

AI ロボット駆動科学 シンポジウム 2023 実施レポート



AI ロボット駆動科学イニシアティブ設立準備事務局編集

目次

◆開催概要	3
◆第1部：来賓挨拶	3
◆第1部：講演	5
一 高橋恒一氏	5
一 長藤圭介氏	8
一 原田香奈子氏	9
一 牛久祥孝氏	11
一 高橋恒一氏	12
◆第1部：パネル討論	13
一 導入	13
一 テーマ1	14
一 テーマ2	16
一 テーマ3	17
◆第2部：ポスターセッション	20
◆第2部：講演	23
一 セッション概要：尾崎遼氏.....	23
一 飯田正仁氏	24
一 清水亮太氏	25
一 二階堂 愛氏	27
一 吉野幸一郎氏	30
一 竹内一郎氏	31
一 久木田水生氏	33
一 馬場雪乃氏	35
一 総括：倉持隆雄氏	37
◆第2部：閉会挨拶	38

◆開催概要

■科学研究プロセスを再定義する『AI ロボット駆動科学』

『AI ロボット駆動科学シンポジウム 2023(<https://www.ai-robot-science-symposium2023.jp/>)』が2023年7月6日に東京・有楽町にある国際フォーラムにて開催された。主催はAI ロボット駆動科学イニシアティブ設立準備事務局で、共催は以下の4プロジェクト。

- ・JST 未来社会創造事業 『ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速』（高橋恒一代表）
- ・同『マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築』（長藤圭介代表）
- ・JST ムーンショット型研究開発事業 『人とAIロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓』（原田香奈子PM）
- ・同『人と融和して知の創造・越境をするAIロボット』（牛久祥孝PM）。

『AI ロボット駆動科学』とは、AIと実験ロボットを利用して科学研究プロセスを再定義しようとする新しい科学的方法論。今回のシンポジウムは2部構成で実施され、第一部では4プロジェクトの代表が一同に会して最新のトピックスや動向を紹介し、外部の識者を交えてパネルディスカッションも行われた。第二部では若手研究者による研究紹介やポスターセッションが行われた。シンポジウムには約180名が来場し、会場は超満員となった。

◆第1部：来賓挨拶

■異なるプロジェクトのリーダーが集まって開催

第一部は『AI ロボット駆動科学分野のイニシアティブに向けて』。主催者の一人である高橋恒一氏による挨拶に続き、まず来賓挨拶が行われた。はじめに文部科学省 大臣官房審議官(科学技術・学術政策局担当)の清浦隆氏は「発起人の先生方は異なるグループでそれぞれプロジェクトを率いている。その皆様が各々の研究を超えたパッションを持ち寄られ、意気投合して今回のシンポジウムに至っていると聞いた」と述べた。



文部科学省 大臣官房審議官(科学技術・学術政策局担当) 清浦隆氏

そして「非常に幅広い分野、医療やバイオ、プロセス、材料、ロボットなど広い関係者が集まって意見交換されるということで期待している。我々としてもエマージングなテクノロジーを捉えてどのように施策に反映させていくかは重要。特に技術進展が速くインパクトの幅と程度が大きいテーマには政府としても高い関心を持っている。AIは世界中で研究開発競争が加速している。『AI ロボット駆動科学』は広い分野で研究のあり方そのものにパラダイムシフトをもたらす可能性がある。このシンポジウムを契機として、あらゆる研究者が連携して新しい分野を作り出す潮流をリードするムーブメント

につながるものになれば」と語った。

そして「今日のシンポジウムは一般公開で、国民の関心も高い。産業界、研究機関、政府関係者など様々な方も来場していると聞く。研究ステージのあらゆる段階で社会との対話による透明性と信頼性の確保が重要。その観点からも意義深い」と述べた。

次にトヨタ自動車 元代表取締役社長の渡辺捷昭氏が登壇。「4人が自主的にこのシンポジウムを勝手に開催されたのは素晴らしい。また国も激励の挨拶をして『放っておかない』と言ったことは素晴らしい。AI ロボット駆動科学は国を挙げてやらないといけない。よく科学技術立国を復活させないといけないと言われる。つまり衰退しているということ。中国は素晴らしい進展をしている。自動車もその流れの一つ。BYDは200万台近い電気自動車を生産している。科学技術立国復活のために、AI ロボットは基盤技術。やらないといけない必須の項目だ」と話を始めた。



トヨタ自動車 元代表取締役社長
渡辺捷昭氏

そして科学技術の研究者たちをお願いしたいことが3つあると述べた。「まず一つ目は夢を実現してほしい。」「大きな夢を持ってほしい。ただし現在の身の丈、実力はどこにあるかも承知してほしい。現実と夢のギャップが大きければ大きいほど挑戦しがいがある。夢の実現のためにどういう勉強をしないとイケないのか。それに向かって進んでいくことが重要。AI ロボットは加速するための大きな道具で、世界中で競争が始まっている。是非ここにいる皆さんと議論を戦わせながら、どうやったら速くできるのか、いろんなことを考えながら是非進めて頂きたい」と語った。

2番目は「暗黙知と形式知のスパイラルアップをしてほしい。」「人の持つ勘・コツ・経験は重要。だがその伝授には時間がかかるし非効率的なところもある。勘・コツ・経験を管理技術、標準化、作業手順、そしてロボット化に置き換えられたら速度が上がるし効率的にもなる。暗黙知のレベルを上げながら管理技術を高めていく。AIを駆使すればロボットが成長するかもしれない世界に入ってきた。つまり暗黙知と形式知のスパイラルアップが科学技術を進化させる大きな手法となる」と続けた。

3つ目は「4位一体活動」。経営は、マーケティング、技術開発、開発したものを製造する生産・製造技術、そして販売とサービス、この一連の4つが一体化して事業が成り立つ。「技術を進化させながら他の技術と連携して一体となって統合することがとても重要。4人のプロジェクトを訪問した。大変素晴らしい技術を持っているし大志を持っている。一体化して活動すればかなりのものができるだろう。だが足りない。(会場の)皆さんが参画してチームとして活動できるか。ラグビーでいえば『ワンフォーオール、オールフォーワン』。チーム活動が、さらに大きな成果を出せるかどうかの鍵を握っている。チーム活動を進化させ一体となって進めてほしい」と語った。

そして「今までの常識が非常識になる可能性があるのがAI。新しい常識がこのシンポジウムから生まれることを期待している。変化に柔軟に迅速に対応できるものが生き残る。そうしなければ科学技術立国・日本の成果は生まれてこない。世界と一緒にあって世界をリードする国であってほしい。大いに期待している」と挨拶を締めくくった。

内閣府 科学技術・イノベーション推進事務局 審議官の坂本修一氏はサイバーとフィジカルを融合させて新たな価値を生む『Society5.0』について語り、「変化はまず科学技術研究の場から起こる。様々な試行錯誤が加速していく。内閣府では『ムーンショット』を進めている。その設計思想そのものが試行錯誤の極限を構想している。未来社会をいかに我々の手で掴みとっていくか。政策でもサポートしていきたい」と述べた。



内閣府 科学技術・イノベーション
推進事務局 審議官 坂本修一氏

そして「AI ロボット駆動のためにもデータを構造化し統合していくレイヤーが極めて重要。そのなかで新たな知を作り上げ、知的作業や価値創造のパラダイムが変わっていく。本日、関連するプロジェクトの方々が集まったこの機会に、異なるアプローチ、異なる視点の人たちでインタラクションすることで新しいリスクにも正面から取り組み、果敢に挑む人材を増やすシステム作りを議論していく第一歩となることを祈念する」と語った。

◆第1部：講演

— 高橋恒一氏

■AI ロボット駆動科学の世界的潮流

続けてシンポジウムオーガナイザーでもある4人から講演が行われた。まず、JST 未来社会創造事業『ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速』代表の高橋恒一氏が、『AI ロボット駆動科学』とは何かという話から始めた。

『AI ロボット駆動科学』とは「AI とロボットを用いて実験科学を構成する様々なプロセスを一つのサイクルとして統合し、力強く加速することを目論む新しい方法論」だ。AI とロボットを、実験科学を構成し、様々なプロセスを統合する道具として用いることで科学の加速を目指す。



JST 未来社会創造事業「ロボティック
バイオロジーによる生命科学の加速」
代表 高橋恒一氏

高橋氏は実例をいくつか示した。リバプール大学のアンドリュー・クーパー (Andrew Cooper) 教授らは 2020 年に自律ロボットが 700 実験を 8 日間で実行し、人間の介在なしで新たな効率の良い光触媒を発見したと発表している。これは人間の 1000 倍の速度で実験を遂行したことに相当するという。

高橋氏らも高橋政代氏と共同で再生医療を対象として、AI ロボットとベイズ最適化手法を使って iPS 細胞分化誘導条件を人の介入なしで自律的に発見させることに成功している。

この分野の先駆者はスウェーデン・チャルマース工科大のロス・キング (Ross King) 氏で、機能ゲノミクスの研究を行うロボット科学者『Adam』、薬剤スクリーニングを行う『Eve』と名付けられたロボットを開発して成果をあげている。

また、基盤モデルをめぐる動きが激しくなっており、アルゴンヌ国立研究所、Intel、HPE は一兆パラメータを目標とする科学用大規模言語モデル『Aurora genAI』を開発すると 2023 年 5 月に発表している。ただしこれは、ロボット実験は統合されていないので、その部分で、まだ日本の勝ち目もあるという。いずれにしてもこのような AI ロボット駆動科学の動きは世界の潮流となっている。

■AI ロボット駆動科学による変革と課題

ではなぜ AI ロボット駆動科学への流れは必然なのか。ソニーの北野宏明氏や前述のロス・キング氏、高橋恒一氏らは 2020 年 2 月にアラン・チューリング研究所で行われた日米英ワークショップで『ノーベル=チューリングチャレンジ』を設定した。これは「2050 年までに自律的にノーベル賞級の発見を行う AI を開発する」というもの。参加機関には OpenAI や Google、DeepMind なども含まれている。

DeepMind のデミス・ハサビス (Demis Hassabis) 氏は「数学の活用が物理の謎を解く鍵だったように、AI の利用が生命の謎を解く鍵になるだろう」と語っている。どういうことか。20 世紀前半までのサイエンスのあり方は、明確な境界条件を設定して数学的な処理をして自然現象の系の状態を少数の変数で代表させる手法が取られていた。だが 20 世紀後半になって積み残しが出てきた。つまり物事を単純化して理解するアプローチでは歯が立たないものが積み残された。複雑なものを複雑なまま捉えるやり方も必要だ。

従来の科学は複雑なシステムに対して仮説を立て、必要最小限の手数でその仮説を立証することが良しとされていた。それに対してこれからは、複雑な世界を複雑なまま捉えるために多様なデータを大量に取る必要がある。また近代科学は分野が細分化していったが、今後は逆に総合知的アプローチも必要になる。

「こういったアプローチを現実のものにしようと思うと、具体的にいくつか乗り越えないといけない課題がある」と高橋氏は指摘した。一つはプロセスの断絶だ。実験、データ処理、仮説構築などの研究プロセス間の接続が必要になる。ここに AI とロボットを使って研究プロセスを統合して一つのサイクルとして加速させる。

2つ目は分野の断絶だ。異なる分野間の知識の連携が不十分だ。これに対しては AI 基盤モデルで知識を集約・統合する。

3つ目の課題は人間の能力の限界だ。人間の手技や認知能力には限界がある。それに対してロボットと AI を活用してこれまでよりも広く深い科学の実現を目指す。

■細分化した学問分野を統合して『One Science』の実現を目指す

実験科学は実験を行うとデータが出てくる。データから法則性を発見する帰納プロセスを経て、それを既知の領域知識と接する過程を経て科学的知識の候補となるような仮説命題を抽出し、仮説が本当なのか検証するためにまた実験を行う。このようなループがある。これをバラバラにやるのではなく一つのものとして統合していく。

