらのウェビナーと基本的に構成は同じですが、基調講演をCSTI議員からいただきまして、その次に総合知の活用事例の紹介、3名程度ということで大学プロジェクトでの取組に加えて、企業や自治体の取組も少し考えていきたいなというふうに思っております。それから、最後にパネルディスカッションと、こうした形式でいきたいと思っております。

備考ですが、できれば大臣に冒頭挨拶をいただきたいなというふうに思っております。

以上です。

○上山議員 ありがとうございます。

このシンポジウム等を通した総合知の普及活動に関しての皆様方の御要望とか、あるいは御質問等をお受けしたいと思えます。少しずつ個別に話は聞いておりますが、こうした組織的にやるのはこの形が初めてということになります。どなたでも結構ですが、御質問、御要望でもありましたらいかがでしょうか。

では、梶原議員、どうぞよろしく申し上げます。

○梶原議員 どうもありがとうございます。

このキャラバンでは総合知を主題とされていますが、科学技術・イノベーション政策としては、Society 5.0の認知度を高めることが最初の出だしですので、タイトルの付け方や一貫性を検討いただければと思うのですが、何かそうした構想はあるのでしょうか。また、今年、ワークショップ、ウェビナー、総合知シンポジウムとそれぞれ取り組んだ上で、恐らく実施後にアンケートを取るのかもしれませんが、それに基づいて来年も実施するのかどうかなど、成果のわかり方や継続性について、どうお考えになっているのかお伺いできますでしょうか。

○辻原参事官 お答えします。

まず、Society 5.0との関係ということですが、総合知もSociety 5.0の達成のためにということで行っておりますので、その辺の関係性についてはしっかりまた周知をしていきたいというふうに思っております。

結果を今後どういうふうに活用していくかということですが、それぞれの機会にアンケート等も可能な限りやっていきたいというふうに思っております。特に意見交換の中で総合知はこうしたところが分からないみたいな話も出てくるかと思えますので、そういったところを見ながらアンケートも充実させながら、次の展開にも生かせるような形で意見を酌み上げていきたいというふうに思っております。そういったことについてもしっかりとまた再度広報していくという形で、サイクルを回していきたいというふうに思っております。

次年度ですが、最終的には今年度の活動を総合的に勘案して、当然ですが、来年も多分必要だと思いますが、しっかり修正すべきところは修正しながら次年度を目指してやっていきたいというふうに思っております。

○上山議員 よろしいでしょうか。

では、佐藤議員、どうぞよろしくお願いします。

○佐藤議員 ありがとうございます。

私から1点です。この総合知の議論を今までしてきた中で、総合知を実践している事例というものをどうやって作っていくのかということが非常に重要であるという議論をしたと思います。その過程でCSTIが関連しているSIP、あるいはムーンショットの中での具体的プロジェクトを通じて、総合知の実践というものを見ていこうと考えたはずですが、それにより総合知の実装化あるいは効果とか在り方といったものがより具体的になってくるはずだという議論だったと理解しています。そうしたCSTIのSIPとかムーンショットの中で見ていく総合知の在り方あるいは総合知の生かし方というものと、このワークショップ、ウェビナー、シンポジウムという形での啓発活動との関連性というものをある程度意識して、総合知に対する認識を多角的な形で推進していくのが必要だろうと思うのですが、事務方の方でその辺の構造的な進め方についてはどのようにお考えになっていらっしゃるのでしょうか。

○上山議員 辻原参事官、どうぞ。

○辻原参事官 ありがとうございます。

正に場づくりとしてSIPであるとかムーンショットは重要であるということがこの中間取りまとめにも書いてございます。ということで、先ほど事例紹介等というところがウェビナーとかシンポジウムでございましたが、この中でも可能であればそういったムーンショット等の取組についても紹介の対象にしていきたいなというふうに思っております。

次期のSIPについては正に現在立てつけを考えているというところですので、またその辺については次年度以降、状況を見ながらこうした取組の中にも取り込んでいきたいと。お互いに相乗効果が出るような形で進めていきたいというふうに思っております。

○佐藤議員 こうした場というのは、CSTIの活動というものを理解していただく上でも非常に重要な、あるいは有力な場だと思います。総合知が相当意識された形で、CSTIの個別のプロジェクトが進んでいる中、CSTIのプロジェクトの事例も必ず入れていただいて、そうした意味での理解を得ていくということも非常に大事だと思います。これは次年度以降という扱いにさせていただかない方がいいのかなというふうに思いますので、よろしく御検討をお願い

いたします。

○辻原参事官 承知いたしました。

○上山議員 これ次年度以降そうすると言っている訳ではないですよ。

○辻原参事官 今年度もできるものは取り入れてやっていきたいというふうに思っております。

○佐藤議員 ありがとうございます。

○上山議員 S I Pに関して篠原議員はいかがですか。急に振って申し訳ないです。

○篠原議員 別の意見なのですが、個人的な思いもあって2点お願いがあるのですが、一つはこのワークショップ、30人から40人ということで結構限定的な訳ですよ。総合知は色々な学問分野の組合せがあるのですが、やはり科学技術をこれから発展させていくという意味では、一つは今日議論があるような例えば化学とデータ化学の様な、そうしたのもある意味で総合知なのですが、それ以上に新しい技術の社会受容性みたいなことをどう考えていくかというところが私は大事だと思っていて、その様な観点からは是非この30人、40人の中に社会受容性を考えていく上では社会学とか心理学とか経済学、そうした方々がしっかり入っていないとメンバーとして少し足りないと思うので、限られた人数ですが、そうしたことを意識していただけたら有り難いなというのが1点です。

もう一つが今回このワークショップでもウェビナーでもシンポジウムでも総合知の活用事例となっているのですが、活用事例は今、佐藤議員がおっしゃったような観点からS I P等の活用事例を紹介することも大事なのですが、活用事例だと今できていることしか出てこないですよ。そうではなくて、参加している方の中からこんなことができるはずだというふうな活用事例であると、今後の方向感とか可能性とかやるべきことみたいなこともできれば提案いただけたらもっといいのではないかと思います。

