

戦略プロポーザル

人工知能と科学

～ AI・データ駆動科学による発見と理解～

STRATEGIC PROPOSAL

Artificial Intelligence and Science

-Toward discovery and understanding by AI-driven science-

研究開発戦略センター（CRDS）は、国の科学技術イノベーション政策に関する調査、分析、提案を中立的な立場に立つて行う公的シンクタンクの一つで、文部科学省を主務省とする国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）に属しています。

CRDSは、科学技術分野全体像の把握（俯瞰）、社会的期待の分析、国内外の動向調査や国際比較を踏まえて、さまざまな分野の専門家や政策立案者との対話を通じて、「戦略プロポーザル」を作成します。「戦略プロポーザル」は、今後国として重点的に取り組むべき研究開発の戦略や、科学技術イノベーション政策上の重要課題についての提案をまとめたものとして、政策立案者や関連研究者へ配布し、広く公表します。

公的な科学技術研究は、個々の研究領域の振興だけでなく、それらの統合によって社会的な期待に応えることが重要です。「戦略プロポーザル」が国の政策立案に活用され、科学技術イノベーションの実現や社会的な課題の解決に寄与することを期待しています。

さらに詳細は、下記ウェブサイトをご覧ください

<https://www.jst.go.jp/crds/>

エグゼクティブサマリー

深層学習を始めとする人工知能（AI）技術やビッグデータ処理、IoT（Internet of Things）デバイス、センサー、ロボティクスの高度化と普及により21世紀の科学技術のあり方は大きな変容を遂げようとしている。IT化・デジタル化を駆使した研究開発プロセスの変革（リサーチトランスフォーメーション）は研究開発の効率化だけでなく、様々な分野での新発見の促進や新しい科学の方法論をも生み出しつつある。

本プロポーザルでは、AIの応用分野としても有望視される「科学研究の自動化」を目指し、「仮説」の取り扱いに焦点を当てた以下3つの研究開発課題を提案する。

- （1）大規模・網羅的な仮説生成・探索
- （2）仮説評価・検証のハイスループット化
- （3）人間中心の科学研究サイクル統合

研究開発を通じて実現される自動化AIシステムは、仮説の生成と検証のクローズドサイクルを実行する人間参加型のシステムであり、最先端研究の強力な支援ツールになると期待される。例えば生命科学・医学分野では感染症のワクチンの高速開発や安全・有効な薬の高速発見、材料科学分野では所望の機能を持つ材料の自動設計・最適化、入力された組成・構造の化合物の合成方法の自動決定などが可能となる。また、様々な分野において、科学者自身が立てた仮説の検証や、盲点となっている仮説の探索といった使い方もされるだろう。多くの産業での国際競争力にも直結し、多様なAIシステムとして実現・運用されることに加えて、その利用法の体系化と普及により我が国の研究開発力の底上げも期待される。

国は基盤技術の研究開発と整備に加えて、AI・ビッグデータ技術やロボティクスを自在に使いこなす人材・組織の育成、データ共有の仕組みづくり、コミュニティの醸成などにも取り組む必要がある。本プロポーザルでは以下3つの側面から推進方法を提案する。

- （1）共同利用施設の強化
- （2）グランドチャレンジ
- （3）分野を越えた教育・普及

分野により自動化すべきタスクや装置は異なるため、AIシステムの研究開発と運用は当面分野毎・タスク毎に行われるだろう。分野毎の拠点形成と合わせハブとしての機能も有する「AI駆動科学」共同利用施設の設置・運用が求められる。またAIシステムの実現方法は様々なアプローチが可能なためグランドチャレンジを掲げ、達成に向けたアイデアを幅広く募るような研究開発プログラムの実施が望ましい。

加えて、機械学習をベースとするAIシステムでは、データの量と質が鍵となるため、負例・失敗例の共有を促進する制度も重要である。数学・論理学などの推論ツールや検証のプロトコルなどについての教育・普及の重要度も増している。ハンズオンの訓練に加え、教育の体系化にも留意した研究開発推進が望まれる。

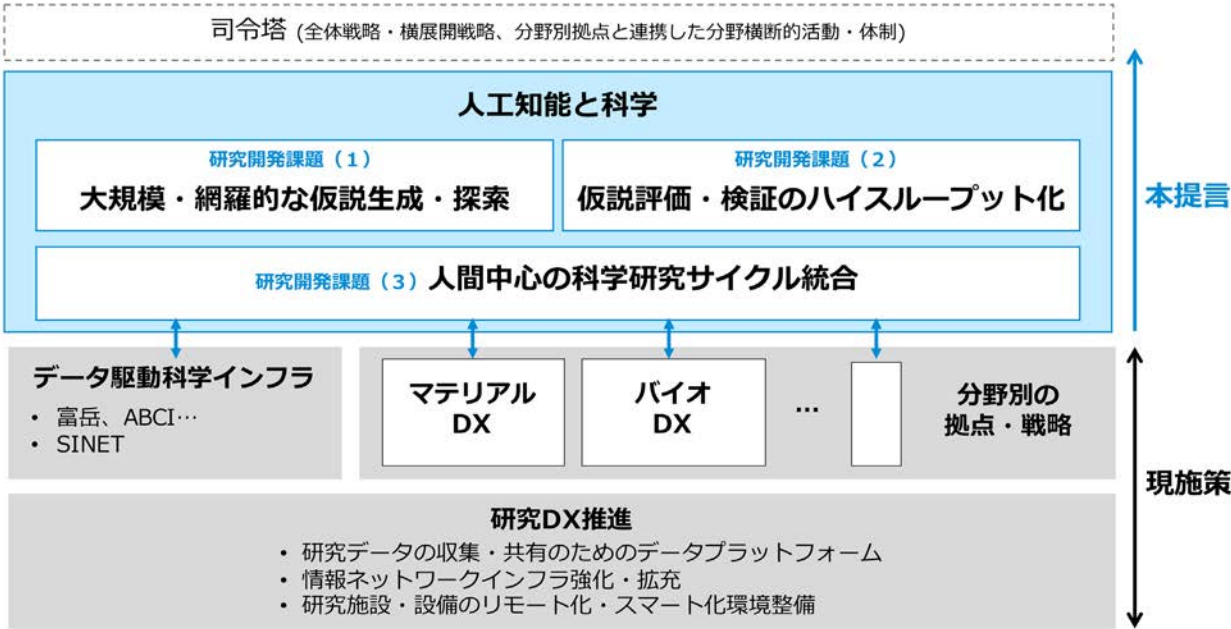


図 本プロポーザルの位置付け

Executive Summary

The state of science and technology in the 21st century is undergoing a major transformation due to the advancement of information technologies (IT), such as artificial intelligence (AI), big data and machine learning, Internet of Things (IoT) devices, and smart robotics. The transformation of research and development (R&D) processes through digitalization is not only improving the efficiency of R&D, but also promoting new discoveries in various scientific areas and creating new scientific methodologies.

In this proposal, we aim to automate scientific research, which is also a promising field of application for AI. We propose the following three R&D themes focusing on the handling of hypotheses.

- (1) Large-scale and comprehensive hypothesis generation and search
- (2) High-throughput hypothesis evaluation and testing
- (3) Human-centric scientific research cycle integration

The automated AI system will be implemented as a human-in-the-loop system that executes a closed cycle of hypothesis generation and verification. This AI system is expected to become a powerful tool for cutting-edge research. For example, in the field of life science and medicine, such an AI system will enable the rapid development of vaccines for new viruses and the rapid discovery of safe and effective drugs. The other AI system in the field of materials science will enable the automatic design and optimization of materials with desired functionalities as well as its synthesis methods. It will also be used by many scientists to test their own working hypotheses and search new hypotheses beyond their cognitive bias. Moreover, the systematization and dissemination of its usage of the AI system in many scientific fields will raise the level of Japan's R&D capabilities.

In addition to the promotion of R&D of platform technologies for the AI system, the government needs to develop human resources and organizations that can freely use AI, big data technologies, and robotics, create a framework for data sharing, and foster communities. In this proposal, we propose the following three aspects of promotion methods.

- (1) Joint-use facility
- (2) Grand Challenge
- (3) Education and dissemination across disciplines

The R&D and operation of AI systems will be conducted in each field for the time being, since the tasks and devices to be automated differ from field to field. As well as the formation of centers of excellence in each field, the establishment of a joint-use facility with a "hub" functions is required. Since there are various possible approaches to the realization of the AI systems, it is desirable to implement a R&D program that sets grand challenges and solicits a wide range of ideas to achieve them.

Incentive design is also important for the sharing of negative data and failures because the quantity and quality of data are key for machine learning. Education and dissemination of mathematics, logic, and other reasoning tools and verification protocols are also becoming increasingly important. In addition to hands-on training, it is desirable to promote R&D with attention to the systematization of education.