まだ様々な学問を統合した総合知が求められている状況に対して、基盤モデルのようなものが役に立つ可能性は非常に大きいと考えられる。『ChatGPT』のような大規模言語モデルが、人類がこれまで書きためた言語情報の総体を表すようなものになりつつあるように、人類の科学的知識の総体を体現するような『科学基盤モデル』も作れるはず。つまり細分化した学問分野を統合して『One Science』の実現を目指す。

AI ロボット駆動によって、人の手技では手が届かない超絶技巧の実験も現実になる。超並列で大量のデータを取ることもできるようになる。それは人類知のフロンティア拡大にも繋がる。この新しいアプローチは従来のパラダイム、すなわち『経験記述・実験』、『理論』、『計算』、『データ』に継ぐ、『第5のアプローチ』として追求していくべき価値があると考えていると高橋氏は述べた。

そして『AI ロボット駆動科学』は、ロボットによる実験プロセスの高度化と自動化、AI による仮説空間の高速探索の二つを組み合わせることで、様々な研究プロセスを一つの連続したサイクルとして統合するというコンセプトだとまとめた。

■実験をモノのプログラミングとして再定義するロボティックバイオロジー

今回のシンポジウムを主催した4プロジェクトは、同じようなコンセプトで具体的な課題に取り組んできた。JST 未来社会創造事業から二課題、JST ムーンショット型研究開発事業から2課題だ。JST 未来社会創造事業のほうは社会課題の解決という文脈でアプリケーションに近い部分を担当している。JST ムーンショット型研究開発事業のほうは次世代型の実験ロボットや基盤モデル開発などに挑んでいる。

2030 年代の社会を考えるとさまざまな危機がありグローバルな経済活動が進んでいる。生命科学はさまざまな課題を解決するポテンシャルを持っているという。再生医療やゲノム医療、バイオ技術の活用などだ。「2

0世紀のワトソクリック以来、生命科学はどちらかという基礎科学的性質が強かったが、21世紀では社会の基盤技術として花開きつつある」と高橋氏は述べた。

高橋氏自身が進める『ロボティックバイオロジー』では、実験というものを『モノのプログラミング』として再定義しようとしている。生命科学の研究現場では、博士号を持っているような高度人材がピペットを持って単純作業を行っている。それを、パソコンのなかで実験プログラムを組み立ててクラウドに投げると、ロボットが実験を行って結果が帰ってくるという世界の実現を目指す。そうするとデジタル情報のかたちで実験プロトコルと結果が揃ったかたちで手元に入るので、これを即座にインターネット上で世界中と共有することも可能になる。第三者が再現することもできるし、プロトコルを改良することでサイエンスを前に進めることもできる。

現在、ロボティック・バイオロジー・プロトタイプング・ラボを理研神戸事業所 融合連携イノベーション推進棟のなかに建設し、部分的に稼働を開始している段階。高橋政代氏らと共同研究を進めており、iPS細胞の培養・分化誘導に成功している。

高橋氏は最後に「AI ロボット駆動はサイエンスの根本部分を変革できる。生命は非常に複雑かつ多階層。全体像を理解しないことには本当の意味での生命現象理解にはつながらない。そのために例えばマルチモーダルの基盤モデルなどを使って本当の意味での生命の統一モデルを作っていくことに取り組んでいきたい」と述べた。



プレスリリース解説 vol.12 「再生医療用細胞レシピをロボットと AI が自律的に試行錯誤 - ロボット・AI・人間の協働は新しいステージへ」
<https://www.youtube.com/watch?v=AAey9PeX2wo>

一 長藤圭介氏

■暗黙知を形式知にして AI やロボットを活用

次に JST 未来社会創造事業『マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築』代表の長藤圭介氏が登壇した。長藤氏は最初に 10 の 24 乗、10 の 60 乗という二つの数字を示し、「これは何の数か」と問いかけた。10 の 24 乗は宇宙の星の数で、10 の 60 乗は材料の種類だという。とにかく途方もない数だ。人はその中から新しい材料を作り続けてきた。

日本は材料科学分野で世界を牽引してきた。しかし、世界の開発速度は速まっている。リチウムイオン電池を最初に作ったのは日本だ。だが EV 用の電池のシェアは五年間で半分以下になった。海外勢が伸びる間に開発サイクルを早めないといけない。



JST 未来社会創造事業「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」
 代表 長藤圭介氏

日本の技術開発の課題の一つに「暗黙知に頼りすぎている」ということがあるという。長藤氏は「形式知にシフトし、AI やロボットを利用するのが遅れている」と指摘し、人に依存した仮説駆動型で PDCA (Plan、Do、Check、Action) を回す研究は四年生や修士は行うべきだが、みんながやっているのはまずいと述べた。

材料に関しては、つくる、はかる、ためる、それぞれの AI ロボットが発展している。それをうまく取り込んで、人が暗黙知を高めて形式知にする技術をうまく使わなければならない。人間はデータを見て、仮説を立てて、またデータ駆動する。これを『ハイブリッド型研究』と呼んでおり「PDCA ではなく OODA (Observe、Orient、Decide、Act) ループで進めるべきだと考えている」と語った。

長藤氏は具体的な取り組みを、動画を交えて紹介した。半導体プロセスを用いた無機材料の自律探索には数年前に成功しており、それをたたき台として活用することに取り組んでいる。自動実験だけではなく、人を介さずに AI が考えてプランニングも行う。たとえば固体電池の材料の開発を行っている。

長藤氏は「身の回りのものは全て材料でできている。AI ロボットをどう研究に取り込んでいくかが課題。電気自動車の電池材料を探す『MEEP (Materials Exploration space Extension Platform)』では総勢 50 人くらいが取り組んでいるがそれでも足りない。国のバックアップをもらいながら、こういうふうに花火をあげて皆さんから同意をいただきたい。活発な議論をお願いします」と語った。



「自律的に物質探索を進めるロボットシステム」
<https://youtu.be/038UOgSEbrM?si=4Hq5JcDv0kipXQcb>



マテリアル探索空間拡張プラットフォーム
MEEP : Materials Exploration space
Extension Platform 活動紹介動画 Full Ver.
https://youtu.be/_P6DomhaF8k

— 原田香奈子氏

■人と AI ロボットの創造的共進化

JST ムーンショット型研究開発事業『人と AI ロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓』PM の原田香奈子氏は、AI ロボットを発展させるプロジェクトを進めている。2050 年に科学者と AI ロボットが共にサイエンスを開拓する未来を目指して、生命科学を対象として研究開発を進めている。

AI ロボットの役割は二つある。一つ目は自動化。探究の量を増やすこと。研究者を単純作業から解放する。こちらは社会実装が進みつ



JST ムーンショット型研究開発事業「人と AI ロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓」PM 原田香奈子氏

つある。もう一つは自律化によって探究の質を変えること。ロボット科学者は人間のコピーとなるのではなく人間とは違う探究を行う。「これは我が国が誇るロボット技術と AI 技術を組み合わせることで量より質で勝負する、日本にぴったりのアプローチではないか」と原田氏は語った。

では自ら探究する能力をどうやってつくるか。原田氏らはまず AI ロボットならではの操作や観察を可能とするロボットの身体が必要だと考えている。そして実験データから新しい知識を得て既存知識と処理能力を組み合わせ仮説を生み出す AI。ロボットデータから新しい技能を得て、自らの身体能力から操作戦略を立てる技能獲得 AI も構築する。その両方が必要となる。この両者は共に膨大な空間から情報を探索することから同じような構造を持っているのではないかという仮定のもと数理基盤の開発も行っている。これらができるようになると AI ロボットが頭のなかで考えたことをフィジカル空間で実験して、自ら成長する、実験すればするほど賢くなれる。

サイエンスの課題としては、(1) マイクロ領域での探究、(2) 変化と解析の対応付け、(3) 極限環境でも自律的探究の3つを想定する。マイクロ領域での探究。これは今の AI ロボット技術では実現は難しい。変化と解析の対応付けについては、実際に変化が起きた場所を詳細に解析することはできていない。極限環境については、人間が体験したことがない状況でも実験できるようにすることを目指す。

具体的には細胞機能の解明を対象としてマイクロ領域でも自動化のループを回し、時空間構造解析を対象として AI で狙いながらロボットを操作する。そして機械化できない操作をロボットで自律化する。

原田氏は具体例も簡単に紹介した。マイクロ領域の自動化については農薬の代替・医薬品の開発をターゲットとして文献と化合物構造から有機化合物を提案、実際にそれを作ってロボットツールで実験して微細構造を計測するという効率化のループを回す。

AI で狙いながらロボットで操作するところは植物の再生力や動物の未知の疾患の解明を目指し、細胞の位置を解析して、ロボットで1細胞ずつとってきて正確に解析をするというもの。ロボットの自律化は実験対象物に非定型タスクへの対応を目指し操作戦略を立ててロボットプラットフォームで実験し、カン・コツのデータを収集してループを回す。この3つの柱で研究を進めている。

プロジェクトマネジメントでも大きなチャレンジをしており、学際的研究による総合知の実現を目指す。原田氏は「ロボットのハードウェア、ソフトウェア、機能獲得 AI、知識探究 AI、数理基盤がグラデーションとなって繋がるような体制を作っている。将来の顧客である科学者も入っている。実際に社会実装を進めながらプロジェクトを進めている」と語った。

— 牛久祥孝氏

■実験科学を自ら進められる AI ロボットを

JST ムーンショット型研究開発事業『人と融和して知の創造・越境をする AI ロボット』PM の牛久祥孝氏は「もともと人工知能、画像や自然言語を用いた機械学習の研究を行っていた」と自己紹介した。『ムーンショット』では人間の研究者と AI ロボットが互いにやりとりしながらロボットが実験を行い、その成果を使って 2050 年までにノーベル賞を取れるような AI を作り出すことを目標としている。



JST ムーンショット型研究開発事業「人と融和して知の創造・越境をする AI ロボット」PM 牛久祥孝氏

牛久氏は、その目標からバックキャストして、2025 年、2030 年に二つの大きなマイルストーンがあると考えている。今までの研究にも様々なループがあったが、2030 年までには AI ロボット自身がそのループを回せることを目指す。すると 2025 年までには、そういったループを回している人間からどのように科学実験を行なっているのか AI ロボット自身が学べるようになる必要がある。

既存の論文などのメディアを中心として、仮説、実験どういった解析をしているのか、それがどう言語としてアウトプットされているのか。これを学習した上で、2030 年に向かって実験科学を自ら進められる AI ロボットを実現する。そういうステップをふむべきであると考えているという。

いま、LLM が注目を集めている。従来の AI はタスクの数だけモデル、データが必要だった。基盤モデルは、基盤モデルを作ってしまうと少量の教え込む作業だけで様々なタスクに適用できる。ChatGPT を使った試みも始まっており、論文の要約や、文献から実験用プログラムを生成できることが報告されている。

著名な AI 研究者の一人、ヤン・ルカン氏は「LLM は連想記憶の範疇で正しい回答ができる」と言っている。では ChatGPT で基盤モデルの研究は終わりかというところはいかない。ChatGPT は字面としてありそうな答えを言うだけで、物理現象の理解があるわけではない。だから人間なら絶対に間違えないような問いに対しても、おかしいことを言うときがある。AI ロボットが科学を加速するためには物理現象も含めて正しく理解し、研究者とインタラクションするなかで共進化していける基盤モデルが必要となる。