少しS I Pの立場で言うと、特に次期S I Pについては社会実装は単に自分たちの作り上げた技術を社会の中に入れていくだけではなく、それが本当に社会にどう受け入れられていくかという観点から総合知の視点は外せませんので、それは次期S I Pの今F Sをやっている中でしっかり議論はしていきたいと思っています。ただ、次期S I Pについて言うと、今年度がF Sなので、多分具体的に紹介できるのは次年度以降かなと思っております。

以上です。

○上山議員 ありがとうございます。今のお話に関連して言うと、総合知の話をずっとやってきたのですが、一番欠けているのは理論化、総合知というも概念の理論化だというふうに感じることが多いです。2016年にNSFがビッグテンプロジェクトの中で打ち出した考え方に

ほぼ大体沿っているのですが、色々幅広い知識のレベルでの融合ということですので、それはここでやっているものを紹介しながらワークショップやウェビナーあるいはシンポジウムの中で、C S T I がやってきたことを紹介しながら我々としての考え方の総合知の理論化を進めていく必要があるかなというふうに個人的には思っているところであります。これは私の個人的な思いであります。

○篠原議員 逆に言うと、今C S T I の弱みは人文科学系の先生が上山議員しかいらっしやなくて、科学技術の議論が中心になってくる訳ですね。その観点からも人文社会科学系の先生方に意識を持っていただいて、そこから新しい提案をどんどん出していただくアプローチが今回のこのキャラバのでは一つの目的といいますか、一つの効果になるのではないかと考えております。

○上山議員 この間、京大の西田さんとか、それから、デジタル・ヒューマニティーズをやっている人たちが来られて、それは今、篠原議員がおっしゃったみたいな人文社会科学的なものをどう取り込んでいくのかということを中心に熱心にやられている方でして、恐らくそうした方たちとのコラボレーションの中でウェブサイトなどをやっていくことになるのだと思います。その時の議論から彼らの方がそれを求めている現状だというふうに理解しています。やはり総合知というものの考え方にはとても共鳴するのだが、C S T I が考えている総合知のバウンダリーというのがどこまでなのだろうかという疑問が結構出てきたという気がいたします。

では、藤井議員、どうぞ。

○藤井議員 ありがとうございます。

私も上山議員のおっしゃることに賛同します。キャラバンをやっていって、色々な方々の話を聞き、C S T I で持っている総合知のイメージと皆さんの御意見を伺いながら、全体像をシェイクしていくことが恐らく重要です。一とおりの後に今年度、来年度も続くのかもしれませんが、やった後のアウトプットとしてどのようなものを考えていくのかについても想定しながら進めていけるといいのではないかと思います。

○上山議員 ありがとうございます。

ほかの先生方、いかがでしょうか、総合知に関しては。

波多野議員、どうぞ。

○波多野議員 今、上山議員、藤井議員がおっしゃったような観点から申しますと、現実的にはワークショップ、ウェビナー、一つのアウトプットとして総合知を使って研究しようとする人の評価といいますか、どうリスペクトされるか、ファンディングにつながるかという、具体

的なイメージがアウトプットとしても必要ではないかと思っています。人文社会系の優秀な方々を認知していただくためにも、リスペクトしてどういうふうに評価していくかというのはやはり国として具体的なイメージというのが中長期的には必要になってくると思っています。

以上です。

○上山議員 よろしいでしょうか。

何かやはりこのアイデアを第6期のときに出したときにはそれほど思わなかったのですが、こうやって公表されて進んでいくと、結局現場の方が受け止めているのは、これにどんなファンディングがつくのかということがかなり如実に感じておられるということで、その意味ではファンディングにつなげていくというのは、このC S T Iのある種のミッションの一つかもしれないなということを感じるようになりました。ですから、このワークショップやウェビナーみたいなところでそんな期待に直面するという気がかなりいたします。

よろしいでしょうか、ほかの先生方。

では、この形で色々と御協力をいただくことになると思いますので、どうぞよろしく願いいたします。

では、辻原参事官、どうもありがとうございました。

啓発活動を進める過程の中では、C S T Iの議員の先生方に様々な形で御協力をお願いするということを改めて申し上げておきたいと思います。どうぞよろしく願いいたします。

どうもありがとうございました。

少し準備があると思いますが、もう一つの公開の議題は先端研究等に関する報告ということです。先週に引き続いての実施となります。今のところ個別の方に声を掛けて来ていただいている状況ですが、今日はクローズドの議論の中でこうしたやり方をどのような政策につなげていくかという議論も是非させていただきたいというふうに思っております。

今回は慶應義塾大学理工学部、畑中美穂准教授にお越しいただきました。タイトルは「計算化学による機能性材料の理解の深化と効率的設計について」です。

では、内閣府からまず説明をお願いします。

○赤池参事官 統合戦略担当参事官の赤池です。

本日は慶應大学理工学部化学科の准教授の畑中美穂先生においでいただきました。計算化学ということなのですが、コンピュータシミュレーションを駆使して科学検証のメカニズムの解明や新しい機能性材料を設計するという研究分野だと聞いております。

畑中先生は慶應義塾大学の博士課程を修了後、京大の福井謙一記念センター、そのほか近畿



大学、また、さきがけ研究員等を歴任されまして、2020年から慶應義塾大学の准教授をされています。あと、英国王立科学会 P C C P P r i z e とか、あと、分子科学会奨励賞、それから、日本化学会の女性化学者奨励賞、それから、ナイスステップな研究者2021等、様々な賞を受賞されている新進気鋭の研究者でいらっしゃいます。