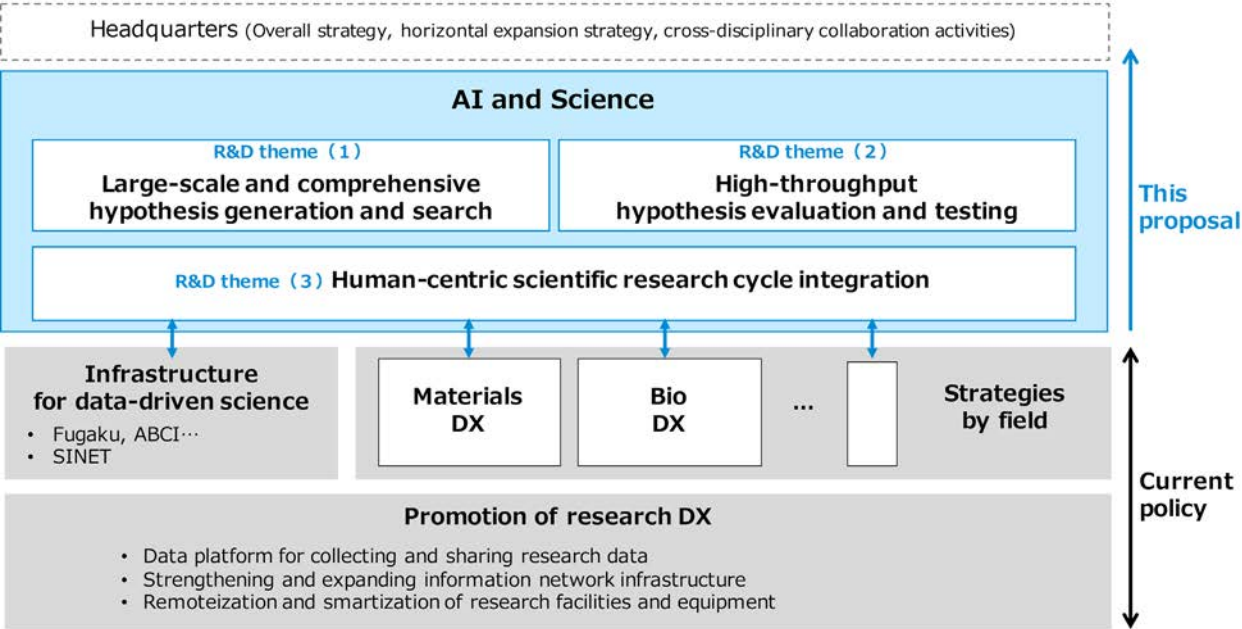


Figure Positioning of this proposal

目次

1	研究開発の内容	1
2	研究開発を実施する意義	3
2.1	現状認識と問題点	3
2.2	社会・経済的効果	11
2.3	科学技術上の効果	12
3	具体的な研究開発課題	15
3.1	自動化レベル	15
3.2	大規模・網羅的な仮説生成・探索	16
3.3	仮説評価・検証のハイスループット化	18
3.4	人間中心の科学研究サイクル統合	19
4	研究開発の推進方法および時間軸	22
4.1	推進上の課題と推進方策	22
4.2	共同利用施設の強化	23
4.3	グランドチャレンジ	24
4.4	分野を越えた教育・普及	26
付録 A	検討の経緯	27
A.1	俯瞰セミナーシリーズ	27
A.2	科学技術未来戦略ワークショップ「人工知能と科学」	29
付録 B	専門用語説明	30
	参考文献	33

1 | 研究開発の内容

ターゲット・ビジョン

深層学習を始めとする人工知能（AI）技術やビッグデータ処理、IoT（Internet of Things）デバイス、センサー、ロボティクスの高度化と普及により21世紀の科学のあり方は大きな変容を遂げようとしている^[1]。IT化・デジタル化を駆使した研究開発プロセスの変革（リサーチトランスフォーメーション）^[2-4]は研究開発の効率化だけでなく、様々な分野での新発見の促進^[5, 6]や新しい科学の方法論をも生み出しつつある^[7-10]。

本プロポーザルでは、AIの応用分野としても有望視される「科学研究の自動化」を目指す。科学研究のプロセスは図1-1に示したとおり、知識、仮説、予測、実験結果、知識というサイクルの繰り返しにより、検証済みの仮説が蓄積・洗練されていく過程だといえる。本プロポーザルは、このような仮説の生成と検証のクロードサイクルを実行できる人間参加型のAIシステムにより、科学的発見の高速化・効率化を狙う。

このようなAIシステムにより、例えば生命科学・医学分野では新型ウイルスのワクチンの高速開発や安全・有効な薬の高速発見、材料科学分野では所望の機能を持つ材料の自動設計・最適化、入力された組成・構造の化合物の合成方法の自動決定などが可能となると期待される^[5, 6]。また、多くの分野において、科学者自身が立てた仮説の検証や、盲点となっている仮説の探索といった使い方もされるだろう。

科学研究サイクルの自動化AIシステムは、最先端の研究競争における強力な支援ツールとなる^[7, 11, 12]ことに加えて、その体系化・普及により我が国の研究力の底上げも期待される^[4]。また、多くの産業での国際競争力にも直結し、様々な分野での多様なAIシステムの実現・運用が期待される。

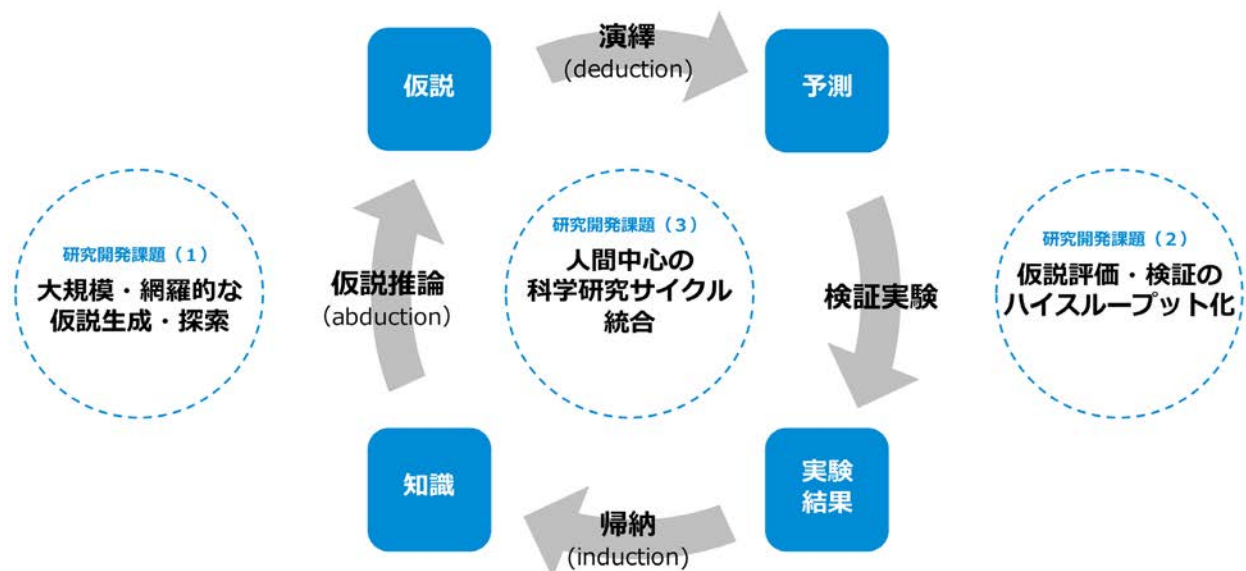


図1-1 科学研究サイクル

具体的な研究開発課題

科学研究サイクルのうち仮説生成や評価に関する部分は、迅速化・効率化のボトルネックであるにも関わらず自動化は限定的である^[7, 13-15]。本プロポーザルでは「仮説」の取り扱いに焦点を当て、以下の研究開発課題を提案する。

- (1) 大規模・網羅的な仮説生成・探索
- (2) 仮説評価・検証のハイスループット化
- (3) 人間中心の科学研究サイクル統合

科学研究サイクル（図1-1）に照らすと、「（1）大規模・網羅的な仮説生成・探索」は左半分を、「（2）仮説評価・検証のハイスループット化」は右半分を主眼とする研究開発テーマである。そしてそれらを構成要素としたサイクル全体についての科学的な理解と実装が「（3）人間中心の科学研究サイクル統合」である。表1-1 にそれぞれについて研究開発テーマの具体例を示す。

表 1-1 研究開発テーマの具体例

(1) 大規模・網羅的な仮説生成・探索	(2) 仮説評価・検証のハイスループット化	(3) 人間中心の科学研究サイクル統合
仮説の大規模生成 - 探索・不完全な情報での仮説推論 - 因果グラフの推定・探索 - 仮説空間の探索の高効率化 既存知識との整合性検証 - 高次元の中間表現の解釈 - 整合・矛盾の迅速評価 - 制約条件や境界条件の設定	実験計画の自動化 - 実験計画の生成・最適化 - バーチャルスクリーニング - ベイズ推定、能動的観測 ハイスループット実験 - 実験ロボットの高度化 - ハイスループット計測 - 高速セルソーター	アーキテクチャ設計 - プラットフォームへの統合 - 知識体系の集積化 - 人間との相互作用の設計 科学の科学 - 科学研究サイクルの理解 - セレンディピティの実装 「発見」「理解」の科学