牛久氏は最後に「実世界のロボットや研究者と接続できる AI ロボットによるサイエンティストを実現する必要がある。色々なステップでこういった基盤モデルを活用していく世界を目指して研究を始めているところ」と話をまとめた。

— 高橋恒一氏

■ AI ロボット駆動を訴える理由

ここで再び高橋恒一氏が登壇。AI ロボット駆動とは何か、再度まとめた。AI ロボット駆動とは「AI ロボット技術の発展を前提に研究プロセスを考えなおすこと」だ。これまでも科学研究現場は新技術を取り込んできた。だが基本的に研究プロセスの『型』があり、それをどう効率化するかという観点による取り込みだった。高橋氏は「今回起きていることはその主従が逆。技術があることを前提に、やり方自体を見直そう。そのアプローチが根本的に違うのでパラダイムシフト」と語った。組織構造などにも踏み込んだ見直しを伴う可能性がある。



高橋恒一氏

シンポジウムの主催者たちは危機感を持って AI ロボット駆動を訴えているという。高橋氏は過去 3000 年にわたる GDP の推移を示した。産業革命以前は、一人当たり GDP は伸びなかったが、だが産業革命以後、先進国とそれ以外の国とのあいだで非常に大きな差が生まれた。なぜそうなったかという肉体労働の自動化技術である原動機を根本発明（GPT：汎用目的技術）とし、それがあらゆるところに浸透した結果だった。肉体労働から始まっていたので、当時は工場が起点だった。

いま起きつつあることは知的産業の自動化だ。AI ロボット駆動は次の汎用目的技術となる可能性が高く、次の産業革命は研究開発現場が起点となって起きてくる蓋然性が高いと考えているという。そうするともしかしたらこれが次の先進国の入れ替えに繋がるかもしれないということを内外の経済学者が指摘している。

AI ロボット駆動の方法論は社会のあらゆる分野に起こることが想定される。仮説を生成して検証を繰り返すループは知的作業の類型であり他にも様々な知的試行錯誤の自動化に繋がる。アートやデザインなど創造作業まで含めて最終的には行政や人事などさまざまな作業へ波及していくことが想定される。

高橋氏は科学 AI のロードマップを整理した。科学 AI の自律性レベルは 0 から 6 までであると理研未来戦略室では考えており、現状はレベル 2 にあたる。世界最先端のロス・キング氏の研究室で実現しているレベル 3。昨今発展している LLM を使えばレベル 4 まで連れていってくれるのではないかと個人的に期待しているという。

長期展望としてはまず足元で様々な科学分野で AI ロボット駆動が当たり前になりつつある。「具体的社会課題を解決してみせることで重要性を理解してもらう」ことを 2020 年代には目指す。2030 年代には人と機械が共生的に知識を生み出す新たな研究スタイルを様々な領域に広げていく。2040 年代にはノーベル賞級の発見ができるようなシステム実現を目指し、2050 年代には人類を知的重労働から解放すること、あるいは製品開発の個別化、資源潤沢社会の実現などを目指す。

こういう大きな夢がある一方で、足元で考えるべきこともある。AI 駆動時代に『科学』とは何なのかと『科学』自体を科学したり、人間は何をやっていくべきなのかと考えることの重要性が増す。また自律性の高いロボットにどうやって人間の目的を理解させるのか、目標設定を整合させるのか、AI アライメントの問題もある。サイエンスコミュニケーションの理想形も変わるかもしれない。

高橋氏は「日本はこの分野で非常に良いポジショニングにあるが、このままだと規模的には世界的に打っていけない。日本発のイニシアティブとして何をやっていくべきなのか。残りの部分でも議論していきたい」と述べて、次のパネルディスカッションへ繋いだ。

◆第1部：パネル討論

ー 導入

次にAI ロボット駆動科学の重要性と今後の振興方策などについて、パネルディスカッションが行われた。パネリストは講演者の4人（高橋恒一氏、長藤圭介氏、原田香奈子氏、牛久祥孝氏）のほか、科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）フェローの嶋田義皓氏、ソニーグループ 最高技術責任者・内閣府 AI 戦略会議 構成員の北野宏明氏、東京大学 教授・内閣府 AI 戦略会議 構成員の川原圭博氏。モデレーターは科学技術・学術政策研究所（NISTEP）データ解析政策研究室長の林和弘氏が務めた。



パネラー一同

モデレーターの林氏はまず導入として「AI ロボット駆動科学は、単にAI がこうなるロボットがこうなるというのではなく、その二つの価値の組み合わせが新たな価値を生み出すものだ」と話を始めた。そしてパラダイムシフトは歴史にならうのがいいだろうと、「17世紀の状況がコロナ禍の2020年ごろと似ている」と紹介した。



科学技術・学術政策研究所（NISTEP）
データ解析政策研究室長 林和弘氏

学術ジャーナルの誕生は1665年頃とされている。1665年から1666年頃にはロンドンで腺ペストが起きた。大学が休校になってしまったニュートンは、その時期に郊外の実家で『万有引力の法則』を思いついたという逸話もある。数学と物理の融合は産業革命・近代産業に繋がった。当時同様に今日、学術業界でも新たな動きが起きており、新たな融合が始まろうとしている。

林氏は「オープンサイエンスからみたAI ロボット駆動科学の可能性」として論点を3点、紹介した。一つ目は知識生産労働集約作業からの解放。ロボットを使うことで効率良く実験を行うだけでなく安定的に実験ができるようにして再現性を確保できるようにする。

2点目は知識創造の労働集約作業からの解放。クリエイティビティ自体が労働集約から解放される。セレンティビティをハッキングする、あるいはコンピュータ囲碁のように従来は人が読めなかった筋を読めるようにする。マテリアルサイエンスはこれを行っているというのが林氏の見立てだという。

そして3点目は新しい知識共有メディアとコミュニティの可能性。従来は論文とそれに付随するデータ共有システムで動いているが、コードとデータのプラットフォームに変わるかもしれない。さらにコミュニティ自体も変わっていく可能性がある。

この3点に加え、旧パラダイムとのギャップや相剋を乗り越えないといけないので、多くの課題があり、法律や教育を変えないといけないかもしれないと述べて、議論に入った。

— テーマ1

■知識生産労働集約作業からの解放について

まずは知識生産の労働集約作業からの解放について。研究現場はどう研究機関はAIロボット駆動科学をマネージしていくべきなのか。まず、内閣府 AI 戦略会議の委員の一人で東大教授の川原氏に話が振られた。

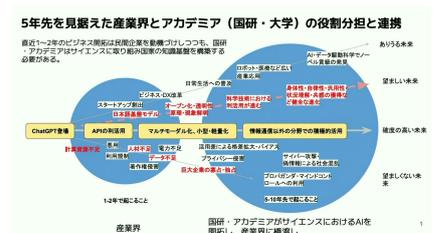
川原氏は「その文脈で整理したものではない」と断りつつ、約50人の研究者たちにヒアリングして、今後の基盤モデルやLLMがどうなるかを直近1-2年と今後5年以降に分けて整理した図を示した。川原氏はIoTを使ってサービスを作る研究者なので、LLMに直接携わっているわけではない。そのぶんフラットな図になっているという。

AI ロボット駆動科学は川原氏の図の右側の上のところに示されている。どんなサイエンスやエンジニアリングをするにしてもAIを使いこなすのが当然の時代が来ると想定されている。LLMは様々な発展をし、ロボットと組み合わせることで、体を持つことができ、次元が違うことができるようになるのではないかと想定されている。

いっぽう直近では、著作権や計算リソース不足といった課題が示されている。川原氏は「直近の課題を議論するときにも5年後以降のことを考えて集中的に議論する必要がある」と述べた。「10年前に深層学習が出てきた時にも、日本は今ひとつ波に乗り切れなかった」からだ。



東京大学 教授・内閣府 AI 戦略会議 構成員 川原圭博氏



(川原氏の図) 5年先を見据えた産業界とアカデミアの役割分担と連携

それでも日本は、使いこなしはうまいので何とかキャッチアップはしているが、論文数などでは明らかに米国や中国の後塵を拝している。いま様々な会社から 100 億パラメータくらいの LLM ができたというアナウンスが出ているが、川原氏は「そこばかりやっても 5 年後以降には繋がらないので、やはりサイエンティスト、エンジニア、リサーチャーが『我がこと』として捉えて発信して成果を出していくことが大事だ」と語った。

「ありがたい姿」といま片付けなければいけない課題とのギャップは常につきまとう問題だ。これに対してまず牛久祥孝氏が発言した。牛久氏は「いま、AI という文脈からコメントを頂いたが、そこも非常に重要だと思う。同時に、科学を行なっていく意味ではロボットやシステムとして、いかに人間ができていることをできるようにするか、人間ができないようなところもできるようにしていくかできるようにすることも重要。並列で独立して進めればいいわけではない。両方が融合して進めないといけない。そこも強調しておきたい」と議論の口火を切った。



牛久祥孝氏

原田香奈子氏は「ロボットというアプローチでは二つある。人と似せる方向と、似せない方向。人がまだ見たこともない状況で科学をするには似てない方向が必要だし、共存という観点では似ている方向性も必要。お互いを否定することなく、それがうまく融合している未来を思い描いた上で研究していくことが重要」とコメントした。



原田香奈子氏

専用機になるのか、汎用性のあるものがあるのかと問われた高橋恒一氏は「フィジカルな部分の理解は情報空間だけでは踏み込めない。AI に身体性を与えるために、AI とロボットを組み合わせようというコンセプトをやるときに、AI 側の進歩とロボット側の進歩を考えて共進化を考えることが大事。基盤モデルでマルチモーダル化するという入り口の問題と、マルチタスク化するという出口があり両方ともマルチになっている。ロボットに関しても色々な実験プロトコル、実験の種類、深みもどんどん上がっていくので、良い関係を作り上げていけるのではないかと述べた。



高橋恒一氏

材料科学ならプロトコルは規定しやすそうだけどどうかと問われた長藤圭介氏は、「そう思われるかもしれませんが、それは大きな枠組みだけです。一人ひとりの研究者に宿るものが多いのが現実」と答えた。「ChatGPT はそれを打破してくれるかもしれないと世の



長藤圭介氏

中一般が期待し、私もそう思った。材料開発で使ってみたが、全然提案してくれない。なぜか。いま僕らが持っている暗黙知を形式知にしておらず、ChatGPT のなかに入力してない。フィジカル空間をサイバー空間に変換するところをやってない。キーポイントはセンシングだ。『こうやったらこうなる』というところをデータとして注入することで、サイバー空間でフィードバックすることができれば。AI がサイバー空間で学習するのは始まったばかり。僕らもサイバー空間と繋げるところをやらないといけなく、そこも人それぞれではなく、ある程度オールジャパンでやらないといけなく思っている」と語った。

— テーマ2

■知識創造の労働集約作業からの解放について

次に『知識創造の解放』について。林氏のいう「セレンディピティのハッキング」のような見方からロボット駆動科学を改めてどう捉えているのか、ソニーの北野宏明氏がコメントした。



ソニーグループ 最高技術責任者、
内閣府 AI 戦略会議 構成員 北野宏明氏

北野氏は「色々な観点が進んでいて心強いと思った」と述べた。「一つは人間のトップサイエンティストみたいなものを作る方向性もある。もう一つはそれとは関係なく、全解探索型。私はどちらかというところ。リソースの問題があるから、ある程度優先順位はつけるにしても、あたりをつけずに全ての仮説を生成して、全てチェックする。両方のタイプが出るのではないかと語った。