それでは、早速ですが、畑中先生、よろしく願いいたします。

○畑中准教授 只今御紹介にあずかりました慶應義塾大学の畑中と申します。

最初に、皆様に謝罪しなければいけないことがあるのですが、私、資料をお手元で皆様が御覧になると伺ったときに、それは私がZ o o mに接続して、Z o o m上で画面を共有して、私がアニメーションを動かしている姿を皆様がお手元で見るという意味だと勝手に勘違いをしまして、そのつもりでアニメーションがく資料を作ってしまったものを印刷したのがこれなのです。という訳で非常に見にくいものになってしまって、いまだかつて私スライドなしでしゃべったことがないので、5分前にこの事実を知って胸が飛び出ているところなのですが、ページを行き来しますので、お手元を紙で見られている方は先に一枚一枚のスライドに1ページ、2ページとページを振っていただけると、たまにページ番号何番と言いますので、話を通じやすくなるかと思います。

いや、自分の常識は相手の非常識なのだなということを今回非常に学んだのですが、今日の私の最後の結論も自分の常識は相手の非常識なので、相手のことを学ばなければならないというのが最後の結論ですので、少しゆっくりとお話ししていければいいかと思います。

表紙にありますとおり、私は材料科学の分野にありますが、使っているのはシミュレーションだったりA I、あとは量子コンピュータといったコンピュータに向かって化学の研究をしているという研究者です。

どうやってこうした研究者が育つかというと、2ページ目に自己紹介がありますが、最初からコンピュータの前にずっと座り込んでいた訳ではなくて、学部的时候は普通の一般的なフラスコを振って新しい材料を作るという実験のグループにいました。そこで、この後話が出てくるのですが、色々なことがありまして、いや、これからはシミュレーションだと思ひまして、大学院で理論化学というシミュレーションの基になるような分野に移り、そこから博士研究員になるときに理論化学をやっているても多分食いぶちないですよと指導教官に言われまして、それは大変だと思ひて、少し実験屋さんのコラボレーションができるようなシミュレーションの分野に移り、そうこうしているうちに近畿大学で独立した研究者になれたのですが、私立大学で研究を続けるのは結構難しいのです。学校の仕事が多いので。なので、こうしたところで

はたくさん予算を取って、この人は研究させた方がいいと大学に認識させなければならないということを大学の中で教えてもらって、だったらさきがけだと思ひまして、JSTのさきがけ研究員というところに応募しまして、これを機にAIを使うようになりました。

そうこうしていると、奈良先端大でAIを使う人を募集しますという募集が掛かって、奈良先端大に移り、最近、母校の慶應義塾大学に戻ってきたら、慶應義塾大学にIBMの量子コンピュータを優先的に使える権利がありますよというすてきなお話が転がっていたので、もうこれはやるしかないと思って量子コンピュータにも手を伸ばしているという状況です。

こんなふうにはやりものに乗っかっているように見えると思うのですが、3ページ目にありますとおり私の思いはずっと一つです。とにかく化学現象を深く理解したい、そして、よりよい材料を設計したい、そのために使うものが少しずつ変わっているというのが私のスタンスです。今は、実験屋さんが色々な材料を合成したり新しい現象を発見したときに、何でこれがうまくできたのだろうというのを私たちが解明することで、それをヒントに新しい材料の発見につなげていくという実験の人たちとのコラボレーションを通した材料設計をしています。

なぜこのような分野に移ろうと思ったという私の原点を簡単に紹介したいと思います。

5ページを見てください。これが私の大学4年生のときの初めての卒業研究のテーマでした。左側書いてある、化学式はここしか出てこないの少し余り不安に思わずに聞いていただきたいのですが、矢印の左側書いてあるものに還元剤というのを入れると、右側書いてあるアルコールに変換されます。このアルコールは、実は2種類あります。どういう2種類かというのと、この赤で書いてあるOHが紙の手前に出ている構造と奥に出ている構造の2種類です。これはぱっと見は一緒なのですが、右手と左手の関係になっておりまして、手は手のひらから5本の指が生えているという意味では一緒ですが、立体的に重ならないですよ。こうした重ならないものは片方は薬だが、片方が毒だとかということがとてもよくあります。

代表的なのがサリドマイド事件です。片方は薬だったが、もう片方は毒だった。なので、こうしたのを作り分けるというのが非常に大事な技術です。作り分けずに何となく作ってしまうと半分ずつできてしまうのです。半分ずつ作って半分捨てるというのも一つの手なのですが、化学業界では元の原料から生成物に変換される割合が1%上がるだけで1年の収益が1億円以上変わると言われています。なので、50%捨てるなんて論外な訳です。これを劇的に簡単にしたと申しますか、作り分けることを可能にしたのが6ページに青文字で書いてある触媒というものです。私の研究室の先輩方の血と汗と涙の結晶によって、この青で書いてあるものを入れるとOHが手前に向いているものだけを優先的に作れるということがもう既に明らかに

されていたのですが、この反応はなぜか $\text{CHCl}_3$ と書いてある塩素が入っている溶媒の中でしかうまくいかないということが知られていました。私の卒業研究は、この塩素が入っている溶媒を使わずに同じ反応を実現しようというのが私の卒業研究のテーマだった訳です。

何も分かっていない大学4年生の私は7ページのように考えました。教科書によると、溶媒は全体の試薬を溶かすための液体で通常は化学反応に関与しない。なので、これを変えるだけなのだったらとても簡単そうですねと割となめてかかっていた。

8ページに書いてあるように、次々と色々変えてみたのです。変えても変えても変えても、いつまでたってもOHが手前に入っているものと奥に入っているもの、フィフティー・フィフティーで出てきてしまいました。このフラスコの中に入っている薬種は多いのですよ。溶媒というものの以外にも還元剤とか触媒とか色々なものが入っている。色々変えていったのです。でも、何をやってもOHが手前に入っているものと奥に入っているものはフィフティー・フィフティーでできてしまいました。ここまでで約4か月間、延々と実験をし続けています。

よくよく考えてください。今役者は3人しかいません。溶媒、還元剤、触媒と。もし溶媒を10種類、還元剤を10種類、触媒を10種類変えてみたとしても。何回実験しないといけないですかね。10掛ける10掛ける10、1,000回ですよ。こんなのを延々と繰り返していても中々一人でやるには限界があります。