推進方法

科学研究サイクルを自動化するAI システムは様々な科学分野・産業分野に取り入れられるようになるだろう。その実現には、基盤技術の研究開発と整備に加えて、AI・ビッグデータ技術やロボティクスを自在に使いこなす人材・組織の育成も必要である。本プロポーザルでは以下3つの側面から推進方法を提案する。

- (1) 共同利用施設の強化
- (2) グランドチャレンジ
- (3) 分野を越えた教育・普及

分野により自動化すべきタスクや装置は異なるため、AI システムの研究開発と運用は当面分野毎・タスク毎に行われるだろう。分野毎の拠点形成と合わせハブとしての機能も有する「AI 駆動科学」共同利用施設の設置・運用が求められる。またAI システムの実現方法は様々なアプローチが可能のためグランドチャレンジを掲げ、達成に向けたアイデアを幅広く募るような研究開発プログラムの実施が望ましい。

加えて、機械学習をベースとするAI システムでは、データの量と質が鍵となるため、負例・失敗例の共有を促進する制度も重要である。数学・論理学などの推論ツールや検証のプロトコルなどについての教育・普及の重要度も増している。ハンズオンの訓練に加え、教育の体系化にも留意した研究開発推進が望まれる。

2 | 研究開発を実施する意義

2.1 現状認識と問題点

ここでは、科学の方法論と新たなツールとして利用が進む機械学習との関係と問題点をまとめる。まず、「(1) 科学の方法論」でこれまでに築きあげられてきた科学研究の4つの方法論を紹介した後に、「(2) 人間の認知能力の限界」で科学者が直面する認知能力上の困難を見る。そして「(3) 機械学習の進展」「(4) 仮説生成とラボオートメーション」「(5) 関連する科学技術政策の国際動向」で新しい技術潮流とそれによる科学研究の方法論の変化について現状を把握した後に、「(6) 問題点」で具体的な問題点を述べる。

(1) 科学の方法論

科学には4つの方法論があると言われる^[1]。第1の科学は実験科学（あるいは経験科学）、第2は理論科学、第3は計算科学（あるいはシミュレーション科学）、第4はデータ駆動科学（あるいはEサイエンス）と呼ばれる。データ駆動科学は、データに基づいて科学的な知見や社会的に有益な知見を導き出そうとするアプローチを取る^[11]。

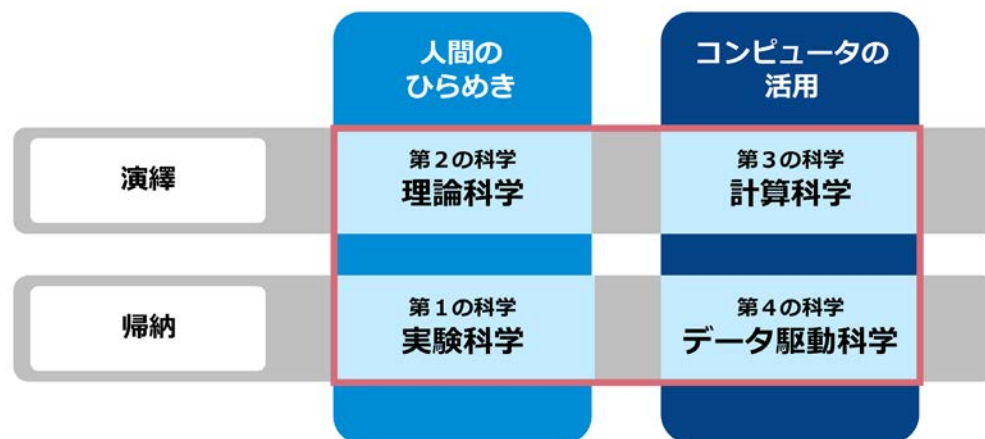


図2-1 科学の4つの方法論

このような科学の方法論のあり方の大きな変化は、研究開発のデジタルトランスフォーメーション（DX）を主体とする「リサーチトランスフォーメーション（RX）」が背景にある。研究開発の現場にデジタル技術が浸透することより、21世紀の科学技術のあり方は大きな変容の分岐点にある^[2, 3]。とくに、データ駆動アプローチと計算理論的アプローチの融合によるシミュレーションの高度化や予測の高精度化、計測技術・センサー・ロボット技術とAI技術の融合によるデータ取得・収集の大規模化・高効率化など、ITは研究開発に要するコスト削減に加えて、科学における新たな発見にもインパクトをもたらし始めている。また、インターネットを介したコミュニケーションは、オープンサイエンスやオープンイノベーションなど、研究プラットフォームをも変化させつつある。

科学的発見プロセスの観点からは、第1、第4の科学はどちらもデータを出発点に法則を探索する帰納的アプローチ、第2、第3の科学は仮説から予測を通じて仮説検証を行う演繹的なアプローチである。ここで、

仮説とは、新しい科学的知識の候補となりうる命題のことである。

この「第4の科学」まで含め、これまで仮説の生成や評価は人間が行っており、自動化は限定的であった。本プロポーザルでは、科学研究プロセス全体の自動化によって、科学研究を加速することを狙う。科学研究の自動化では、コンピュータによる仮説の取り扱いが鍵となる。その際に重要となる推論形式として、帰納、演繹ではない3つめのアプローチに「仮説推論（アブダクション）」が挙げられる^[14, 15]。

科学的発見のプロセスは図1-1に示したとおり、知識、仮説、予測、実験結果、知識というサイクルの繰り返しのにより、検証済みの仮説が蓄積、洗練されていく過程だといえる。このループに入る最初のきっかけとなる出発点の一つは、予想外の事象の観測（新知識の獲得）である。何らかの理由によってそのような予想外の観測が生じた場合、それを説明するためには新たな仮説が必要となる。そして、この新しい仮説が検証可能な予測を導き、自然科学の多くの分野においてはこれを実験によって確かめることとなる。実験による検証では、新しい観測によって仮説の採否あるいは修正がきまる。帰無仮説の棄却を用いた統計検定などもここでされる。このような流れで考えたとき、「知識」から「新しい仮説」に至る生成過程こそが仮説推論である。この推論形式は、仮説から予測を導く演繹や、実験による検証である帰納とは異なっている。

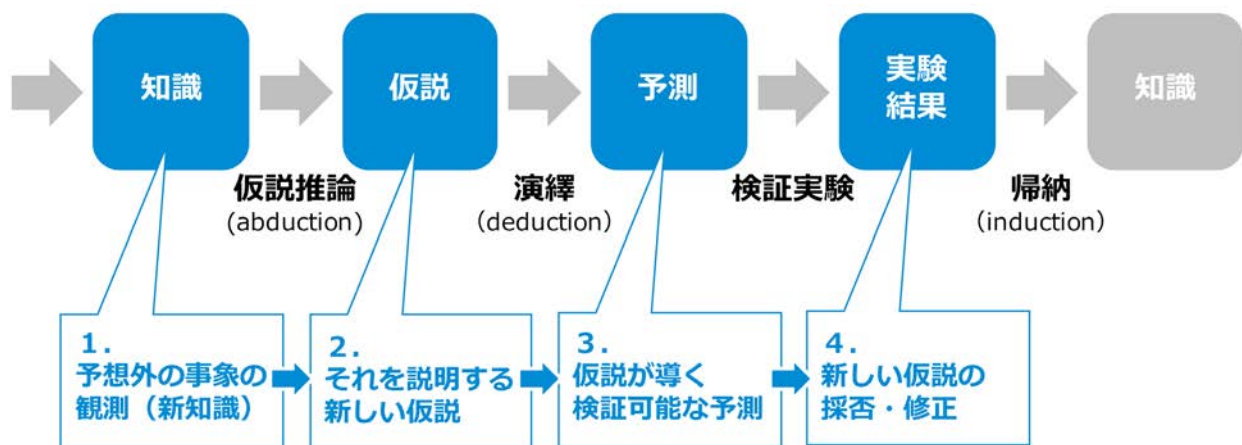


図2-2 予想外の観測と新しい仮説の生成

(2) 人間の認知能力の限界

科学的発見プロセスの自動化が重要視されるもう一つの背景として、人間の認知能力の限界がある。科学という営みが科学者個人あるいは科学者集団で行われる活動である以上、人間の脳や社会性にかかる能力の限界や認知バイアスから逃れることはできない。例えば、多くの科学分野では、すでに自分の研究に関連するものだけでもすべての論文を読むことは不可能であり、新型コロナウイルスの感染拡大など緊急性の高い場合にとくに問題が顕在化する^[16]。

また、自分の仮説に合うデータのみに着目したり、想定に合わなかったケースのみ厳しくチェックしたりといった認知バイアス^[17]があり、それが科学的発見の可能性を狭めているという指摘もある^[7, 8]。表2-1に、科学者が研究を進める上で問題となる代表的な認知バイアスと、対処法についてまとめた。AI技術を活用すれば、このような限界・バイアスを越えた仮説探索・検証が可能になり、これまでと質的に異なる科学的発見がもたらされる可能性がある（図2-3）。

表 2-1 科学者の認知バイアスと対処法^[17]