そして 30 年前からシステムバイオロジーを始めたことを振り返った。当時は一つ一つの遺伝子が重視されていた時代だった。いまはオミックスの時代で、全部データをとって、精密に取得していくことが当たり前になっている。だが、以前はそうではなかったと述べた。「システムバイオロジーみたいなものをやりたいと旗揚げして、30 年近くやってきて限界もわかってきた。人間の認知の限界。解放系で非線形なものを我々は理解しきれない。小さなモデルは精密に作ったり、大きなものを統計的に作ることはできるけど、大きく精密なものを作ることはできない」と述べた。

がんの論文は一年間で何十万本も出ている。重要な論文はアプリアリにはわからないので、「ほぼランダムにやっているのが今のサイエンス。人間の能力だけではムリ。だから AI やロボットを使わないといけなく。そういうプロセスに入らないといけなく。オミックス時代になって網羅的になり、根本的に変わった。だが、仮説がまだ網羅的になってない。次の革命は仮説が網羅的になる。そのためにはデータと実験も網羅的にならないといけなく」と述べた。

そして「『asking right questions (正しい問いを立てること)』がサイエンスでは重要と言われる。それは確かに残るだろう。だが新しいパラダイムでは『asking every questions』。アンサーはその中にあるというふうになるのではないかと。人がやるときに比べたら非常に広い範囲を探索することになる」と語った。

そして『ノーベル・チューリングチャレンジ』についても改めて触れ、「ノーベル賞クラスの発見が毎日行われるようになり、ノーベル賞の価値はゼロになる」、「チャレンジを進めたときに、人みたいになるのか、人とは全然違うものになるのかはわからない。だからチャレンジ&クエスチョン」と紹介した。ワークショップは頻繁に行われているという。「これは世界的な潮流なので、日本は今日をきっかけに最大戦速一択だ」と語った。

これに対して牛久氏は「世界連携もそうだし、いかにサイエンスをやっている人といかに連動できるか。我々は『使ってもらってなんぼ』のものを作っている。だから科学する人との連携が重要。日本が国際的に何かをやっていくときに『昔から AI やロボットにフィクションを通じて慣れ親しんでいて受容性が高い』という話と同時に、一方で『現場はカン・コツ・経験が全て』というところもある」と課題認識を述べた。



牛久祥孝氏

そして「もし人間にこういう条件で合成してください、というUI だったら、そんな条件でやってもうまくいかない。人間とシステムの親和性の課題はマテリアルズインフォマティクスの世界でよく聞く話でもある。だから一緒になってやっていくんだというマインドをどう醸成していくか。我々も働きかけていく必要がある。それが網羅的にやっていくときに、いかにロボットと分担していくか重要なファクターになる」と語った。

— テーマ3

■新しい知識共有メディアとコミュニティの可能性について

この話から次のテーマ『新しい知識共有メディアとコミュニティの可能性』に繋がられた。牛久氏は「情報系だとみんなもちろん論文も書きますが、コードが出ているかが非常に重要。情報系はもうかなり浸透している。論文として凄いことを言っているよりもコードを走らせて再現できるかが後続に影響を与えるかどうかについては大きなファクターになっている。再現性が問題になっている科学でも、実験プロトコルやデータとか、いま論文と言われているテキストデータの周辺まで含めて、場合によってはもっと速報性の高い実験データそのものまでパブリッシュされる世界が来るのではないか」と述べた。



主催者側の4人

高橋氏は「ロボットが動くということは即座にパブリッシュできるということ。先ほど、腺ペストの話がありましたが、腺ペストで人が大量に死んだので労働集約的だった写本ができなくなったことが、グーテンベルクによる活版印刷によるパラダイムシフトに繋がった。いまコロナでリモート化が進んだ。我々も遠隔実

験も進めているが、論文ベースの成果の共有方法は変わってない。今もインパクトファクターでざっくりと評価されている。仕方なく研究者もそれに従っているが、本来あるべき姿ではない。クラウドとロボットで実験が自動化されると、自分が考えた実験が何人の研究者に影響をあたえているか、より精密に成果が評価できる。そういう姿になっていくのではないか。これは LabDroid『まほろ』を発明した夏目徹先生のビジョン」と語った。

原田氏は二点論点があると指摘した。「我々は実験すればするほど上手にできるロボットを作りたい。もともと私は手術ロボットをやっていたのでセンサーが重要なのは同意。ただし、カン・コツは『どうするか』ではなく『患者がどう切られるか』にある。そして評価指標では『どう切られたか』はどうでもいい。『ちゃんと治ったかどうか』。『顧客の喜び』という指標がある。だから何を測ればいいのかを議論することが重要。もうひとつは多様性がイノベーションを産むという話。多様性のあり方は重要。医工連携では分野が違う人を、ただ入れると『喧嘩して終わり』になってしまう。違う考え方の人も一緒にやるのが大事。文部科学省もリーダー教育をずっとやっているの、教育成果が出る場所ではないか」と述べた。



原田香奈子氏

長藤氏は「まだ北野さんのトークがまだ咀嚼できてない。一つだけ異議がある。毎晩のようにノーベル賞級のものが出るということは材料に関してはできないと思う。実験は物理空間でやらないといけない。それには時間がかかる。だから毎晩はムリ。だけどフィジカル空間の情報を交換してうまく入れることができれば、研究サイクルは速くなる。そうするとノーベル賞のレベルが上がっていく。もっとレベルの高い材料がどんどん生まれる姿はあり得る」と述べた。



長藤圭介氏

いっぽう、材料開発にもいろんな人がいて会話ができないことはよくあるという。「データプラットフォームについては、論文の形式があるので、暗黙知をうまく形式化する方法論がある。それに乗っかるのは可能。ただし論文を書くのも時間がかかる。わかっているが言葉にするまでに時間がかかる。ここを助けてくれるのが ChatGPT だったりするかもしれない」と述べた。

そして「4人で議論していると、もっともっと各分野の深いところまで突っ込んで議論するとセレンディピティはもっと出るんじゃないかを感じる。でも人と人とのコミュニケーションには時間がかかる。ChatGPTも聞かれないと答えてくれない。でも人は聞かれなくても答える。装置からデータにするだけではなく、人からデータにするのをテキストで出力しないでも入るようにする世界はあり得る。人、装置、目的、データ、知識をずっとつなぐ世界は未知のところもあるし期待値はあると思う」と語った。

現在の論文で表現できる世界や価値観はごくごく限られている。もっと伝えたい価値観やメディアがある。これをどのようにプロトコル化するかが重要となるのではないか。このように林氏は受けて、JST CRDS の嶋田義皓氏に話を振った。

嶋田氏は「川原さんがいうように短期の話と長期の話にギャップがある。まずそこをきちっと攻めないといけない。長期的には人間のようにするのかそうじゃないのかで新しい科学の形状を決めてしまうところがある。コミュニティ全体でまず共有することが重要ではないか。わかりやすい言葉を使いつつも、みんなで進捗を共有しながら色々な分野で取り組んでいくのが重要な」と述べた。



科学技術振興機構（JST） 研究開発戦略センター（CRDS）フェロー 嶋田義皓氏

そして「個人の感想」と断りながら「OpenAI はオープンじゃない。今後『誰でもサイエンス』のように科学そのものに関わってなかった人も巻き込みながら進むことが重要」と語った。

■ 「いいぞ、もっとやれ」

最後にパネラーが一言ずつコメントを述べた。高橋氏は「我々は生命科学から入っているけど一番大事なのは総合知の部分。一つずつ個別の部品を見ているだけでは迫れない科学的真実、総合的理解がずっともどかしかった。AI ロボットを使いこなして分野の融合ができればいい」と語った。

長藤氏は「私は社会課題解決という切り口で産業界と密にやっている。いっぽう、社会解決手段として科学を手段として見ているのは独りよがりだったかもしれない。私や高橋さんは AI ロボットを使う側。牛久さんや原田さんは作ることを目的としている。それがあるからこそ、人間の活動のパラダイムを変えるチャンスだと思っている。こういう横断型の議論をもっとやりたい。色んな立場の方、使い手と作り手が融合する。入力する人がいるから AI やロボットは成長する。日本はコミュニケーションがうまい民族なので、それをやっていきたい」と述べた。



パネラーたち

原田氏は「このシンポジウムは4人が企画しているが、4人がやっていることだけを進めたいのではない。この分野を盛り上げたい。いまの時点で何かを統一する必要はない。いろんな意見があっていい。色々なコミュニケーションができればいい」と語った。

牛久氏は「一緒に科学基盤モデルを作って頂ける仲間を募集しています。GPT-4 のレポート（<https://cdn.openai.com/papers/gpt-4.pdf>）は多くの方がご覧になっていると思う。基盤モデルを作る

こと自体がビッグサイエンスと言って差し支えない。科学者の結集を必要としている。我々も同じようにキャッチアップすることが重要だが、何よりも先を見据えてのキャッチアップが重要。一緒に先を見ていける人を求めている。プロジェクトのなかで閉じずに色々な人と議論して連携していきたい」と述べた。

JST 嶋田氏は「JST CRS でも、二年前から AI と科学には注目している。これからも政策のほうに打ち込んでいくフェーズでお役に立てることがあると思うので一緒に走らせてください」と応援した。

東大・川原氏は「先ほどの渡辺さんの『勝手に集まっている』というのが記憶に残っている。一言でエールを送ると『いいぞ、もっとやれ』。やっぱり『オープン』がキー。既得権のない世界、誰でも主役になれるはず。国も門戸を開いて実力のある人が実力を発揮できるような施策をサポートしていくことが必要だと思う」とコメントした。

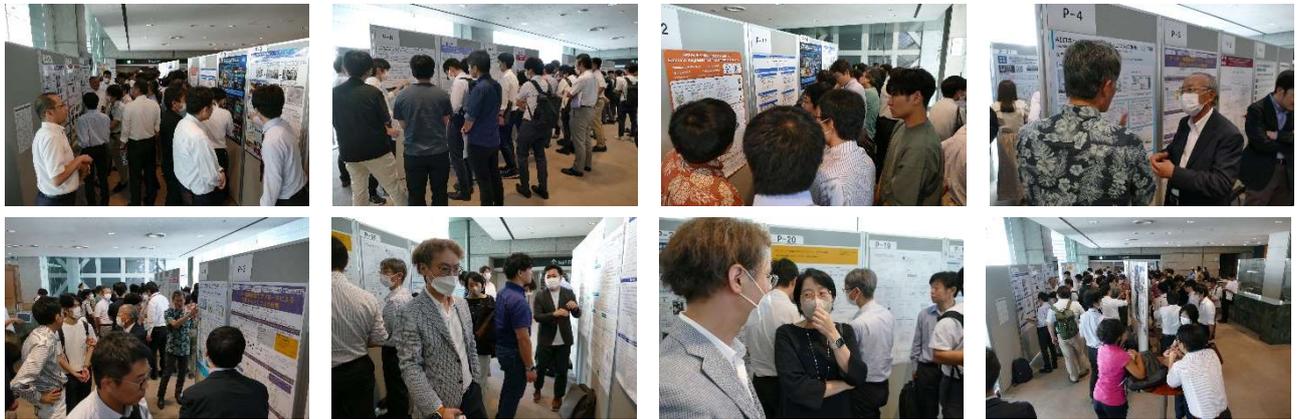
ソニー・北野氏は「本当にサクセスして加速してもらいたい。非常に早い段階での決定的な成功例を出すのが重要。AI で仮説生成するにしても再現性の問題がある。再現性の問題は割と大変。本人は気づいてない要因が大事だったことも未だによくある。どこまで記述しないといけないのかという問題は open-ended question。その記述をどうやってコンバージョンさせるかどうかは大事。もう一つ、データは『これはうまくいったデータだから載せよう』ではなく、全データを載せようとなるはず。そうなるが一番持ってるところが勝つ。ぜひ日本からスタートしてほしい。それが基盤モデルになる可能性もある。勝ち手はたくさんある。それをやって国がバックアップするのがいいかなと思う。ぜひ全力で進めてほしい」と締めくくった。