ここで立ち止まって考えてみました。9ページです。何で研究がうまくいかないのでしょうか。もし車が壊れたら、車のボンネットを開けてどこに問題があるか調べますよね。問題があるところを直す訳です。だが、化学反応の場合は反応の途中を見ることが今でもほとんどできません。少しだけ見られるようになってきたのですが、まだまだ難しいです。なので、何が悪さをしているのか分からないので、全ての可能性をしらみ潰しに調べなければなりません。

そんなときに出会ったのが10ページに出てきたコンピュータシミュレーションでした。厳密にはシミュレーションとは少し違うのですが、コンピュータを駆使する先輩が研究室の中におりまして、その先輩の言うところには、左側に書いてあるのが私が担当していた反応の途中での構造だったのですが、この中にただ全体を溶かしているだけだと思っていた溶媒が含まれていたのです。しかも、その溶媒の下のオレンジに書いてあるところなのですが、ここを違う分子に置き換えても似たような構造が取れると。だったら、この似たような構造を作ってしまうえば全体を何で溶かしても変わらなからうと思ひ、ひたすら似たような構造を作ることに心血を注ぎまして、残りの半年間、一生懸命研究したところ、無事OHが手前に入っている構造だけを選択的に合成することができました。

この経験を通して私は11ページのように思いました。やはりやみくもに人海戦術的に試薬を選んでいちや駄目だと。きちんとメカニズムに基づいた設計をすることで初めて効率的に材料というのは開発できるのだなと思ひまして、このコンピュータシミュレーションの世界に入ることになりました。

このコンピュータシミュレーション、取りあえずコンピュータに何か入力してエンターを押したら何でも返ってくるのでしょと最初皆さんは思われるのですが、全くそうではありません。12ページに書いてあるとおり、何でもかんでも計算できる訳ではないのですね。大きく分けると問題は二つあります。まず一つ目は計算できない材料がいっぱいあるということ、もう一つは計算に時間が物すごく掛かるということです。

まず、できないというのはどういう意味かという、入力是可以できるのですが、出てきた答えが科学者として信じられるような精度ではないという意味です。例えばどういうものできないかという、酵素とか生体分子はもちろん、それを模したような比較的小さな、ここの絵に描いてあるような触媒も難しいですし、フラスコの中にたくさんものを入れるような反応のシミュレーションも難しいし、あとは本丸とも言える例えば半導体材料の中の材料として使われる様々なレアメタル材料、あとは人工光合成をするようなための生体分子を模倣したような材料、こうしたものはみんな計算ができませんでした。

13ページ、これはアニメーションだったので、これではしゃべるのは結構難しいのですが、どういう状況だったかという、取りあえず何かしらのシミュレーションはできるのだが、ある程度のところで頭打ちがありそうだな、オレンジ色の曲線に乗って私たちの分野が進んでいて、今、山のトップ辺りにもう来ちゃっているなというのが約10年、15年ぐらい前の私たちの感触でした。

ところが、この10年の間に物すごく色々なことが変わりました。まず、反応経路自動探索なるものが突然登場、次、化学にAIが持ち込まれる、次、化学に量子コンピュータが持ち込まれるというふうに色々な分野が突然新しく始まって、今までもそろそろ成熟期を迎えたかなと思った分野が突然新しく萌芽期を迎えることになります。この三つがやってきたことでどんないいことがあったかという、例えば先ほど計算できないものがたくさんあると言いましたが、15ページにお示ししたとおり、反応経路自動探索というのが出てきたことでフラスコの中の物質を全部コンピュータの中にインプットし、ほっといたら、本当はほっといたらではなくて色々なことをするのですが、色々なことをしたら反応がどんなふうに進んでいくのかを追跡できるようになりました。15ページの黒い四角は実はアニメーションだったので、ど

うやって動いていくかというのが分かるという時代がやってきました。

反応経路自動探索は、北海道大学のWPIという組織の拠点長が自らずっと開発してきていて、その人が作ったプログラムを日本のあちこちの人たちが使って、色々な化学反応のシミュレーションが行われています。これのおかげで化学反応のシミュレーションの技術は、日本が世界で一番できる国になったと自信を持って言えると思います。

もう一つの問題は16ページにあるとおり、レアメタル材料ですとか生体分子を模倣するような材料というのはまだまだできませんでした。その解決策の一つが17ページ、AIです。AIと一言で言うと、何だか少し中身が複雑そうに見えるのですが、やっているコンセプトは結構単純なのです。入力 $x$ と出力 $y$ を用意したら、 $y = f(x)$ の $f$ は作れますよねと。これを作るには $x$ と $y$ のデータが大量にあれば、とにかくにもどうにかして $f$ は作れるのです。AIは作れます。これを材料に置き換えましょう。入力を材料、出力を材料の性能とします。材料の情報を入力することで、その材料がどれぐらいの性能を出せるかを出力できたらとてもうれしいですね。

材料の作り方を入力にしてもいいです。どういう作り方をしたらどういう性能のものができますかというのを予測できたらいいですね。これをするためには大量のデータがあればいいのですが、ここには大きな問題があります。それは日本の色々な化学メーカーで蓄積してきた材料の性質をオールジャパンでみんなと一緒に使おうと言ったところで、誰も「うん」とは言わなかったことです。それはそうですね。会社の中で必死で作ってきた技術を日本のために開示しろと言われたら、「え、競合他社に見られるのですか。そんなの嫌です」という話になる訳です。これは日本に限らずどこの国でも同じ状況になりました。

そこで、AIを使えるのは間違いないので、どのデータを開示して、どのデータは隠した状態で使えるかというデータ開示の問題のための戦略づくりが必須です。

19ページを見てください。私が考える取りあえず最初にできるのはこれだろうと思っている開示システムが19ページです。ここでは、触媒を使う化成品を作るというプロセスを例に置いています。

まず、私たちシミュレーションが得意な人たちが触媒そのものの情報を頑張ってデータベース化します。先ほどの反応経路自動探索というのを使うと、とにかくにもデータはたくさん集められますので、それを開示すると。これを $x$ にするのです。色々な化成品を作っているA社、B社が触媒を使いたい、触媒を頑張って50種類ぐらいは検討できるが、世の中に触媒は数千個、数万個とたくさんある。でも、全部は検討できないが、よさそうなのを発掘したい