認知バイアス	
仮説の近視眼	ある1つの仮説を支持する証拠の収集だけに固執し、その仮説の反証となる証拠を探すことを怠ったり、その他の説明を無視する。
テキサスの狙撃兵	ランダムに生成されたデータであっても、その分布の一部だけから何らかのパターンを見つけ出して、新発見のように思ってしまう。
非対称の注意	期待と一致しない結果が得られたときには理論や実験の誤りを詳細にチェックする反面、期待と一致する結果は手放しで受け入れる。
“Just-so”ストーリーテリング	結果がどうであれ、それを合理化するためのストーリーを後から見つける。実際には何も説明していない。
対処法	
悪魔の代弁者	代替仮説を明示的に検討し、それを真っ向から検証する。
プリコミットメント	研究を開始する前に、データ収集と分析の計画を公開すること。
ライバルチーム	研究上のライバルを招き、共同研究をする。
ブラインドデータ分析	本物と見分けのつかない代替データセットを通常通り分析し、最後にブラインドを外す（その後、分析結果は再処理しない）。

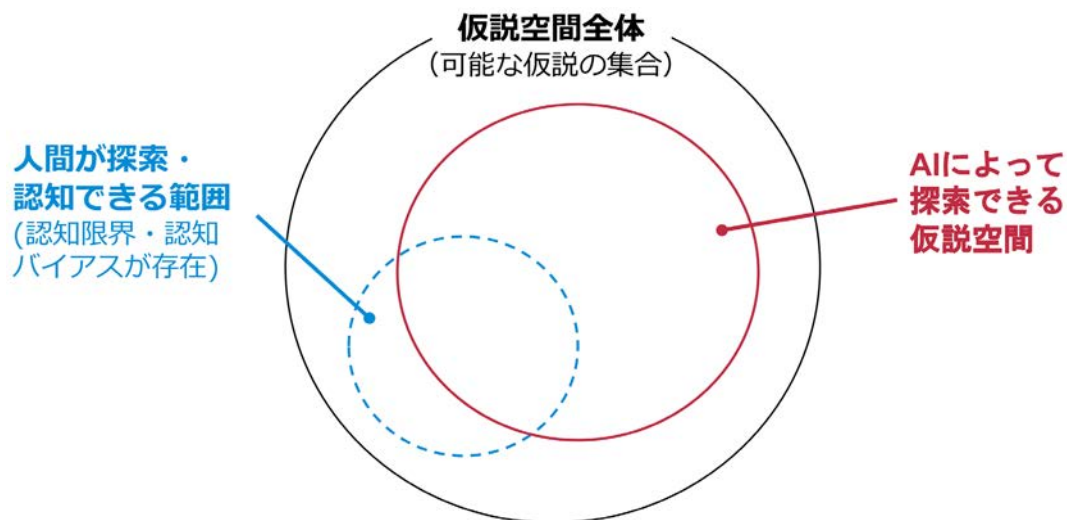


図 2-3 仮説空間全体と人間・AI による探索範囲

現象のモデリングにおける要素還元主義の限界も背景にある。これまで科学は、対象となる現象や実験結果が複雑であっても、それを抽象化、粗視化、階層化、モジュール化、くりこみ、詳細の隠蔽などの手段によって、低次元・線形の関数で近似するモデル化ができ、そのことで多くの分野で成功を収めてきた^[18, 19]。ここでは、「オッカムの剃刀」や「KISS の原理」などと呼ばれるある種の帰納バイアスが暗黙裡に科学者のコミュニティで共有されている。すなわち、できるだけ少数の変数やパラメータ、シンプルな基底関数セットを使い、なるべく線形になるようモデル化するのを良しとする慣習である。

しかしながら生命科学や材料科学などの分野では、対象とする現象のモデリングやそれを通じた理解は、要素還元が困難、あるいは要素に分けてもわからないということが生じている^[20]。システム生物学の分野ではこれは顕著である^[21, 22]。このような複雑な現象を複雑なまま捉える目的で、深層学習など高次元・多パラメータの非線形関数での近似が可能な手法が注目されている^[8]。多くの場合、特定の支配モデルや説明変数

の取捨選択は明示的には行われずに、パラメータの最適化の結果として現象を良く予測するモデルが得られる。なお、これまでも複雑な現象を扱う科学としては、システム科学や複雑性理論などのアプローチが知られているが、そこで用いられるモデルは低次元・少数パラメータの関数である（逆に、そのようなモデルから出発しても、予測される結果が複雑となりうる点が興味の対象である）。

（3）機械学習の進展

ビッグデータからの知識獲得の研究が盛んになり、科学研究においてもITが必要不可欠となっている^[11]。とくに2012年の深層学習の登場により第3次AIブームが到来し、AIの利活用は産業応用だけでなくあらゆる分野の科学研究にも大きな影響を及ぼしている^[23, 24]。中でも生命科学や材料科学分野では、率先して機械学習の手法が取り入れられコモディティツールになり、バイオインフォマティクス^[5, 25]やマテリアルズインフォマティクス^[26-28]といった新しい分野に発展している。これらの分野での代表的な機械学習タスクの例を表2-2にまとめた。

生命科学・医学分野では機械学習手法の成功事例が次々と出てきている^[5]。最も顕著なのは畳み込みニューラルネットワーク（CNN：Convolutional Neural Network）を用いた画像認識である。研究機器からのイメージング画像の解析や、医療画像を入力とする診断支援システムなど活用範囲は広い。2018年にはFDA（米国食品医薬品局）が世界で初めて自律型AI診断システムを承認するなど応用も広がっている。

敵対的生成ネットワーク（GAN：Generative Adversarial Network）や変分オートエンコーダ（VAE：Variational Auto Encoder）の利用も進んでいる。VAEにより未知の化合物を生成する技術が登場、分子インフォマティクスが再興し、創薬に展開されている。2020年に入り、大手製薬企業がAIを活用して創製された新薬候補化合物の臨床試験の開始を公表した。AIシステムの利用により、従来4年程度かかっていたリード化合物の同定を1年未満で実現できるとされている。物質合成や代謝工学などにおいて、実験の自動化（ロボット利用）、ハイスループット化の研究発表が目立つようになっている。

材料科学分野では、新物質・材料設計にデータ分析や機械学習の手法を取り入れた「マテリアルズ・インフォマティクス」に世界中から大きな注目と期待が寄せられている。背景には、理論・実験の進展に加え、コンピュータの演算能力の向上、計測・分析技術の進展、シミュレーション手法の開発など物質・材料科学の進歩とともに、深層学習を代表とする機械学習手法の急激な進展がある^[27, 28]。

マテリアルズ・インフォマティクスを導入すれば、新物質・材料の発見を加速したり、合成・評価の実験回数を減らしたり、製造プロセスを最適化したりすることが可能になると期待できるため、産業界からも注目が集まっている。さらに、物質・材料の状態や機能を記述する新概念や新形式などの開発や、物性や材料特性の理解にもつながり、物質・材料科学にパラダイムシフトを起こすことも期待されている。

深層学習ブームの到来よりかなり以前から、宇宙物理学や素粒子物理学の観測・実験では機械学習手法が用いられてきた。例えば、望遠鏡での遠方銀河や超新星の観測、素粒子実験でのジェットの識別やジェットから出る素粒子の同定など、画像認識技術が標準的に使われてきた。近年では、これらに加えて理論物理学と機械学習の関係も深まっている^[29]。量子多体系の基底状態の記述にニューラルネットワーク型の波動関数を用いる方法^[30]や、ホログラフィー原理に適切な重力モデルを機械学習によって見つける手法^[31]など、量子物性や量子重力理論などでの利用拡大が特徴的である。

機械学習モデルの解釈性（Interpretability）を向上させ、ブラックボックス問題に対処しようとするAI技術は「説明可能AI（Explainable AI, XAI）」と呼ばれ、AIの研究開発としても精力的に取り組まれているトピックスである^[32-34]。とくに、深層学習のような超多パラメータの機械学習モデルは高い予測性能を誇る反面、モデル内部の詳細な情報を人間が直接解釈・理解することは難しい。科学研究の多くの問題設定では、予測性能の高さよりも、むしろ学習されたモデルを解釈し理解することこそが重要な場合が多く、材料科学や生命科学などの分野でもAIシステムの解釈性が重要だと認識は深まっている^[5, 6]。

XAI技術には、もともとブラックボックス型で解釈性の低いモデルの解釈性をあとから高めるアプローチと、

表 2-2 科学研究における深層学習タスクの例

	生命科学・医学	材料科学・創薬
画像認識 (CNN)	・医療画像からの診断 ・イメージング支援	・電子顕微鏡画像解析 ・結晶構造解析
予測 (DNN)	・疾患・薬効の予測 ・診断支援・予防	・組成や構造からの物性予測 ・バーチャルスクリーニング
生成 (GAN、VAE)	・シミュレーション画像の生成 ・遺伝子多型の推定	・分子や結晶の分散表現 ・未知化合物の仮想的な生成

決定木や線形回帰のような解釈性の高いホワイトボックス型のモデルの精度を高めるアプローチが知られ、オープンソースや商用のソフトウェアツールの活用も広がっている。ただし、予測精度と解釈性にはトレードオフ関係があり、説明の目的やAI システムの用途によって求められる解釈性のレベルは異なる。また、解釈・説明はあくまで近似であるため、騙すような説明も作れてしまうという問題もはらむ。そういった点も考慮したXAI の評価も検討されている^[35]。