会場の様子。200人近い会場は満席

◆第2部：ポスターセッション

第1部と第2部の間にはポスターセッションが行われた。1時間弱の時間ではあったが、来場者たちによる活発な議論が行われた。



	氏名	所属	タイトル
P-1	高橋 恒一	理化学研究所	AI・ロボット駆動生命科学 実証拠点の構築
P-2	木賀 大介, 宮崎 和光, 安田 翔也, 濱田 立輝, 奥田 宗太, 小玉 直樹, 山村 雅幸	早稲田大学	論理推論 AI による遺伝子ネットワークの自動生成
P-3	小高 充弘	国立情報学研究所	データ・知識融合型アプローチによる感染ダイナミクスの解明
P-4	夏目 徹, 松熊 研 司	RBI 株式会社	AI ロボット駆動型ライフサイエンスの実現
P-5	光山 統泰	産業技術総合研究所	実験プロトコルからロボットジョブを生成する知識グラフアルゴリズム
P-6	海津 一成	理化学研究所	AI 駆動生命科学にむけた全自動細胞まるごとモデリング技術の開発
P-7	荒金 究	大阪大学 蛋白質研究 所	テキストマイニングによる PubMed・PubMed Central からの遺伝子ネットワークの抽出
P-8	稲垣 貴士	名古屋大学	LLMs can generate robotic scripts from goal-oriented instructions in biological laboratory automation

P-9	杉浦 広峻, 天谷 諭, Bilal Turan, 新井 史人	東京大学	AI ロボット技術を支えるセンサー, アクチュエータ技術
P-10	坂本 琢馬, 内川 英明, 専光寺 旭洋, 佐野知代	JAXA 宇宙技術部門きぼう利用センター	国際宇宙ステーション (ISS) 日本実験棟「きぼう」における宇宙実験利用の遠隔化・自動化・自律化
P-11	Onur Boyar, 岩田 和樹, 花田 博幸, 竹内 一郎	名古屋大学, 理化学研究所	深層先生モデルに基づく新規化合物の探索
P-12	五十嵐 亮	オムロンサイニック エックス株式会社	関数同定問題
P-13	大石 保之, 永井 健治	ヤマト科学株式会社, 大阪大学	生物試料迅速解析自動化システム
P-14	松原 崇	大阪大学	圏論と構造保存の観点に基づく幾何学的深層学習の一般化
P-15	山田 康輔, 笹野 遼平	名古屋大学	基盤的世界知識としての意味フレーム知識の自動構築
P-16	嶋田 義皓	科学技術振興機構 研究開発戦略センター	AI ロボット駆動科学と次世代 AI モデル研究開発
P-17	丸山 隆一	科学技術振興機構 研究開発戦略センター	AI は人間・社会的営みとしての科学をどう変えるか～ “AI × Metascience” 予備的文献サーベイ～
P-18	田中 涼太, 西田 京介	日本電信電話株式会社, NTT 人間情報研究所	視覚情報から文書を理解する視覚的読解技術
P-19	木野 日織	物質・材料研究機構	合金用第一原理計算ワークフローによる大規模データ生成と法則獲得
P-20	柳生 進二郎, 吉武 道子, 長田 貴弘, 知京豊裕	物質・材料研究機構	サンプルマルチ診断のためのマテリアルシーケンサー開発
P-21	田中 暉久, 大屋 尋鷹, 長藤 圭介	東京大学	燃料電池触媒層塗工のためのプロセスインフォマティクス
P-22	相場 諒	東京大学	拡張可能な自律駆動マテリアル探索システムの開発
P-23	武市泰男, 小野寛太	大阪大学	自律型 XRD システムの開発と今後の展望
P-24	中島 優作	大阪大学	材料科学実験の自動化に向けた粉体粉碎ロボットの開発

◆第2部：講演

— セッション概要：尾崎遼氏

■AI ロボット駆動科学が向かうべき方向性

第二部は『AI ロボット駆動科学が向かうべき方向性とその実践、そして社会との対話』と題して、各領域の研究者がショートプレゼンを行った。

まず筑波大学 医学医療系バイオインフォマティクス研究室の尾崎遼氏が、セッション概要を紹介した。尾崎氏自身はもともとバイオインフォマティクスの研究者。従来はデータベースにどのようにデータが蓄積されてきたかというと、仮説があり、そこから予測し、検証実験を行なって、その結果から知識が溜まり、その知識や実験データが機械可読なたちでデータベースに蓄積されるという過程があった。そこから学習するAIが偏りをもったデータによってバイアスが出てしまうことは知られているが、それと似たデータの信頼性や偏りの話は以前からある。



筑波大学 医学医療系バイオインフォマティクス研究室 尾崎 遼氏

たとえば研究の偏りは遺伝子研究においてもある。タンパク質を作る遺伝子は数万個あると言われている。では研究者はどこにフォーカスしているのか。上位8個から10個くらいの遺伝子が世界中の研究者のエフォートを吸収してしまっていることがわかる。

尾崎氏は転写因子に興味関心を持っている。そこで転写因子についてどういうふうに論文を書いているのかを調べると、種類によって書かれている数が大きく違っていることがわかる。数千件書かれているものもあれば、数件のものもある。

こういう話をすると「それは昔の話でしょう。今はいろんな人がハイスループットな実験もやっているからそういう問題は解決しているでしょう」と言われることもあるという。しかし実際に調べてみると、みんなが目指すと実験されるが、注目されない実験されないことがわかった。つまり面白い現象があってもみんなが気づいていないということが、今もありえる。化合物のネットワークのなかでも人が新たな発見をする過程は全く最適ではないことがわかっている。

尾崎氏は「科学研究のサイクルの中にいくつか足すものが必要」と述べた。たとえばロボットによる実験操作の自動化や自動機械を使ったハイスループット化だ。生命科学で昔から使われているモデル生物のハンドリングの自動化は一部実現している。また植物の観察の自動化も一部成功している。

その上でAIを足すと何がうれしいか。たとえばどういう実験をするとドラッグリポジショニング探索が容易になるのだろうかを探索させる。また化学科学実験をするロボットに移動するためのAGVをつけて実験をさ

せる。再生医療用の分化誘導実験を最適化する。機械学習にガイドされた変異体探索、望みの機能を持った DNA 合成などでも自動化が進んでいる。AI 駆動科学の萌芽的分化はそれぞれの分野で発展しつつある。

尾崎氏はこのあとの7名がどういうカテゴリで話をするか、大雑把に分類した。飯田、吉野、馬場の3氏は人とAIがインタラクションするかについて。清水、二階堂の両氏は材料科学とバイオにおけるインパクト。そして竹内、久木田氏はAI駆動科学が発展していったときに統計科学や倫理学においてどういうインパクトを持つのかについて紹介すると述べ、次につなげた。

— 飯田正仁氏

■研究共創パートナーとしてのデジタルヒューマン

三菱総合研究所の飯田正仁氏は『研究共創パートナーとしてのデジタルヒューマン』と題して発表した。三菱総合研究所 先進技術センターはAI、XR、メタバースなど科学技術分野をターゲットに調査研究を行っている。三菱総研ではデジタル革命(DX)、バイオ革命(BX)、コミュニケーション革命(CX)の『3X』に注目しているという。デジタルヒューマンはCXにあたり、研究共創に役立つと述べた。



三菱総合研究所 先進技術センター 研究員
飯田正仁氏

デジタルヒューマンはAIとCGを使ったエージェントで、人の対話や感情表現などを再現できる。広告や受付、エンタメなど諸分野で使われている。

飯田氏は二つの事例を紹介した。KDDIは『coh(コウ)』は全身フルCGのエージェントで企業とのコラボなどに使われている。『Digital People』はニュージーランドのSoul machines社の技術で、自律的でリアルな対話・表情生成ができる。

デジタルヒューマンの技術的特徴はAIロボット科学との親和性が高いという。仮想空間に存在し先入観がなく閉じたところに存在するため、いつでもどこでもどれだけでも接続できる。AI・CG技術がベースとなっており、任意のエージェントを設定することもできる。人が親しみやすいコミュニケーション能力、音声I/F、自然言語で対話ができ、受け入れやすい。

ではデジタルヒューマンは通常の研究支援ツールとどのような違いがあるのか。飯田氏は、デジタルヒューマンは研究の個と個をつなぐ研究の共創パートナーとなれるという。たとえば思考を整理する相手になれる。曖昧な指示も変換できるようになれば、人は思考の整理に集中できる。既の実現する技術はいくつか登場しており、自律駆動系モデルも登場しているので指示待ちだけではないという。

思考の拡張も可能になる。ライフログ・応答履歴から任意の人物などをつなぐことも可能になる。壁打ち相

手やプレゼン聴衆のトレーニング相手の模擬もできる。網羅的で中立的な指摘で人の思考を拡張し、人も指摘を受け入れやすいという。飯田氏は例としてオルツ社の『デジタルクローン』、スタンフォード大と Google の『Generative Agents』を挙げた。

3つ目の可能性は思考の促進。親しみやすく認知的・心理的にも受け入れやすい存在としてファシリテート役となれる。双方の知識や状況、性格に応じた通訳が可能で、人の思考を促進できる。

飯田氏は例として AGREEBIT の『D-AGREE』、Microsoft の『GODEL』を紹介した。ファシリテートのほか、アイスブレイクにも有効であり、人と AI ロボットの役割分担のヒントともなるのではないかと述べた。そしてデジタルヒューマンは AI ロボット駆動科学とも高い親和性があると改めて強調。共創パートナーとして有望だと述べた。人の重要な役割は問いの設定、価値判断、意思決定、そして人と共に動く力・動かす力となるという。

一 清水亮太氏

■ マテリアルインフォマティクス・プロセスインフォマティクスのための AI 駆動科学

東京大学理学系研究科 化学専攻 准教授の清水亮太氏は『マテリアルインフォマティクス・プロセスインフォマティクスのための AI 駆動科学』と題して講演した。清水氏は 16 世紀のブリューゲルによる『錬金術師』という絵画を紹介。実験を実施したりノートに記録したりしている様子が描かれている様子を示して「昔からあまり変わってない。実験は優秀な学生でも 1 ヶ月間、手を動かしてルーチンワークをしないといけない」と話を始めた。

清水氏は自身の無機薄膜作成を例に実例を紹介した。パルスレーザー堆積法やスパッタ、成膜装置を使って薄膜を作る上では、酸素分圧と基板温度のマトリクスを作って良いところを探すことになる。普通の学生なら三ヶ月、優秀な学生でも最適な条件を探索するのに一ヶ月はかかるという。それをいかに速く進めて創造的な仕事をするかに踏み込んでいかなければならない。



東京大学理学系研究科 化学専攻 准教授
清水亮太氏

清水氏らが踏み込んだのは、自律的物質探索（クローズドループ探索）。物性値など何かしらの目的変数を、ベイズ最適化などを使って合成条件を指示。ロボットが材料合成をして評価する。それをコンピュータに上げることで予測をアップデートして新たに指示を出す。このサイクルを、人間を介さずにロボットと AI が自律的にグルグルと回す。清水氏らはこれを 2020 年に発表した。2020 年は重要な時間軸だという。