など思ったときに、実験データを各社で用意してもらいます。これを  $y$  とか  $u$  とか置きましょう。そうしたら、 $y = f(x)$  を作るのですよ。 $x$  だけは開示、 $y$  と  $u$  は開示させません。そうしたら、A社は  $y = f(x)$  の  $f$  というAIを作ります。B社は  $u = g(x)$  の  $g$  というAIを作ります。 $f$  と  $g$  の中に  $y$  と  $u$  のそれぞれの情報を混ぜる必要はありません。だから、各社が自分たちの実験データを秘密にした状態で、みんなで触媒を早く見つけるためのシステムを作ることができる訳です。

なので、これからはとにもかくにも公開しても大丈夫なデータベースづくりと各社の中にAIを使える人たち、作れる人たちというのを配備していくことが日本の材料化学の開発においてとても大事だと思っています。つまり20ページに示すように育成すべき人材というのは、今まで材料化学の世界だったらひたすら材料のことさえ分かっていたらよかったです、これからはほかにも色々なことが分からないといけないと。一番手っ取り早く私の2号、3号、4号を作れと言われまして、私のキャリアパスはピンクの矢印に沿っているのですよ。最初、材料スタートでした。シミュレーションを学びました。シミュレーション理論を学んでシミュレーションができるようになって、AIを使えるようになって、量子コンピュータも最近少しだけ使えるようになりました。これ10年以上の月日がピンクの矢印には掛かっていますので、こんなのはやっつけられませんか。

日本の中で一番人を増やさなきゃいけないところはこの中のどこかなというと、水色の部分なのです。材料化学とAIをつなげられるような人と。このつながれるような人というのは、材料化学の人とAIを作れる人を同じ部屋に入れておいたら勝手にできるかということ、絶対にできません。もうそれはいっぱい共同研究してきた私が断言できることなのですが、共同研究というのは自分の分野と相手の分野のことをそれぞれ分かっているだけでは進まなくて、相手の分野の専門知識をある程度持って、相手と同じ目線、同じぐらいのレベルで議論できるようになって初めて進んでいくのです。なので、全ての材料化学者にAIの素養を持たせるというのが日本の発展のためにはとても大事なことになるのです。つまり材料もできてAIも作れるという両方のダブルメジャーを持ったπ型の人材の育成というのが不可欠です。

これをいきなり日本全体でやれという話にすると、中々色々角が立ちそうだなと思って、取りあえず自分はこんなふうに頑張っていますというのを21ページに書いたのですが、材料化学の世界でいきなりAIを作れるかと言われると、今までのカリキュラムのままだとやはり少し難しいです。学部教育と研究の間、現場には物すごいギャップがあります。

例えば私の研究室の場合、一般的な理工学部化学科の4年生が研究を始めようと思ったとき

に、学部3年生までで何を学んでいるかという、化学一般とか材料のことはまあまあ学んでいます。半分ぐらい、いや、そんな半分も学んでいないかもしれないですが、前向きに半分ぐらい。シミュレーションの基となる理論のことを量子化学・量子力学と言いますが、これもすぐく頑張っって半分ぐらい。物理とか数学とか統計といういわゆる理工学部一般の知識、少しぐらいは、星一個ぐらいはいいでしょうと。プログラミング、ここから下の世代は高校までで習ってくるようになっていますが、現在の大学生は無の状態なので、私の授業の時間を無理やり少しねん出してねじ込んでいたりとか、機械学習も少し頑張っって私の授業を削っってねじ込んだりとかして少しずつは教えられているのですが、私一人で奮闘したところで色々な人たちに色々なことを教えるというのは限界があります。

なので、どうやって材料化学の人たちに機械学習、AIのことですね。AIを作るのは当たり前前だという状況にさせられるかという、いきなり化学の人たちに教えると言われても中々大変だと思いますので、まずは他学部とか他学科の講義をオンデマンドで配信してもら。要するに情報の人たちが情報学科の1年生に教えている内容を材料化学の授業でも垂れ流させてくださいというのが一番早いか。もう少し踏み込むとダブルメジャー制、化学も専門、情報も専門というキャリアを歩めるようなシステムを大学に導入するというのもう一つ大事なことかなと思います。

まとめますと、計算化学の技術を駆使することで化学現象というのが今日はアニメーションが見られなかったのが可視化された気分になっていないと思いますが、可視化できるようになっておりまして、メカニズムを理解したりたくさん高性能な材料を効率的に設計することが可能になっています。だが、まだまだ何でも計算できる訳ではないので、ハード、スパコンも大事ですし、スパコンの上で動かすためのソフト、計算方法の開発の両方が不可欠です。

さらに、化学人材にも、材料化学の世界にもAI・シミュレーション・量子コンピュータ、今日一言も量子コンピュータの話は出てきていませんが、これも素養が不可欠になってきています。私はコンピュータの前に座って研究をしているタイプなので、AI・シミュレーション・量子コンピュータの事しか分かりませんが、周りを見ていると、ロボットに実験をさせる実験自動化の技術も不可欠です。なので、化学にロボット工学も少し入れないといけないなとも思っています。こうしたふうに伝統的な化学の世界で教えていたことをこれからも教え続けるだけではこうした新しい分野には乗っってなりませんので、人材育成のために教育システムを再考しなければいけないと思っっておりまして、今回がそれを皆さんに考えていただける機会になればいいなと思っしております。

以上です。ありがとうございました。

○上山議員 どうも大変面白く、本当に精力的な話でありありがとうございました。私も少し色々聞きたいことがあります。まずはほかの議員の方々からの御質問をお受けしたいと思います。

いかがでいらっしゃいますか。どなたからでも結構ですが、お手を挙げていただければと思います。よろしいですか。

では、藤井議員、どうぞ。

○藤井議員 どうもありがとうございます。大変面白いお話でした。

私からは二つございます。一つは技術的なことで、今日のお話はどちらかというと順方向の問題を予測するという話だったのですが、逆問題について今どういう状況にあるかを少し教えていただきたい。