以上のように機械学習手法は様々な分野において、観測データから統計的な一般法則を導いたり、画像・サンプルを分類したりといったことでかなり成功を収めている。しかし、基本的には帰納的アプローチの範疇であり、仮説の生成や新しい知識の発見とは距離があるといえる。データサイエンスによるアプローチやロボットによる実験自動化で先行する生命科学分野に限ってみても、未知の科学的知識を自動的に発見するシステムは、いまだ実現されたとは言えない状況である^[5]。いずれも、科学研究サイクル（図1-1）の一部分を機械で代替しているに過ぎず、ループ全体の自動化には至っていない。

（4）仮説生成とラポオートメーション

科学研究を自動化しようという研究の歴史は長い^[13]。人工知能分野では、1960 年代のエクスパートシステムによる有機化合物の特定まで遡ることができ、その後もBACON、DENDRAL、EURISKO など研究は続いた。しかしながら、多くの場合、すでに発見されている法則の計算機による再発見などに留まっており、学術的な意味での科学的発見は得られていない^[17]。

AI システムに物理法則を発見させ、その出力の妥当性を既存の物理学の体系と比較することは、システムの動作検証やベンチマークとして重要である。数値データ中の不変量を発見する「BACON」プログラムは、天体運動を記述するケプラーの法則や電磁気学のオームの法則などの法則を「再発見」できた。力学的カオス系である二重振り子の軌跡のデータからその支配法則（＝不変量）を発見するという実験もなされた^[36]。その後も、カオス系や流体力学系などについて、実験データから支配方程式を発見する手法の提案が相次いでいる^[37, 38]。基本的には基底関数のセットなどを人間が与え、その重み付けのパラメータを統計的に（機械学習的に）推定するという手法で、帰納的アプローチの範疇といえよう。また、教科書「ファインマン物理学」に登場する100 の数式を再発見する「AI Feynmann」^[39] や、ネイピア数（自然対数の底）や円周率、リーマンゼータ関数の値などの基本定数に関する未知の予想の発見を目指す「ラマヌジャンマシン」^[40] など、記号操作と機械学習を組み合わせたアルゴリズムの試みも進められている。

自然科学では生成された仮説を実験検証するプロセスが重要である。仮説の生成と、その仮説に基づく検証実験の自動計画、それに基づく実験の実行という一連のプロセス全体を、ひとつのプラットフォーム上に載せる必要がある。材料科学の場合には、仮説生成システムが提案する理論上可能な組成・構造の物質が、合成できるかどうかは一般に自明でないので、ロボットによる試行錯誤を通した合成プロセスの最適化も極めて重要である。

仮説生成から実験実行までの科学研究サイクル全体を（小さいながらも）自動化した先駆的な取り組みと

してRoss King らの「ロボット科学者」^[41-43] が知られている。このシステムは、出芽酵母の遺伝学の領域という限られた仮説空間内においては、仮説生成、実験計画の作成、自動実験装置による実験の遂行という科学研究サイクルの自動化に成功している。ここではSOL 導出 (Skipping Ordered Linear Resolution)^[44] を用いた仮説発見も用いられている。

化学分野での実験自動化の取り組みも積極的に行われている。化合物の合成とそれを迅速に評価・検証するサイクルをAI システムが自動で遂行する「自動走行実験室 (Self-driving laboratory)」での薄膜材料の発見が報告されている^[45]。また、別の研究グループの「モバイルロボット化学者」は、バッチベイズ検索アルゴリズムによって8 日間・約 700 回に渡って自律的に実験を行い、最初の配合よりも6 倍活性が高い光触媒の同定に成功している^[46]。このシステムは、実験室内を移動ロボットが動きまわり、合成から評価までを一貫して行うシステムである。

材料科学分野ではコンビナトリアル合成などのハイスループット合成技術に加えて、評価のハイスループット化も重要となる。例えば、3 元コンビナトリアル試料の構造評価に機械学習を導入することでX 線構造解析にかかる時間を短縮した結果^[47] により、材料予測からハイスループット合成・評価までのワークフローがほぼ同じペースで実行できるようになった。実験の高速化は系統立った訓練データの蓄積にも貢献し、バーチャルスクリーニングの精度の向上にもつながると期待される。このような機械学習の利用による評価の高速化はその他の分野でも見られ、セルソーターなどではむしろ機械的な分類機構の速度がシステム全体を律速するほどである。

このような実験室の自動化では、人間は常に設計目標を設定し、アルゴリズムが数値最適化すべき対象を指定する必要がある。図2-4 に示したように、AI システムと人間の相互作用を通じて、人間が常にシステム全体の目標を設定している。アクティブラーニングにより新しい相変化メモリ材料の発見を行った「CAMEO」システムについて、人間参加型の自動実験システムの重要性と課題が整理されている^[48]。

新型コロナウイルスの感染拡大により、世界中の多くの地域で研究者が実験室に行くことができない状況が多発した。そのため、研究者が実験室に出向くことなく実験を遂行したり、あるいは大人数が集まっての実験を最小限にする試みとして、実験ロボットや実験自動化システムの需要が増大している。

(5) 関連する科学技術政策の国際動向

関連する科学技術政策の動向を表2-3 にまとめる。我が国では、AI による科学的発見の重要性は比較的早期からその重要性が指摘・認識されてきていた^[7]ものの、研究プロセス全体のDX は遅れ気味である^[2, 3]。

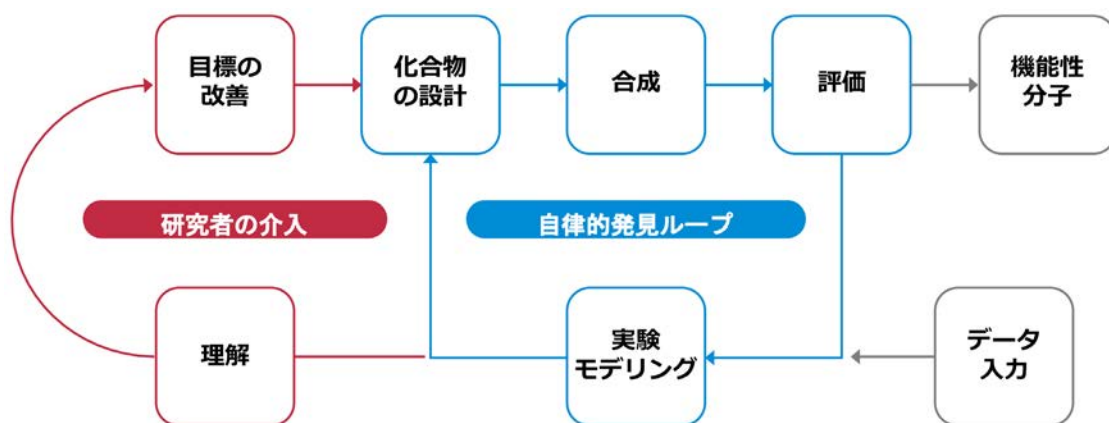


図2-4 自律的な化学実験室^[49]

表 2-3 関連する国際動向

国・地域	状況
日本	・ AI による科学的発見の重要性を早期から提唱^[7] ・ 「AI 戦略2019」^[59]、「第6期科学技術・イノベーション基本計画」^[4]で、AI 人材育成やデータ駆動型研究推進の強化が取り上げられている ・ 実験ロボットの導入や研究プロセスのデジタル化の遅れが見られる^[2, 3] ・ 日本物理学会と人工知能学会の連携企画の実施や、「ディープラーニングと物理学」^[60]のような分野融合の取り組みが草の根的に進行中 ・ 産業界ではビジネスプロセスのDX や実世界ビッグデータへの取り組みが強化されてきている^[61] ・ 創薬企業でのAI 利用も始まった^[5, 62]
米国	・ DARPA が新しいAI 探索プログラムの一部として「Automating Scientific Knowledge Extraction (ASKE)」プログラムを開始^[54] ・ エネルギー省は「AI for Science initiative」を立ち上げ、活動を活発化^[55] ・ Microsoft Research が国際ワークショップ「Physics n ML」を開催^[56] ・ Google はAI・機械学習を応用して科学研究を加速させる「Google Accelerated Science」プログラムを実施。多数の科学者・技術者と協力^[57]
欧州	・ 英国アラン・チューリング研究所が「The Turing AI scientist grand challenge」プログラムを立ち上げた^[12] ・ 産業界ではインダストリー 4.0 など、ドイツでの取り組みが注目される^[11]
中国	・ 国がAI・ビッグデータ研究開発に大型投資を行い、強力に推進している^[11] ・ 深層学習を中心としたAI 研究は米中二強の状況である^[58]

最近になり内閣府「ムーンショット型研究開発制度」の「ムーンショット目標3」に「2050年までに、自然科学の領域において、自ら思考・行動し、自動的に科学的原理・解法の発見を目指すAI ロボットシステムを開発する」「2030年までに、特定の問題に対して自動的に科学的原理・解法の発見を目指すAI ロボットを開発する」が明記されるなど、重要性の再認識と取り組みの強化が始まった^[50]。また、JST 未来社会創造事業の「共通基盤」領域・本格研究では「ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速（研究開発代表者：高橋恒一）」が採択され、ロボットによる生命科学系の実験自動化が進められている^[51]。2021年3月に決定された文部科学省「戦略的創造研究推進事業の戦略目標」には生命科学のパラダイムシフトを狙う『『バイオDX』による科学的発見の追究』が選ばれた^[52]。