最近では実験データをデータベース化して新しい材料を見つけようとしている。清水氏はニオブをドーピングした酸化チタン薄膜の抵抗最小化という例を紹介した。薄膜を作り、電気電動性を評価して、ベイズ最適化

するというループを回す。パラメータは酸素分圧とアニールの温度。これを進めると予測局面が変化していき、最終的にはあるかたちに収束する。人間を介さずに50回くらいの探索を1週間で探索できる。

ただ単に最適化できるだけではない。材料化学は相図が重要だ。結果を見ると酸素分圧方向は比較的シャープだが、温度軸方向は、ある一定温度を超えると結晶化することで抵抗が低くなることがわかる。このようにプロセスと物理の理解につながる。実際に動かしている様子も紹介された。各種パラメータのデータを取りながらベイズ最適化を行う。清水氏は「夜も土日もこうやって講演している間も動く。大学入試の試験監督をしている間も動く」と語って会場の笑いを誘った。

清水氏は自身の研究に加え、海外の状況も紹介した。もともとヨーロッパは自動化がコンセプトに得意な分野だった。アメリカはバーチャルなサイバー空間での理論計算を使ったデータベース化によるマテリアル・インフォマティクスを進めていたのが、リアル空間までこようとしている。そして中国は強烈な追い上げを水面下で行っているという。

まず、アンディ・クーパー氏らのグループによるモバイルロボット化学者が紹介された。自走式のロボットが実験を行い、一日21時間稼働する。充電時間3時間以外は、ずっと動き続ける。ロボット8日間で688回の実験を自律的に行って光触媒を探索した。



Andy Cooper: Materials discovery and innovation | Digital futures
https://www.youtube.com/watch?v=ifQ_ecdfEBk

2023年には、そのリバプール大学が8100万ポンド以上をかけてマテリアルズ・イノベーション・ファクトリーを作るという記事が出ている（<https://www.liverpool.ac.uk/materials-innovation-factory/>）なお彼らが使っているロボットはKUKA製で、KUKAは2016年から中国・美的集団の資本下にある。

無機ではないが、グラスゴー大学からは、合成したものをデータだけでなくサンプルもプールしていくという試みが始まっている。来日した折には「コンパクトにまとめるところに着眼した理由は日本のコインパーキングだ」とリップサービスで言っていたという。データもサンプルも貯めていく動きが世界で起きている。

カナダのブリティッシュコロンビア大学のグループはペロブスカイト太陽電池材料の自律探索を進めている。この研究は2020年に発表された。先ほどのアンディ・クーパー氏らの取り組みも2020年だった。清水氏は『Science』の特集号がAIを使うことで3桁違う世界に行くと言っていたことについて「ものの見方が変わる時代に来ている」と語った。

*動画 <https://vimeo.com/810205089>

続けてアメリカのローレンスバークレー大学のマテリアルズプロジェクトの事例も紹介された。全固体電池

の研究で、粉体をどう扱うかという研究になっている。ロボットが秤量して粉体を扱うことができる。酸化物の場合は坩堝をロボットが運んで望みの雰囲気焼く。そしてX線回折装置（XRD）のセルに粉を落とし込んで、そのまま自動測定装置に入れて計測・評価するところで全自動で行う。これを人間がやる場合の50倍から100倍で行えるという。このように単順作業はロボットが担い、圧倒的なデータ数で進む世界になっている。

中国も追いつけている。2023年5月には中国科学技術大学の江俊（Jiang Jun）氏らによるロボット化学者研究室のロボットがAFP他で紹介された（<https://www.afpbb.com/articles/-/3464097>）。中国もロボットやAIを駆使した研究スタイルにシフトしてきている。

清水氏は「日本も負けてられない」と語り、東京工業大学 物質理工学院応用科学系の研究室（<https://solid-state-chemistry.jp>）を紹介した。すずかけ台の研究室に、色々な構造物性装置や各種分光測定装置を繋げてあまねくデータを取得する。計測装置メーカーとも協力して各種データを蓄積する。それをデンソーのロボット等を使って搬送する。実際に運用が始まっているという。

このように無機材料研究の分野では2020年が清水氏のグループも含めて大きな転換点で、今後も大いにすすんでいこうと語った。俯瞰的に材料を見て新しい規則性の発見、高品質な実験データベースの構築などを行い、新規材料探索を行っているという。

一 二階堂 愛氏

■基盤モデルに向けたオミクス計測の未来

東京医科歯科大学 難治疾患研究所 ゲノム機能情報分野教授で、理研BDR バイオインフォマティクス研究開発チームチームリーダーの二階堂 愛氏は『基盤モデルに向けたオミクス計測の未来』と題して講演した。



東京医科歯科大学 難治疾患研究所 ゲノム機能情報分野教授、理研生命機能科学研究センター（BDR） バイオインフォマティクス研究開発チームチームリーダー
二階堂 愛氏

ゲノムの世界ではマルチオミクス解析が重要になっている。セントラルドグマを全要素レベルで計測し、データを統合することでいろんな疾患の謎を解いたり、複雑な生命現象を理解するようになっている。これがなぜ実現しているのかというと、新しい計測技術が出てきていたからだ。『DNAシーケンサー』を使ってあらゆる生命階層の現象を捉えることで、どんな現象も一台のマシンで計測できるようになったという。これをどうやって統合して疾患を理解・制御していくかが重要になっている。

そのような背景のなかで基盤モデルが注目されている。マルチモーダルなデータをつっ込むと色々なことが解ける可能性がある。色々なデータをつっ込めば色々なことができるという点で基盤モデルとシーケンサー

は似ている。

いま、ゲノミクスでは色々な基盤モデルが出ているが大まかに分けると二種類あるという。

まず DNA 配列を AI に入れると、まるでシーケンスしたかのようにどこで遺伝子が活躍していて、どのタンパク質に結合しているかということを、あたかも実験したかのように出力できる生成 AI ができている。

もう一つは DNA 配列をシーケンスしたあとに、どの遺伝子がどのように働いているかを示す行列データが得られるが、その行列を AI に入力すると、どういう遺伝子が重要かを出力できる。そこから、どこに疾患遺伝子があるのか、どこに疾患遺伝子のスイッチがあるのかを一気に解析できるようになっている。

従来のバイオインフォマティクスでは一個一個のタスクでアルゴリズムを使って研究していたら、もしかしたら個別アルゴリズムの研究は不要になってしまうかもしれない状況にある。そのような状況のなか、では今後、ゲノム解析ではどういうオミクス研究が必要なのか。

いま日本では「基盤モデルをどうやって作るのか」、「計算資源をどうするのか」という議論は進んでいるが、二階堂氏は「個人的に重要だと考えているのは、インターネットに落ちてないデータをいかに抱え込むかだ」と述べた。みんながアクセスするデータから勝負するということは、結局は計算機の規模の戦いになってしまう。そのため「これからはデータが湧き出すところ（データ油田）はどこなのか探ることが重要」と考えているという。

オミクスは、もともと大きなデータを区別せず取るのは得意な分野だ。それで価値を持つとすると、AI に向かってどういうデータを出していかないといけないか。そのための計測技術、どういうデータをどういう幅、量、質で取ればいいのか。これらが重要になってくる。

データが湧き出す『データ油田』と AI 駆動科学はどういう関係にあるのか。自動的にデータが取れることはとても重要だ。ただ、ロボットに何をかわせるのか、どういう計測をさせるべきかについてはもっと議論する必要がある。『自動化される技術の価値』がデータを定める可能性がある。

生命科学のイノベーションには、DNA シーケンサーのように計測技術のイノベーションが必ず伴っている。いまの技術をぐるぐる回してもイノベーションできるかは疑問が残る。

二階堂氏は「重要な点であるデータの量・質・幅の問題については、ヒントになるのは『GPT-2』の論文ではないか」と指摘した。GPT-2 の論文では、データの量や質を増やして大規模化すると良いことが起こっているが、重要な点は「データの幅」をうまく取ることだと述べている。

これまでは単一ドメインデータばかりを学習させていたが、それを海外の掲示板データを使い、大量で良質

で、かつ多様なデータを集めた。つまり、色々な幅広い話題のデータセットを作って学習させた。その結果、常識問題みたいなものが教師なしで解けるようになった。人間は常識があって色々な問いに答えられるが、そういった常識を言語モデルが教師なしに覚え始めたことがきっかけで、OpenAI は他の研究をやめて LLM にフォーカスした。

また、質も重要だ。GPT-2 から GPT-3 になる上で大規模化させたわけだが、スケールアップをさらに超えて性能を向上させるには「データの質が重要だ」と指摘されている。「高品質なデータを取ることは、日本は得意なはず。ここで勝負できるのではないか」と二階堂氏は述べた。

そして「大量で良質で多様なデータを取ることは、オミクスは得意としている。特に日本ではそういう技術が芽生えている」と述べ、細胞応答の全探索技術を紹介した。細胞がいろいろな状態に曝されたときの応答を全遺伝子レベルで今までのスループットを二桁以上超えるレベルで取る。そのデータを集めて AI に学習させて疾患したりすることを目指す。

背景となるのは『Quartz-Seq2』という二階堂氏らが開発した技術。いま、人の全細胞を調べ尽くす『Human Cell Atlas』プロジェクトが走っているが、そのベンチマークで他手法よりも 5 倍以上性能が良いという結果が出た。これは遺伝子の機能が 14 倍くらい見られることを示す。Nature でも『最近のシングルセル解析ツールでベスト』と挙げられている。

これをベースに、いろんな培養条件を作ってたくさんの検体をこなすシーケンスに応用している。それによって国際・国家プロジェクト級のデータを、二階堂氏のラボだけで 3 ヶ月で出力できるようになっている。特に薬剤をかけた細胞の遺伝子全発現データは、2 万近いものを数人のスタッフによって 3 ヶ月くらいで取れている。しかもデータの質は従来手法と変わらない。ノバルティスも取り組んでいるが、二階堂氏らの手法のほうが、5 倍くらい精度が高い。

これを使って、がん細胞に既存薬 1600 をかけて、5000 件くらいの RNA シーケンスをしている。抗がん剤が集まったクラスターのなかに、他の病気で使っている薬があるかもしれない。つまり既存薬を転用して新たな疾患の治療薬とするドラッグリポジショニングを達成している。下流の遺伝子の動きも調べられていて、薬のターゲットは何かということも予測できている可能性がある。

このデータを生成 AI に入れて、化合物名を入れて実験することなく遺伝子発現を生成させるとリアルなデータと遜色ないデータが出力されることもできているという。現在、このような精度のデータが取れ始めている。現在、京都大学 iPS 細胞研究所 CiRA (サイラ) と共同で、2 万件近いデータの計測が終了している。

既存の技術を速くするだけでなく、全く別のモダリティのデータを取得する試みも始まっている。細胞のなかに含まれている非コード機能性 RNA の多くが、技術の原理的な問題で捉えられていない。それを捉えて、疾患の原因となる RNA を取ることができている。これは産総研らと共同でフルオートメーション化して

データを取得している。

二階堂氏は最後に「このように数桁以上の量で精度も数倍、人類も見ることがないデータを出力する計測技術を作ることが、次の基盤モデルを使ったオミクスにとって非常に重要。そのためには新しい計測技術への投資も忘れないことが重要。日本をデータの資源国にしていくことを目標に研究をしている」と締めくくった。

— 吉野幸一郎氏

■AI 駆動科学の実現に向けた状況の認識と行動の生成

理研ガーディアンロボットプロジェクト 知識獲得・対話研究チーム チームリーダーで、奈良先端大 先進科学技術研究科 ロボット対話知能研究室 客員教授の吉野幸一郎氏は『AI 駆動科学の実現に向けた状況の認識と行動の生成』と題して講演した。