それから、シミュレーションとAIのお話が出てきました。量子も使うということなので、コンピュータの前に座って研究なさっているということですが、それらの間のプラットフォームの統合については、今どのような状況にあるのかについてももし御存じでしたら教えていただきたいと思います。

○畑中准教授 まず、一つ目の逆問題なのですが、逆問題というのはこうした材料が欲しいです。そのためには何を作ったらいいですかという、性質から適切な材料を予測するのというのを逆問題と言います。現状物すごく難しいです。できたケースは本当に数例しかないというのが現状です。

なので、まずは最初の段階としては、今まで例えば日本は触媒がお家芸だったのですよ。任全国、世界中に触媒を作っている人たちがいて、たくさん論文が出ているのですが、一個一個の触媒は作るのがすごく難しいのですね。作った触媒たちの中で論文としては出ているものの、販売にたどり着いているものは本当に少ないのですよ。なので、販売にたどり着いていないものの中にいいものがあっても、違うグループで同じ触媒を作れるかと言われたら、作るのに1か月掛かるのですよねとなったら検討に乗ってこないのですよね。そうした埋もれているものから候補としてよさそうなものというのがピックアップされてくれば、実験しようというモチベーションになると思うので、まずはそうした埋もれているものの発掘というのが1段階目かなと思っています。逆問題はもうしばらくの研究が必要そうです。

プラットフォームについてなのですが、今の一番の日本のスパコンは富岳ですが、富岳だけではなくて色々な大学にもう少し小型のスパコンというのはたくさんあります。全国共同利用計算機というのですが、北大、東大、東北大にもあるかな、京大とか色々ありまして、私も長



らく京大のを使っているのですが、そうしたのが裾野を広く色々な人に使えるようにしてくれているので、そうした意味ではかなり富岳一極集中にしていたら特定の人しか使えないスパコンが、少し性能を落としたものを色々な人に使えるようにしたことでシミュレーションの裾野がとても広がってよかったと思っています。

これはこれからも続けていただきたいなと思っているのですが、あと、ソフトウェアのプラットフォームという意味では結構何とも言えないところで、例えばAIの中身を作るのには皆さんほとんど無料のプラットフォームを使っているのですが、余りお金をそこに投入ということにはならないのですが、量子コンピュータは少し考えないといけないなというところがありまして、今までのコンピュータはソフトウェアを作ったらどのコンピュータの上でも同じように動かせるような仕組みづくりがうまくできていたのですよ。だが、量子コンピュータはそもそもハードウェアが出来たてなので、IBMのコンピュータを動かすためにはこうしたソフトを作らなきゃいけない。グーグルの量子コンピュータを作るためにはこうしたソフトを作らなきゃいけないという状況になっちゃっているんで、ソフト側の人間からすると、すごい大変なことになっているんですね。IBMの今まで動かしたものをグーグルで動かそうと思っても動かないみたいな状況になっているので、ここは何か統合できるシステムがあったらもう少し色々なことが進むのになとは思っていますが、まだです。

○藤井議員 研究者の立場からすると、その辺りはまだ慣れていないということでしょうかね。ありがとうございます。

○上山議員 今手が挙がっているのは梶田議員ですよ。梶田議員、どうですか。

○梶田議員 どうもありがとうございました。

すばらしいと思って聞いていたのですが、13ページで研究分野の成長という絵が描いてありまして、自分の殻に閉じ籠もらないで次々と新たなテクノロジーにきちんと挑戦していつているその姿がすばらしいなと思いました。恐らくこのようなことを色々な研究者がしっかりとやっていくということが日本の今後の研究の発展という観点で重要になるのではないかと思います。先生のように新しい技術に飛び込んでいく、それにはどういうことが一番重要なのか、もちろん個人的な資質は大きいと思うのですが、それに加えてどういうものが必要だと思いますか。

○畑中准教授 これ何かとても偉そうに三つ書いてあるのですが、意外と外部的要因が大きかったのです。特に外部的要因が大きかったのはAIなのですが、もともとAIはとても昔からあったのですが、全然勉強したことがなかったのです。あるとき、あるときというのはオバマ

政権時代に多分半導体もろもろの焦りがとても大きかったなと思うのですが、これからは材料の世界にAIを持ち込まなければならないという、オバマ大統領が立ち上げたプロジェクトがありまして、それでアメリカ出突然始まったのですね。一番化学の中でAIとかと言われてきたときに対応できそうなのはシミュレーションの人たちだろうと。どう考えてもコンピュータの前に座っている人だろうという訳で、アメリカでいきなり始まったのですよ。

それを見て、多分日本のこうした場でも大変だということになったと思われるのですね。それでさきがけという若い研究者にお金を配るシステムの中に、今化学とか物理の世界でAIを使っている人はそんなにいないが、その分野でさきがけの研究員を募集しますというのが出て、初めてそこでそうした分野があるのだと知ってやってみようと思ったのですよ。なので、私が自らAIを取ってきたというよりは政治的な色々な思惑の中でお金がぶら下がっているのを見て、要するにエンジンがぶら下がっていたので取りに行ってみたら、色々なことができるようになったというのが実情なので、割と私は政策に乗つけられたなと自分では思っているのですが、このさきがけは本当に何もできない状態からスタートしたメンバーが多かったので、とんでもなかったのですが、さきがけが終わってもう少ししたぐらいからみんな色々できるようになって、卒業生たちは結構色々できることが増えたのですね。

なので、もう目先の成果という意味では恐ろしい状況が繰り広げられたとしても、行く行く必要になると思うものはどんどんやれそうな人がいなくてもさきがけというのをを出してみると、飛びついてくる若い人は結構出ると思いますので、そこも戦略に使っていただけるととてもうれしいです。