AI を実際の問題解決に役立てようとする試みは、チャレンジプログラムの実施などDARPA（米国防高等研究計画局）が主導してきた分野である^[53]。AI による科学研究の加速や科学的発見の促進の重要性も早期からDARPA によって認識され、プロトタイプシステムの公募も行われた^[54]。説明可能AI（XAI）など長期視点での変革につながるAI の基礎研究への政府投資も活発に行われている。近年では米国エネルギー省も「AI for Science initiative」を立ち上げ、インフラ整備や人材育成にも注目するなど活動を活発化させている^[55]。産業界ではMicrosoft やGoogle などがAI・機械学習の科学への応用を試行している^[56, 57]。

英国アラン・チューリング研究所が「The Turing AI scientist grand challenge」プログラムを立ち上げた^[12]。今後の発展が注目される。また、深層学習を中心としたAI 研究は米中二強の状況である^[58]が、中国におけるAI の科学研究への応用への取り組みで目立ったものはまだない。

(6) 問題点

人間の認知能力や身体能力の限界により、様々な面から科学研究は制限・律速されている。ここでは、その問題点を「仮説」の取り扱いの面から「仮説生成・探索」と「仮説検証」の2つに分けて考える。これらの2つの問題点は、図2-5に示したとおり、3.2節、3.3節で述べる研究開発課題とそれぞれ対応している。以下に、具体的な問題点について述べる。

問題点1：人間の仮説生成・探索能力に制限される

探索すべき仮説の数は膨大であり、人間の科学者が網羅的に探索できる仮説空間は限られている。また、2章で示したような認知バイアスの存在から、盲点となるような仮説群も多数発生してしまう。科学研究サイクルの自動化をねらう上での技術的課題のひとつは、AI システムによる仮説生成の自動化である。その柱となる操作は図2-5 の左側に示した「仮説推論 (abduction)」である。これは、帰納の結果得られた統計的なパターンやルールを出発点にして、既存の知識やその他の仮説と照らし合わせ、予測モデルとして演繹によって予測を生み出せるようにする操作である。

観測事実をうまく再現できる予測モデルや、データと精度良く合うような生成モデルは必ずしも一意には決まらず、可能な仮説は無数に存在するのが一般的である。AI システムは、与えられた制約条件や評価関数の元で探索・最適化を行い、少数の有効な仮説を選び出す必要がある。

問題点2：人手による検証実験が全体のボトルネック

科学においては、これまでに蓄積された「知識」も基本的にはすべて「仮説」である。単に実験検証あるいは観測事実をもって「確からしい」ということの程度が違うだけである。AI システムが生成した仮説についても同様に実験検証が不可欠である。AI システムによる網羅的な仮説空間の探索が行われるようになると、図2-5 のように帰納→仮説推論→演繹のステップが高速化され、当然、後段の検証実験も同等のスループットで実行される必要がある。

生命科学や材料科学だけに限らず、多くの分野での実験には今なお人手作業が必要であり、その大部分は単純作業であるものの自動化されていない。また、一部はロボットや測定機器などで自動化されていたとしても、その装置の制御パラメータの指定や装置間でのデータの連携などは人手が必要となっている。そのため、AI システムが生成する仮説が膨大となると、実験検証のスループットが全体を律速することとなる。

このようなデータ取得の自動化や検証実験のハイスループット化には、ロボットの導入が不可欠である。そして、実験ロボットと仮説生成プロセスを組み合わせ、実験データからの新しい仮説の生成と、その新仮説を検証するための実験の遂行のサイクルを、ハイスループットで回すことが求められる。

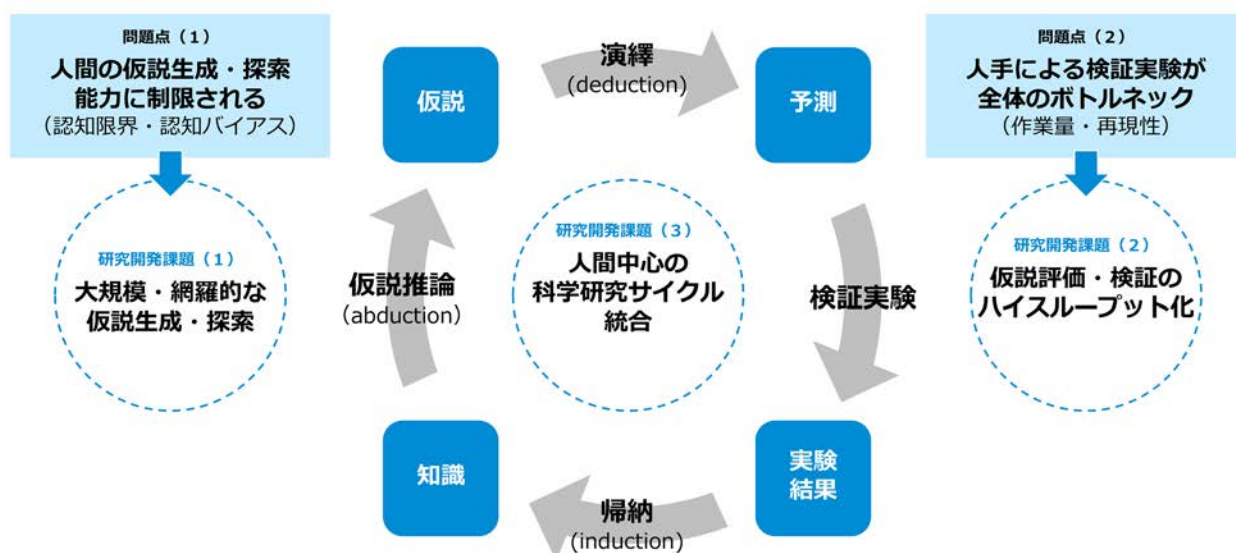


図2-5 問題点と研究開発課題

2.2 社会・経済的效果

(1) 研究開発力の強化

研究開発のDXとそれを通じた付加価値の高い研究成果の創出、そして日本の存在感の発揮が「第6期科学技術基本計画」^[4]で強調されているように、IT活用は研究競争力・産業競争力の鍵である。AI・ビッグデータ活用によって問題解決プロセスが進化し、科学研究の世界でデータ駆動型科学が発展した。科学研究サイクルの自動化は、科学的発見の可能性拡大にもつながると期待されている。

AI活用が適する問題領域では、そのための技術や方法論を手にした者が、科学的発見の急拡大、研究のハイスループット化を達成し、圧倒的な研究競争力を得る可能性がある。そのため、これに向けた技術開発や基盤整備、人材育成の重要性が急速に高まっている。米エネルギー省は「AI for Science initiative」を立ち上げ、活動を活発化している^[55]。

現在までの深層学習を中心とした機械学習技術（それを実現する計算機システム技術も含む）の進歩スピードを鑑みれば、機械学習を援用した科学研究が多くの成果を生み始めるのはもはや時間の問題である。この新しい方法論・ツールを手にした者のみが、研究開発における国際競争で優位に立てる。我が国の科学技術研究の多くの分野は他の先進国から後れをとっており、機械学習の援用を早期の段階から取り入れる緊急性がある。

(2) 産業の拡大と国際競争力の確保

研究開発・技術ベースの産業における国際競争においても、機械学習の援用による科学研究の加速が今後の優位性の鍵となると予想される。例えば、新材料・医薬化合物の発見の加速や、材料合成や機械工学におけるパラメータ最適化・プロセス最適化などの面で、コスト削減や付加価値の面で優位に立つことが可能である。反対に、科学研究のDXや科学研究サイクルの自動化に着手しなければ産業の面でも日本は後れをとることになる。

中でも、化学、材料、創薬などの産業分野では、新しい化合物の創出や特性の改善、生産プロセスの効率化などが既存産業の競争力を支えるだけでなく新産業創出の契機ともみなされている^[5, 6]。目的の機能・特性をもつ化合物を探索し、合成方法を確立して実用化に至るまでには、通常、多くの試行錯誤が必要であり、これが材料開発や創薬に長い時間がかかる要因となっている。たとえば、新薬のためのリード化合物の探索には4～5年かかり、それから臨床試験や国による承認審査を経て市場に出る。新材料についても、リチウムイオン二次電池の例では大学の研究室で概念実証されてから製品として市場に出るまでおよそ20年もの歳月を要している。これは、通常、新材料の発見時には、市場が求める安定性や安全性、あるいは製造コストなどの要求を満たさないため、その改善や最適化に時間がかかるためである。

このように研究開発に大きく依存した産業分野では、開発や改良に要する時間の短縮が、イノベーション創出に直接つながり、産業の活性化に大きく寄与する。ロボットによる実験自動化やAIシステムによる科学研究サイクルの自動化で、開発された新規化合物や新材料が市場投入されるまでの時間を短縮できると期待されている。2020年には、大日本住友製薬が英Exscientia社と共同でAIを活用して新薬候補化合物の探索を短縮することに成功、臨床試験を開始するなど注目されている^[62]。このようなAIシステムによるリード化合物の探索高速化は、製薬企業にとっての経済的なメリットに加えて、新薬を待つ患者にとっても極めて重要な意味をもつ。