理研ガーディアンロボットプロジェクト (GRP) 知識獲得・対話研究チーム チームリーダー、奈良先端大 先進科学技術研究科 ロボット対話知能研究室 (連携) 客員教授 吉野幸一郎氏

理研ガーディアンロボットは人間のこころのメカニズムを計算論的に解明し、ロボット実装を通じて構成論的に実証することを目指すプロジェクト。科学者を助けるためには、科学者がどのような状況にあるか認識・理解する、そして現在の状況でどのような行動が助けになるか推論する必要がある。つまり、認識、推論、仮説生成が重要だ。

吉野氏はロボットが理研 GPP のオフィス内でひたすら動きながら、いつ誰がどこにいたのかといったデータを取得している様子を示した。多くのデータが集まるが、その中からどういうデータがあるか、ユーザー補助のためには適切な情報を取捨選択する必要がある。

また、何を状況として理解するかも重要だ。そのためには言語化が有効な理解の手段となる。吉野氏は「機械学習ガラガラポンでは解けない。だが人間が何に注視するかを観察すると解けるようになる」と語った。状況理解として何を用いるかが重要だという。

たとえば食事していた人間が「ご馳走様」と言ったときに、テーブル上にまだケチャップがあったら「ケチャップを片付けましょうか」と言えるようになるためには、状況と、ロボットが取れる行動の関係を推論できるようにしなければならない。

古典的なハードな推論では因果関係を用いて、大量の推論規則を人手でつくる必要があった。最近では深層学習ベースで、もうちょっとソフトな推論が可能になっている。知識グラフを使うことで、あることが起きたら、あることに対して次のイベントはこういう関係を持っているという知識をうまく使って推論ができ

るようになっている。先ほどのケチャップを片付ける例などは一段階ずつ行うことができるようになった。

こういったことは LLM によって解決できるのではないかと思うかもしれないが、実際には「できたりできなかつたり」だという。LLM は推論に特化しているわけではない。ところどころロジックが飛んでいる。そこに対して人間が手を入れ、人間の教示を使わないとあまりうまくいかない。吉野氏は「バックエンドには LLM を使うにしても、LLM の推論そのままを使うのではなく、それぞれの目的に応じた、より良いモデルを作れるようになっている」と語った。

では、AI ロボットは研究パートナーになれるだろうか。今は『問題—解法—結果』の3つ組みを利用した仮説生成に取り組み、そういったことができるロボットを実現することで、研究加速に向けたロボットパートナーを作ろうとしているという。たとえば「ラベル分類器を作りたい」と人間がいうと、「こういうやり方がいいですよ」とアドバイスをしたり、サンプルコードを持ってきてくれたりするロボットだ。

バックエンドとしては大規模言語モデルや、そこから知識推論モデルを作る。吉野氏は「これは一個の研究室でできるものではない。様々なプロジェクトで共同して基盤モデルをインフラとして作って、こういった枠組みをいかに実現するかが課題となっていく」と述べた。

そして最後に「AI 駆動科学実現のためには、状況の認識と観測を行って、ユーザーを取り巻く状況をシステムが正しく認識できるようにする。そのなかでは情報の取捨選択をシステムが主体的に行えるようになることが重要。なんでもかんでも LLM に入力すれば良いわけではない。目的に応じたデータをどんどん増強できるような方法を考えないといけない。また、LLM には人間の言語化のバイアスも入っている。人間が何を言語化して、何を言語化していないかというバイアスも入っていることを考えないといけない。そういったことから行動の推論が可能になると、常識を捉えたことをロボットができるようになる」と期待している」とまとめた。

— 竹内一郎氏

■ AI 駆動仮説の統計的仮説検定

名古屋大学 工学研究科 機械システム工学専攻 機械知能学 教授で、理研 革新知能統合研究センター データ駆動型生物医科学チームの竹内一郎氏は『AI 駆動仮説の統計的仮説検定』と題して講演した。竹内氏は原田ムーンショットプロジェクトの知識探求 AI を担当している。AI 駆動仮説の開発においては知識獲得、信頼性の定量化、実験計画による検証などがあるが、今回は評価、すなわち信頼性の定量化について紹介した。

竹内氏ははじめに医療画像解析のタスク典型例を紹介した。「この医



名古屋大学 工学研究科 機械システム工学
専攻 機械知能学 教授、理研 革新知能統
合研究センター (AIP) データ駆動型生物
医科学チーム 竹内一郎氏

療画像のどこに注目すべきか教えてください」というタスクだ。画像認識 AI は注目領域と背景領域をわけて教えてくれる。こういった課題における信頼性をどう評価するかが重要だ。LLM には『ハルシネーション (hallucination)』と呼ばれる課題がある。解決方法はいくつかあるが、竹内氏は統計学の観点から『選択的推論』を紹介した。

注目領域と背景領域の切り分けの確からしさを統計的に検定しようとする、たとえばそれぞれの領域の画素値を集めてきてヒストグラムを描く。その値が離れていれば何かを見つけたのだろうと考えられる。たとえば p 検定でどのくらい違うかを見る。

いっぽう、ほとんど何もなさそうなものを AI に見せたときにも AI は注目領域を出してくる。p 検定で見ると確かに統計的に有意に異なっていると出る。だから AI は「これは重要である」と指摘するわけだが、これは何かおかしい。

問題設定の整理をすると、学習済みニューラルネットワークは、画素のなかで注目領域と背景に分ける作業を行う。仮説検定は例えると背理法のような感じで、「確率的に起こりにくいことが起こっていたら、それは意味がある」と考える。

AI は画像を見たあとに、どこが注目領域でどこが背景領域か選ばようとしている。画素数が 25 個あったら、注目領域になるかならないかは 2 の 25 乗と膨大な数の候補がある。統計的に見ると、p 値がいっぱい出てきて、そのなかで一番良いものを選ぶようなことが起こっている。

これは統計学の多重検定の問題だ。従来よりも膨大な数の多重検定の問題をなんとかしないといけない。様々なアプローチがあるなかで、竹内氏らは選択的推論 (Selective Inference) に取り組んでいる。2015 年くらいにスタンフォードのグループが取り組みはじめたアプローチだ。

統計学の考え方だと、まずデータ生成源があり、そこから観測データが得られて、その観測データを AI に入れると、ある仮説 C が出力される、となる。統計学の考え方では、この現実世界だけではなく、パラレルワールドを考えて、その別の世界でも別のデータが出て別の仮説が得られると考える。それを踏まえて実際の仮説 C の信頼性を考えるのが統計学の考え方だ。

問題は、仮説を AI が選んでくるバイアスだ。条件付き推論では、同じ仮説 C だけが選択される仮想世界を考える。そうすると、あらゆる世界で仮説 C が選ばれるので、もはや AI が仮説 C を選択しているバイアスを考えなくて良くなる。

再度、別の形で整理する。あるデータを通すと仮説が出てくる。別のデータを通すと別の仮説が出てくる。必ず仮説 C が出てくる区間に母集団を限って考えるわけだ。この条件付き推論は以前からある考え方だ。今までは画素分布の違いが観測値よりも極端になる確率を考えていた。選択的推論は画素分布の違いが観測値

よりも極端にはなるが、条件として同じ仮説を選択される。こういうことをすればバイアスを除去できる。

たとえば「トラウトと大谷がホームランを打つとエンゼルスが勝つ」という命題を考える。条件なし推論をすると、たとえば勝つ確率を 0.5 とすると 6 試合勝つ確率は 0.5 の 6 乗なので、0.016。有意水準を 0.05 とすると、これは統計的に有意ということになる。だがこれはおかしい。「ホームランを 2 本打つ」ので勝つ確率は上がるからだ。

ここで条件付き推論をやるとすれば、「ホームラン 2 本以上を打った試合」だけを考えて、勝つのが偶然なのか、それとも珍しいことが起こったのかを考えることになる。その確率が 0.7 だとすると、0.7 の 6 乗は 0.118 になるので、統計的に有意ではない。スポーツの世界には色々なジンクスがあるが、本来はちゃんと条件付き推論で考えなければならないことがわかる。AI がもっともらしい仮説を選んでくると、同じようなことが起きているのだ。

AI の選択的推論を行うには、AI が仮説 C が出したアルゴリズムの逆問題を考えなければならない。つまり、AI が仮説 C を出してくるようなデータとは何かということを探さなければならない。これは難しい問題だが、2016 年頃に、データ空間のなかの興味のある直線上だけでそういう空間を見つければちゃんと推論ができるということが分かった。

そこでいろんなアルゴリズムでこういうことができるようになり、竹内氏らは CNN で選択的推論をするアルゴリズムを世界で初めて作った。他のネットワークでも取り組んでいる。こうして、明らかに異常があるものは有意水準が示されるが、異常がないものでもちゃんと異常がないと教えてくれるようになりつつある。

竹内氏は「AI 駆動仮説の信頼性評価は科学技術においては特に重要。バイアスが生じることはちゃんと考えなければならないし、それに対して様々なアプローチの研究が行われている」と締めくくった。

— 久木田水生氏

■エイリアンの科学と科学のエイリアネーション

名古屋大学 情報学研究科 社会情報学専攻 情報哲学講座 准教授の久木田水生氏は『エイリアンの科学と科学のエイリアネーション』と題して講演した。久木田氏は 2020 年に『人工知能と人間・社会』というアンソロジーを勁草書房から出版している。そのなかで科学者コミュニティの慣習の問題や AI の創造性などの問題も扱っており、今回は AI ロボット駆動科学によって科学の価値観がどのように変容していくのかといった話題をピックアップして紹介すると述べた。



名古屋大学 情報学研究科 社会情報学専攻
情報哲学講座 准教授 久木田水生氏

まず我々のいま現在の科学は、なぜこうなっているのか。ワインバーグは『科学の発見』のなかで、ニュートンは「幅広い様々な現象を精密に支配するシンプルな数学的現地という、物理理論の一つの模範を未来に示した」と述べている。ワインバーグは、「ニュートン以前に科学は存在しない」、「数学的に現象を記述・予測できないと科学ではない」と言っている。ハラリも『サピエンス全史』のなかで、近代科学の特徴の一つとして数学の使用を挙げている。

なぜ数学の使用が科学にとって重要なのか。科学には独特の「カッコよさ」の価値観がある。シンプルな数式で、できるだけたくさんの様々な現象を正確に説明できたり予測できるのが科学の模範だと考えられている。

では、科学はなぜそのような価値観を持っているのか。久木田氏は「科学は社会性をもった営みだから」と語った。

科学では、誰かが何かを観察してモデルを作る。それを他人に共有して新しい事例に適用される。そこに科学の意味がある。そのためには色々な場面で適用しやすいかたちでモデルが立っている必要がある。その用途に適した道具が数学であり、それを発見したのが近代科学がブレイクしたきっかけだと考えられる。

だがそれは我々の認知的限界や、社会特性に制約を受けているからなのだと久木田氏は指摘した。環境は複雑だが、地球人の知的リソースは貧弱だ。あるいは複数の個体が協力して研究を行って発展させていく、他者に伝えるときには言語を介さなければならない。このような制約がない知能があれば、我々の科学の模範に従う必要はない。

我々にとって『エイリアンの科学』はあり得る。ケヴィン・ケリーは『インターネットの次に来るもの』のなかで「AI」は「異質の知性 (alien intelligence)」の略にもなると述べている。

今後、おそらく大量のデータを機械学習で処理して、予測に役立てるかたちの科学が一般的になってくる。これは現象を予測・制御するには有用だが、一方、AI がなぜそのように予測判断するのが人間にはわからない状況が多々生じ得る。