○上山議員 ありがとうございます。

次は菅議員から、それから佐藤議員ですね。菅議員、どうぞ。

○菅議員 ありがとうございます。

非常にクリアなプレゼンテーションをありがとうございました。二つ少し質問させてください。最初に何でも計算できるようになったのかというスライドのところですが、問題2に計算に時間が掛かり過ぎると。これ私などは生体関連の物質をやっていて、シミュレーションを共同研究で組んでやっている。確かに物とても時間が掛かるのですね。数か月とか普通に掛かって、こんなのだったら実験した方が早いのではないかと思うぐらいのレベルになっているのですよ。この時間が掛かり過ぎるという問題はもちろんコンピュータパワーの問題も一つあるのですが、例えば生態系ではなくて材料の分野に目を落としたときは、この時間の掛かり過ぎという問題はもうなくなるのですかね。

○畑中准教授 いえいえ。まだまだです。

○菅議員 やはり時間は掛かる訳ですか。その時間が掛かるのがどれくらい向上すればもつと実質的にどンドンいいプロダクトが出てくるレベルになっていくのかなというのが私の一つ目の質問です。

二つ目の質問は、研究と学部教育のギャップというところで、こちらの方が私はMITで学位を取ったのですが、MITのカリキュラムはもう30年前ぐらいからやはりインテグレートしていく、要は違う分野の講義とインテグレートしていくというのは非常に戦略的にやっている部分があって、日本は非常に専門家を育てるためのカリキュラムになっている場合が非常に多く、中々インテグレートするようなカリキュラムが出来上がっていないと思うのですね。それをした方がいいというサジェスションだと思うのですが、この辺は慶應の中だと割とうまくインテグレートできるような感じのカリキュラムを作れそうなのですかね。これは中々東大でやろうと思うと難しい部分がたくさんあって、自分たちの学科のプログラムのこれだけは取らないといけないというルールがあったりして、中々インテグレートしていくというふうにならないのですが、その辺のことを少し教えていただければと思います。

以上です。よろしくをお願いします。

○畑中准教授 まず、一つ目の計算に時間が掛かる問題なのですが、生体分子に限らず例えば12ページの左側の絵に描いてある300原子ぐらいの触媒でも私これは2年どころかもう少し頑張ってもやらなきゃいけなかったぐらい掛かっていますので、まだまだ掛かります。一般的に構造が動かない材料は数か月ぐらいで計算を何とかできます。構造がとても動くものは今でも際限なく時間が掛かります。いつ終わるかはやってみないと分からないというのが実情です。なので、構造が動く、要するに化学反応が伴うような材料の皆さんには、メカニズムは調べますが、実験と同じタイムスケールではできないので、しばらく待ってくださいと。材料の次の設計につながられるようなヒントが出てくるまでは年単位で待たないといけないぐらいの覚悟をしてくださいというふうにお話をしています。

なので、手っ取り早く次はどういう触媒をと言われたら、もうメカニズムを調べることは捨ててブラックボックスのAIを作った方が早いかもしれないというふうに思っています。それがまず1点目です。

でも、反応経路自動探索はできて、これはとても劇的に短縮されたのは一応強調だけさせていただきますのですが、まだまだやることはいっぱいです。

もう一つのカリキュラムの方なのですが、慶應は私立大学なので、割と色々なことがフレキ

シブルにできそうな気もしないでもないのですが、まだまだ余りインテグレートできるような状態にはなっておりませんで、現在、塾長が理工学部出身といたしますか、理工学部の伊藤公平教授が塾長を務めていますので、カリキュラムにいきなり手を加えられなくても、学部1年生とか2年生とかの情報ではない子たちがAIを学べるような学生たちが作った私塾みたいなのが学校の中にあったり、あと、量子コンピュータは少しそもそも参入にすごく激しいハードルがあるので、いきなりひょろっと1年生が入ってきたりははしないのですが、入ってきてもいいような感じのシステムはちょこちょこ作っているものの、カリキュラムにいきなり手を入れるみたいなどころまではまだできていないですね。でも、必要だと思っている人はいっぱいいるので、何とか声を少しずつ大きく集めていきたいと思っています。

○上山議員 では、次は佐藤議員、どうぞ。

○佐藤議員 ありがとうございます。

畑中先生、本当にすばらしい研究をされているので感服いたしました。私からは2点ございます。1点目は先生のされておられる研究の方向感あるいはその中身等について世界レベルとの比較の問題です。私の理解では材料研究の中でも中国とかアメリカは既にAIあるいは量子も相当活用していると漏れ聞いておりますが、先生から御覧になって、こうしたAIや量子を使った材料化学の分野で、日本はどのような立ち位置にいるのかということを少し教えていただきたいと思います。

といいますのは、極端に言えば材料化学全体が量子技術の優劣でゲームが決まってしまうということさえあり得るような気もしているからです。一方で量子コンピュータの開発の現状をみると、アメリカなどはゲート方式と違って誤り耐性のあるコンピュータも相当研究していますが、日本はいわゆるNISQのような若干誤りがあってもいいという量子コンピュータで様々な実装化にトライしようとしています。材料化学のような分野だと最終的にはそうした作戦では勝てない可能性もあって、十数年あるいは数十年先には、全く優位性が確保されなくなっているというリスクもあるように、感じています。今の研究の立ち位置が世界レベルでどうなのかということの先生の御見識を伺いたいのが1点です。

それから2点目は、先ほど人材育成の重要性をおっしゃっておられて、今も大学のカリキュラムの話をお話しされていましたが、私は科学技術の人材育成全般で見ると、大学からスタートするのでは遅いのではないかと思います。すなわち中高等教育から、場合によってはもう少し下から始めないと世界では勝てないのではないかと、危惧しています。先生のお立場から御覧になって大学のカリキュラムだけではなくて、中高等教育をどうすべきかについて、先生が

標榜されておられるような人材教育の観点から何か御示唆があれば伺いたいと思います。

以上、2点です。

○畑中准教授 一つ目のA Iと量子コンピュータの分野の世界での立ち位置なのですが、A IはA Iの賢さ以上にA Iが読み込めるデータの多さがゲームを決めるので、とにかくデータをいっぱい持っている人勝ちなのです。そうした意味では、材料分野に限って言うと、情報の専門家の人たちが想定するようなビッグデータを集め切れている分野は世界中のどこを見てもまだまだ余りありません。データの数は情報の人から見たら少ないと言われるような中で何とかやっているというのが世界中のどこの国でも同じです。