2.3 科学技術上の効果

(1) 分野を越えたインパクト

本プロポーザルが提案する科学研究サイクルを自動化するAI システムの大部分は汎用技術として、科学研究のあらゆる分野で利用が進むものと期待される。AI システム導入によるメリットの代表的なものは、

- (1) 人間の認知バイアスのない仮説空間の探索が可能
- (2) 単純なモデルで書けない、スケールの狭間に落ちるような現象もモデリング可能
- (3) 必要な性能からエンドツーエンドで直接設計可能（逆問題）

などである（図2-6）。AI システムによる仮説生成が行われるようになれば、膨大な数の仮説を網羅的に探索することが可能になり、これまで人間の認知限界や認知バイアスなどで限定されていた外側の領域の仮説が発見される可能性が高い（もちろん、実験による検証は必要）。また、深いニューラルネットワークなど高次元・非線形の関数による近似は、これまで要素還元的には扱いにくかったスケールをまたがるような現象や複雑な系のモデリングを可能とするだろう。また、逆問題（システム決定問題）の取り扱いが容易になれば、必要な性能から制御可能なパラメータまでをエンドツーエンドで結ぶような設計も可能になる。

国連「持続可能な開発目標（SDGs）」^[63]に見るように環境問題や人口問題など現代社会の抱える課題は複雑・多様化し、必ずしも自然科学のみによって答えられない問題（トランスサイエンス^[64-66]）も増えている。このような問題に対し、汎用的な問題解決法であるAI システムを利用した研究は、既存の学術分野の枠を越えて学問の発展に寄与すると期待される^[4]。また、これに加えて、実験ロボットやAI システムを通じたデータ収集やデータ解析には再現性や透明性があり、「責任ある研究・イノベーション（Responsible Research and Innovation：RRI）」の取組みとしても重要である。とくに、実験・解析プロトコルの定式化と公開・共有によってデータのねつ造や改ざんなどの研究不正への予防効果が期待できる。

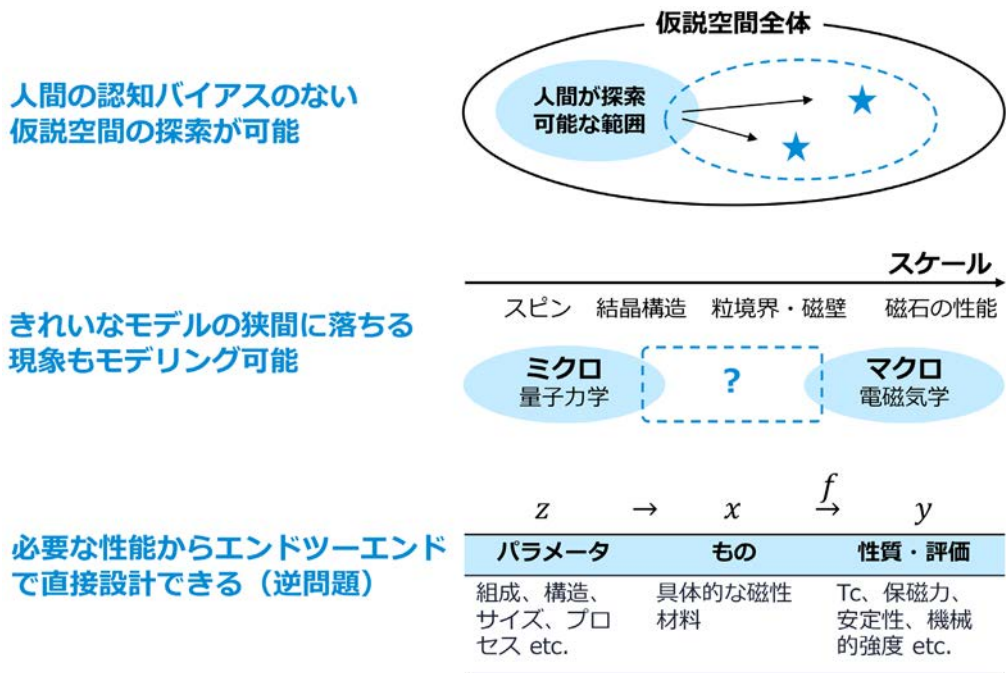


図2-6 科学技術上の効果

(2) 分野ごとの効果

生命科学・医学分野では、AI システムによる科学研究サイクルの自動化は、いくつかのノーベル賞級の発見につながるものと期待されている。例えば、生物学における新しい原理や法則の発見、脳の仕組み解明、癌の治療などが挙げられよう。また新薬やワクチン製造の高速化・高効率化も見込める。新しいウイルスに対するワクチンの開発期間短縮や、新しい病気に対する安全な薬の探索の効率化、特定の細胞状態を回避するための新薬や治療法の高速自動設計など、タスク特化型のAI システムは社会要請の面からすぐに必要であり、早急に普及が進むと考えられる。

これに加えて、AI システムを伴う自動実験施設（スマート実験室）は生命科学分野の研究の標準的なプラットフォームとして幅広い研究分野に普及し、その上でデータやプロトコルの共有や知識の交換などが促進されるものと期待される。このようなプラットフォームとしてのAI システムは、幹細胞や酵母、あるいは合成生物学などの微生物や細胞培養をベースとする研究テーマでまず導入が進むと考えられる。大規模なデータリポジトリとの連携も重要となるだろう。

材料科学分野は、探索すべき仮説空間の大きさや、理解すべき現象の複雑さから、AI システムによる科学研究サイクルの自動化から最も恩恵を受ける可能性が高いと考えられる。また、先述の通り実験自動化による開発期間の短縮も大きなメリットである。典型的な問題設定は、必要な性質をもつ材料とは何で、それをどのように合成すべきかという逆問題である。機械学習をベースとするAI システムは、この問題に対し、特性から合成方法をエンドツーエンドで導き出せるものと期待できる。今後も、対象とする仮説空間の探索範囲やゴールの設定は人間が行う部分が大きいと考えられるが、一定のクローズドシステムの中では、AI システムが自律的に探索し、既存材料よりも格段に優れた材料を自動的に多数発見するようなことも実現されると思われる。

また、人間からの入力なしに信頼度の高い第一原理計算を行ったり、その反対に、計算結果の信頼性や実験との整合性確認などを自動で実行するシステム、あるいは電子顕微鏡などの計測の全自動化も、合わせて実現されるだろう。

科学研究サイクルの自動化は生命科学や材料科学以外のさまざまな分野に波及すると期待される。科学研究サイクルの自動化によるメリットが期待できる分野として、対象とする現象の複雑さやデータの豊富さの面から注目されるのは地球科学である^[67]。この分野では、数値シミュレーションに観測データを取り込むデータ同化^[68]に加えて、物理ベースのモデリングと機械学習との統合が進むと期待される^[69]。これにより、例えば、過去の観測結果が殆どない地域の流域水文モデルの構築やそれに基づく洪水予測、降雨予測に基づく水管理システムなどが可能となる。また、いわゆる「カオスの壁」を超える気象予測の実現や、予測可能期間の延長（季節内から季節スケール＝数ヶ月）も期待される。そしてそのような季節内気象予測に基づいて、水資源や食料、洪水や干ばつ、疫学などのモデルと気象モデルとの統合も進むと考えられる。

(3) 科学における「理解」の広がり

科学研究サイクルの自動化は、科学研究の方法論に大きな変化を与えうる。これは人間と機械の分担のあり方や社会的受容にも関係するため、社会・経済的效果と科学技術上の効果にまたがるような影響である。

AI システムを用いることにより、人間の認知バイアスのない仮説空間の探索が可能となり、科学的発見の可能性が広がると期待される^[7]。また、従来のモデルの狭間に落ちてしまうような複雑な現象を、人間に扱えない規模の超多パラメータのモデルによってモデリングすることも可能となるだろう^[8]。また多くの機械学習モデルは、これまで扱いづかった逆問題（システム決定問題）にも有効と期待される。このようにAI システムを用いた仮説の網羅的探索や検証、深層学習などによるモデリングに加え、実験ロボットによる試行錯誤の時間短縮も可能となり、人間の能力限界や認知バイアスを越えた科学的発見が期待できる。

一方で、深層学習などブラックボックス的なAI を用いた場合に、科学者がAI システムの判断過程を把握できないことで、現象の理解という科学研究の本来の目的を喪失する「科学の疎外（alienation）」^[9]も危惧されている。また、応用によっては精度よい予測ができれば（短期的には）それでよいとすることもできるが、

新医薬品の承認審査では作用機序の説明が求められるなど、完全にブラックボックスでは不都合が生じるケースも見られている。科学研究に関わらず、AI システムの導入により人間の役割の変化は多くの分野で予想され、人間と機械の役割分担のあり方は今後大きく変わると考えるのが自然である。