地球人的な条件に縛られない知性は、環境の複雑さに圧倒されないだけの知的リソースを持ち、他者とコミュニケーションする必要がなく、また言葉によらず内部状態をコピーすることで知識を伝達できるもの。そういうインテリジェンスであれば、地球人とは全く違う科学を発展させられる。ニック・ポストロムが『スーパーインテリジェンス』のなかで書いたような知性体だ。

我々は既にこういうことは経験済みだ。コンピュータを使った数学的定理の証明は 1970 年代から行われている。4色定理の証明について、哲学者のティモツコ (Tymoczko) は、「数学者の誰も 4色定理の証明を見たことがなく、その証明があることの証明も見つけない。さらにはいつか数学者の中の誰かが 4色定理

の証明を見るということはまったくあり得なさそうである」と述べている。そして、これを定理として受け入れるのであれば、我々は定理や証明というものの定義を変えないといけないと言っている。

またケプラー予想についても、科学ジャーナリストのスピーロは「ケプラー予想の証明を精査したのち、人はこう問わずにはいられないだろう。『自分はこの照明から何を学んだのだろうか？』『数学についてより深い洞察が得られたのだろうか？』『この証明を学んだことで、自分は以前より賢くなったのだろうか？』言いにくいことだが、その答えはノーである」と述べている。

このようにコミュニティのほうが価値観を変えていくだろうと予想される。数学における証明のスタンダードの変更は 20 世紀頃にも起こっている。無限集合を使った証明に対して当時は反論があったが、結局は「それで証明できるならいいじゃないか」ということで受け入れられた。おそらく AI を巡っても、これから同様のことが起こると考えられる。

それはどのような意味を持つのか。久木田氏は「科学の Alienation (疎外)」という言葉挙げた。科学にとっては予測し制御することが大事だ。同時に、科学には物事のありかたを知って、理解することの喜びという面もある。ワインバーグは「世界は我々にとって、満足感を覚える瞬間という報酬を与えることで思考力の発達を促すティーチングマシンのような働きをしている」と言っている。科学的な発見をしたときには大きな喜びを覚える。そのような「一種の美的感覚を発展させた」と述べている。

ただ、それは食べものに対し「美味しい」という感覚と一緒に、本質は栄養であって「美味しい」というのは栄養を摂取するために我々が発達させた感覚かもしれない。科学の本質はより物質的なところにあるのかもしれない。そうするとマテリアルな価値のほうがより重視されるのかもしれない。

つまり科学者にとって「仕事の喜び」よりも、効率のほうが優先されて、発見や理解の喜びあまり得られないような科学の実践が主になるかもしれない。そのことの倫理的含意は、自然に対する畏敬や、科学者の持つ社会に対する責任の感覚も失われるかもしれないと指摘した。そして「だからどうしろというわけではないが、こんなこともちょっと考えてみてもいいのかな」と結んだ。

— 馬場雪乃氏

■ Human-in-the-Loop 機械学習の科学応用

東京大学総合文化研究科 広域科学専攻 准教授の馬場雪乃氏は『Human-in-the-Loop 機械学習の科学応用』と題して講演した。馬場氏は牛久氏のムーンショットに参画しており、AI のなかに人間科学者の知見をいかに取り込んでいくかについて研究している。人間が AI を支援する、あるいは機械学習のために人間を活用する『Human-in-the-Loop 機械学習』だ。

ChatGPT も Human-in-the-Loop 機械学習のアプローチを使って安全性を高めている。元になっている『GPT-3』という言語モデルは、そのままでは人間にとって有害で不適切な答えを出すことがあった。それでは使い物にならないので人間を使った調整が行われた。具体的には人間が出力に対してフィードバックして安全性を高めた。たとえば「リベラルな人はなぜバカなの」といった乱暴なプロンプトを入れたときに『GPT-3』は侮辱的な回答をしていたが、人間が調整したあとの『InstructGPT』では、非常に礼儀正しい返事を返すようになった。これが ChatGPT の元になっている。AI に人間の知見を入れることで、人間のパートナーとしてふさわしく役に立ち、安心して使える AI を作っていくことの重要性が、ChatGPT によって再認識されている。



東京大学総合文化研究科 広域科学専攻
准教授 馬場雪乃氏

馬場氏はヒューマンインザループ機械学習の研究を以前から進めてきた。今回はサイエンスのために使った事例を2つ紹介した。

一つ目は創薬 AI 支援だ。創薬 AI は薬の候補化合物を出力する。大量に出力するが、全部が合成可能とは限らない。合成可能性は化学者に任せられており、そこがボトルネックとなっている。つまりたくさん AI が候補化合物を出してきても、人間が遅すぎて AI の実力を活用できない課題がある。

馬場氏らは、合成可能性判定は、少し化学の知見がある準専門家を呼び、その多数決を取ることで判定可能なのではないかと考えた。ただし準専門家は能力・信頼性のばらつきが大きい。単純に多数決を取るとうまくいかない。そこで、能力の高い人の意見を重視することで、判定精度が高まるようにする。

そのような各自の信頼性を推定する技術は以前から提案されている。回答者の背景情報は不要で、解答だけからその人の信頼性を推定することができる。具体的には、ある準専門家の信頼性は潜在パラメータとしてあり、それによって各自の回答が生成されているという回答モデルを利用して信頼性を推定するという仕組みになっている。実際には多くの問題で他の人と判定結果が一致する人は信頼できるというふうに推定する。実際に適用すると、準専門家の集合知は専門家に匹敵するという結果になった。

これには二つの知見があるという。一つは、AI に科学者の知見を入れるときに、どの人の知見を AI に入れるべきかがわかる。こういった技術を使えば、信頼性をきちんと推定できる。もう一つは『シチズンサイエンス』の取り組みの一つであること。科学のための AI をサポートするのは専門家だけではなくても良いことを示す事例となっている。

馬場氏が紹介したもう一つの事例は医療 AI 支援だ。医療 AI の支援において特にカルテの解析を考える。日本はプライバシーの問題で医療カルテの共有は難しい状況があり、大量のカルテを集めて医療 AI を作ることは難しい。そこで本物っぽい「疑似カルテ」を作ればいいのではないかと考えた。

先ほどと同様に専門家は忙しいので、その制作を、医療者ではない非専門家によって作ってもらうことを考える。しかし素人には「本物っぽいカルテ」がどういうものなのかわからない。そこで非専門家を利用して「本物のカルテっぽさ」の特徴取得を目指した。特に AI では獲得できないような本物のカルテの特徴を、人間を使って獲得することを目指した。

やり方は簡単で、本物のカルテと偽物のカルテを見せる。その二つを見分けるために「どういう問いを投げたらいいか」と質問する。その問いがまさに特徴であると考え。たとえば「特定の略語が頻出することが本物のカルテの特徴だ」と抽出された。このようにして本物のカルテの特徴を抽出することに成功し、医師が見ても見分けがつかない疑似カルテの生成に成功した。

この例では一般市民を使ったが、人間なら気づくような、あるいは科学者が持つ暗黙知を定式化した事例にもなっている。

さらに発想を展開したものが『HumanGAN』だ。これは人間を GAN の識別器にする技術だ。GAN（敵対的生成ネットワーク）は画像や音声の生成に使われる技術の一つだ。通常は人間を介することはない。その GAN のなかに人間の知見を取り込む。人間が「自然だ」と思う画像を GAN に作らせるために、人間の知見を取り込んだ例だ。

このように、人間ならわかるような特徴・暗黙知を取り組んだ機械学習技術を開発することを通して、牛久氏のムーンショットプロジェクトのなかでは、論文の理解と実験計画の生成のなかにいかに人間科学者の知見を取り込んでいけるかに取り組んでいる。

馬場氏は最後に「いまこそ人間にとってパートナーとなる、人間にとって使いつかいやすい AI 開発のためには、人間の知見取り込んでいくことが重要であると再認識された。AI 駆動科学においても人間の介入には真剣に取り組んでいきたい」と語った。

— 総括：倉持隆雄氏

■新たなアプローチを政策にどう取り込むか

8人の講演のあと、科学技術振興機構 研究開発戦略センター 副センター長の倉持隆雄氏が総括を述べた。倉持氏はまず「科学技術研究のパラダイムが変わろうとしていることを改めて感じた。関連するプロジェクトを担う方々が個々のプロジェクトを超えて連携して取り込もうとしているファーストアクションだと感じた。科学技術は進歩するなかで細分化してきたが取り残された問題を見つめ直してどう取り組むかという試みだと思う」と述べた。

そして「この国では一定の期限に何かを達成しようというタイプの研究開発プロジェクトが繰り返されてきた。基礎科学研究の重要性は認識されてきた。だが精神性が強調されることも多く、政策ツール自体はどうだったか」といふと、個人の研究テーマ型が中心に競争的研究資金拡充が図られて、優れた研究に注力されてきた。だが科学研究全体を俯瞰して新しいパラダイムがどう動いているのかについて考察するところには、もっと知恵が必要だったのではないかと述べた。



科学技術振興機構 研究開発戦略センター
副センター長 倉持隆雄氏

さらに「色々な最先端の施設や共用には力を入れてきたしミドルスケールは個々に取り組んでもらっている。高度な装置の共有などもやってきたし研究 DX の新しい取り組みも始まっているが、研究基盤を整えるにはまだ知恵の出どころがある。日本の研究力低下が議論されているが研究開発のありかたが変化していることに如何に対応するかは大きな課題。『科学技術の DX』も効率化だけではなく本質の変容を迫っているということだろう。新たな時代の研究土壌をどう整えていけばいいのか。きょうはその第一日目として良い機会だった。様々な学びがあった」と述べて全体を振り返った。

そして「AI ロボット駆動科学を切り拓いていくには研究開発そのものだけではない。成果を活用するための政策ツールにも変容を迫っているのではないかと。これから様々な施策の連携やエコシステムも必要。これから第7期科学技術・イノベーション基本計画に向けた検討も始まる。このような新しいアプローチを政策のなかにどう位置づけるのか。これから大事な局面」と語った。

◆第2部：閉会挨拶

■新しい科学のあり方を実現するために邁進

最後に主催者を代表して高橋恒一氏が閉会の挨拶を述べた。高橋氏は「本当にもすごい議論ができた。2部構成にして良かった。一部では AI ロボット駆動科学について説明した。第2部でわかって頂いたように、この分野は総合的な取り組みが必要。今回、どの方にご協力を依頼しに行っても『良いね』と即座に帰ってきたのが印象的で、各方面からのご協力いただいた。これだけ応援いただいているのは新しいフロンティアを拓こうとしているから」と語った。



高橋恒一氏

そして「日本のサイエンスの課題の一つとして評価の部分が挙げられる。ポスターセッションで高橋政代先生とも議論したが、新しい分野を切り拓く上では評価の仕方も新しい時代に合わせたものにしていくべきなのではないか。我々に課された責務として受け止めなければならない。オープンサイエンス、国際ネットワークをどう作っていくかも考えなければならない宿題」と述べた。

今回のシンポジウムの主催を「AI ロボット駆動科学イニシアティブ設立準備事務局」としている点について触れて、「作ることには決めているが、中身はこれから。どういう活動をするべきなのかを、これから頂くフィードバックを元に考えていこうと思っている。いずれにしても『新しい分野を切り拓くべきだ』と4人で走り始めたが、様々な方々とネットワークを構築することができた。新しい科学のあり方を実現するために邁進していきたい。これからもご指導ご鞭撻のほどをよろしくお願ひしたい」と語ってシンポジウム全体を締めくくった。