そのゲームをひっくり返すためにはシミュレーションがどんどん自動化していけば何とかなのですが、材料の実験データがたくさんないといけないのです。これを人海戦術でやろうにも、人が材料を作るとどうしてもデータの人依存性が出てしまいます。Aさんが作ったらこうしたデータだったが、Bさんが作ったら違いましたというデータを混ぜたらろくでもないA Iしかできないので、実験の自動化、要するにロボットですね。実験ロボットを作ることがゲームチェンジの一番のポイントになると。A Iよりもそっちの方が絶対に大事になっている。

実験ロボットというのは、あるところにはあるのです。例えばアメリカでも製薬会社ととも、どこの製薬会社は少し忘れちゃいましたが、プリンストン大学とか実験用のロボットを製薬会社が提供してくれたのだと分かるようなものでたくさん集めてきて、A Iを作っているのをやられているところはまあまああるのですが、まだどういう実験にでも対応できるロボットがあるかと言われると、まだまだそうじゃありません。

実験ロボットの考え方は二つあって、一つはファクトリーオートメーションという特定の実験作業を自動化する、特定の作業しかできないロボットを作るとというのが一つで、それが産総研にあるまほろがそれに当たるのですが、もう一つは名前がないのですよね。色々な実験ができる、要するに人間がやっている実験を模倣するようなロボット、だから、違う作業を少ししたいと思ったときにそうしたのにも対応できるようなフレキシブルなロボットというのが2種類あるのですが、1種類目のファクトリーオートメーションは特定のデータは集められても、少し実験状況を変えようと思ったら、今まで液体だったものがどろどろになって粉になってしまったとなったときにロボットは対応できないのです。なので、工場の現場では向いているのですが、化学研究の現場では余り向いていなくて、なので人間を模倣できるロボットを作るとの方がいいのですが、これはまだ世界中でうまくいっていると断言できるところはないので、一生懸命投資した方がいい分野だろうなと思っています。



先生がやってこられた共同利用データベース、これはどこの場所でどういう形でやってこられているのか、それは組織的にやるところはどこがあるべきなのか。例えばNIMSみたいなところはやっておられますが、それをもう少しナショナルベースで例えば共同利用機関とかがありますよね。あそこが今どんな形で活動されているかというのは問題点として持っているのですが、そうした共同的なデータベースの在り方に関して御経験から少し感想をいただきたいということと、それから、北大のWPIにおられた訳ですよ。

○畑中准教授 私はWPIのメンバーではないです。

○上山議員 そうですか、そうした拠点でもそうしたことがあるのかという疑問があって、その点で結構です。

○畑中准教授 データベースは長くずっと残っていくことが大事なので、研究室で作りました。研究室で持って何か研究室のホームページに上げていますみたいなのでは全然不十分なので、どこかずっと置いておける場所というのが大事なのですよ。NIMSみたいなところがそうした色々なところから出てきたデータベースをずっと管理してくれるようなシステムというの作ってくれたら本当は一番いいのですが、中々そこまでMATデータベースというマテリアルデータベースという色々なデータベースにアクセスしやすい統合的なものはあるのですが、その一個一個のデータを別にNIMSが管理してくれている訳ではないのですね。

今一番簡単なのはやはり無料のものはみんな一番使いやすいですよ。例えばギットハブという色々な人がプログラムとかデータを上げている無料の国際的なプラットフォームがあるのですが、そうしたところに取りあえず上げてしまえば、ギットハブがいきなり潰れることはないだろうとみんな信じているので、結局そうしたところに流れてしまっているというのが現状ですかね。

あと、WPIも一生懸命データを作っていますが、データベースをどうやってアップロードするのかはまだ余り決め切れていないと思われま。

○上山議員 ありがとうございます。共同利用研究機関の問題は恐らくかなり大きな政策 이슈になるだろうという気がして少しお伺いをしました。

もう時間がありませんが、篠原議員、どうぞ。

○篠原議員 時間もないのでお答えいただかなくて結構なのですが、私はこうした議論を聞いていて心配なのは、これからAIに対する授業みたいなカリキュラムをもっと増やすべきだという議論があるのですが、AIという言葉が非常に曖昧でして、多分いわゆるハミルトニアンとか物理のこともしっかり理解した上でやらなければいけないAIもあれば、単にパイソンを

知っていれば適当にできるみたいな話があるではないですか。その辺は松竹梅だけではなくて、色々な種類もあると思うのですよね。

だから、そうした観点では先生がこうしたお話をなさるときに特に化学の分野ではどういうA Iが大事なのだということを伝えていただかないと、何となく押しなべてA I教育が大事だよねという非常に訳の分からないことになりそうなので、是非そうしたところをこれから研究していただけますか。

○畑中准教授 松竹梅だったら梅です。とても気合の入ったA Iを作ることが偉いのではなくて、とにかくA Iに使えるデータを集められることが大事なのですね。そう思うと、A Iのためには何が必要なのかということのを少しでも理解していれば、今までの化学だと例えば条件がたくさんあります。温度をまずゼロ度から100度まで振りました。一番よかったのが50度だったので、50度に固定して次の条件を振りましたみたいなやり方をしているのですが、A Iはそうしたデータの集め方をしてしまうと、A Iに入れても余り賢いものがないのですね。どういうデータを集めたらいいのかというのをきちんと理解するというのが一番大事なので、A Iそのものの知識はそんなになくてもいいから、そのために何が必要なのかという一般教養でいいから入れる、全員がそれを理解するというのが大事だと思います。

○上山議員 ありがとうございます。この辺りで終了とさせていただきます。畑中先生、どうもありがとうございました。

本日の議論は、この政策課題の議論に活用していきたいと思っております。

午前11時00分 閉会