機械学習モデルを用いた現象の近似的な表現と高精度の予測は「何をもって科学的に理解したとするか」という「理解」の定義に広がりをもたらすと考えられる。科学哲学の文脈では、モデルを用いた現象の解釈や説明こそが主であり、「理解（understanding）」は長らく副産物としてしかみなされてこなかった^[19, 70]。これまで、科学的な理解とは、少数の法則への還元や、因果関係などの作用機序を明らかにすることだと考えられてきたが、決定的な定義はない。科学的理解が「わかりやすい（intelligible）」理論を必要とし、そのわかりやすさは、その分野や時代の科学者コミュニティで共有されているスキルによって決まるとする考え方もある^[71]。つまり、時代や分野とともに、科学的な「理解」ということの内容は変わりうるという。このような物理学の歴史の中で数多く繰り返されてきた「理解」を巡る論争と似た構図は、数学における「証明」にも見ることができる。数学では、当初コンピューターを用いたしらみつぶしの証明は数学的証明とはみなされてこなかったが、現在では計算機援用証明として、一定の地位を認められている^[72]。

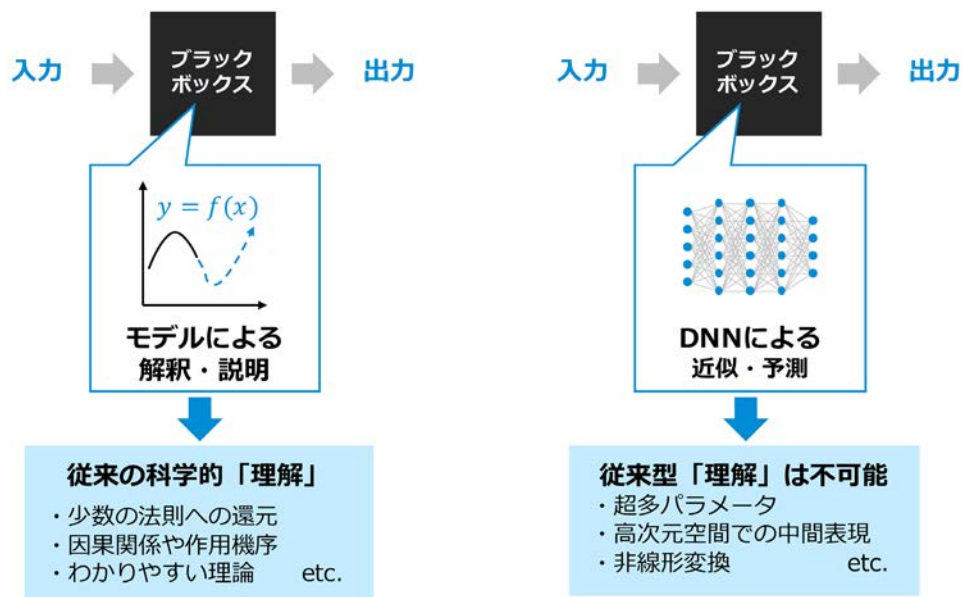


図 2-7 科学的「理解」の広がり

（４）社会におけるAI として

科学研究におけるAI の利用については、その技術が社会に実装されていったときに起こり得る、社会や人間への影響、倫理的・法的・社会的課題（Ethical, Legal and Social Issues：ELSI）を見通し、あるべき姿や解決策の要件・目標を検討しながら制度設計や技術開発を行う必要がある。

一般的には、AI 技術は人間の知的作業をコンピューターで代行する可能性を広げることで、社会における人間の役割を変え、人間の働き方やモチベーションにも影響を及ぼし、社会の仕組み・あり方も変貌させる可能性をもつとされている^[11]。そのような変化の負の側面として、AI が職業を奪ったり、プライバシーを侵害したりといった不安・懸念が指摘されている。このようなELSIのうち、「人間の意思決定のためにAIに頼りすぎると、人間の判断力が低下するのではないか」「生成系AI が作品を自動生成したときの著作権の扱いをどうするか」などの問題は、とりわけ本提案に関係が深い。

現状の技術水準からするとこのような課題が顕在化するのはいかなり未来のことになるが、起こり得る影響・課題を事前に議論・把握し、制度・技術の両面からの対策を今の時点から検討開始することは有意義であろう。

3 | 具体的な研究開発課題

この章では、目指すべき目標を「3.1 自動化レベル」で整理したうえで、「2.1（6）問題点」で示した2つの問題点を解決するための研究開発課題として「3.2 大規模・網羅的な仮説生成・探索」「3.3 仮説評価・検証のハイスループット化」「3.4 人間中心の科学研究サイクル統合」をそれぞれ続く節で具体的に提案する。

3.1 自動化レベル

取り組むべき具体的な研究開発課題の理解とその研究開発の推進上で重要なのは、定性的な達成度の共有とそれに基づく定量指標による技術的な進展の追跡である。ここでは、自動運転車におけるレベル分け^[73]に倣い、科学研究サイクルを自動化するAIシステムの自律度合いを表3-1のように5段階に整理した^[74]。

レベル1とレベル2はそれぞれ計算科学（第3の科学）とデータ駆動科学（第4の科学）であり、図1-1の「帰納」や「演繹」操作をコンピュータが行うのみであり、仮説推論や検証実験は自動化されないとする。レベル3以降が本プロポーザルが目指す科学研究サイクルを自動化するAIシステムである。

表3-1 科学研究サイクルの自動化レベル

レベル	内容	情報	ゴール
1	計算科学（第3の科学）。明示的に与えられたモデルに基づいて数値シミュレーションし、演繹によって予測を出力する。	完全	直接的
2	データ駆動科学（第4の科学）。与えられたデータの統計性やパターンから帰納して、知識を抽出する。	完全	直接的
3	特定の閉じた系で完全情報ゲームとしてAIシステムが探索・最適化を行う。関係する全ての要素のデータが揃っており、モデルに不明な変数はないと仮定する。ゴールや評価関数は人間が明示的に機械可読な形で与える。	完全	直接的
4	開放系での不完全情報ゲームとしてAIシステムが探索・最適化を行う。環境との相互作用など、関係する全ての情報が必ずしも明らかでない。データの欠損やモデルに未知の変数があることも仮定する。レベル3同様に、ゴールや評価関数は人間が明示的に機械可読な形で与える。	不完全	直接的
5	開放系での不完全情報ゲームとしてAIシステムが探索・最適化を行う。レベル4と同様に、関係する全ての情報が必ずしも明らかでない。これに加えて、ゴールや評価関数は間接的にしか与えられない。AIシステムは、ゴールや評価関数についての探索と最適化（メタ最適化）を行い、人間に提案することができる。	不完全	間接的

レベル3では、対象とする系についての情報は全て与えられていると仮定できる問題設定の中で、AIシステムが完全情報ゲームとして仮説空間の探索・最適化を行うものである。全ての必要な観測データが得られており、モデルにも未知の変数はないと仮定し、ゴールや評価関数を人間が明示的に与える。

レベル4になると、情報は必ずしも完全と仮定できない状況でも、AIシステムがロバストに動作することが求められる。対象とする系が開放系で、外部環境との相互作用があるなどの場合には、すべての必要な情報が揃っていると仮定することは非現実的である。また、データの欠損や、モデルに未知の変数があったとしても、AIシステムは安定的に動作する必要がある。ゴール設定や評価関数は人間が明示的に与える。

レベル5では、ある特定のゴールについての不完全情報ゲームをAIシステムがプレイするだけでなく、ゴールそのものの探索や最適化を行う必要がある。レベル4までは直接的に与えられていたゴールや評価関数は、このレベルでは間接でしか与えられず、そのような人間のあいまいな要求に対しても、適切なゴールをAIシステムが自ら設定し、人間に提案することを可能とするものとなるだろう。

このような自動化レベルの進展にあわせて、人間の担う役割も変化していく。レベル1や2では仮説推論、モデル明示、実験検証、帰納、帰納結果の解釈、演繹、実験検証など図1-1に示したサイクルの大部分を人間が担う必要がある。レベル3以上になると、人間の役割はゴール・探索範囲の設定や、価値基準（評価関数）の提示、結果の解釈や理解、全体の意思決定などに重点が移るだろう。レベル4までは、科学的な発見の新規性や重要度などの評価（価値判断）は人間が行うが、レベル5ではそのような評価関数を直接的に与える必要はなくなる。このレベルでは評価関数自体をAIシステムが探索するため評価関数そのものを与える必要はないが、人間は評価関数の評価関数を与えるという間接的な価値判断の役割を担う。

3.2 大規模・網羅的な仮説生成・探索

（1）仮説の大規模生成・探索

科学研究サイクル（図1-1）は仮説の生成とその仮説の検証という2つの大きな要素に大別されるが、技術的に未開拓な領域が仮説の生成の自動化だとされている^[7]。人間が未知の科学知識を発見するとき、既存の理論では説明できない観測事実が得られた場合に、その既存知識に欠けている部分を補うような仮説を立てることが多い。そして、そのような新しい仮説に新規性があり（＝これまで誰も考えたことがなく）、実験検証した結果、十分確からしいと分かれば、新発見と見なされる。このような思考の流れを計算機で行うのが目標である。具体的には、AIシステムは論文や実験結果などのデータから抽出された知識に基づき大規模に仮説の生成を行い、生成された仮説群のうち有望ないくつかが後段の検証プロセスに回されることになる。

仮説は知的基盤がまったくないところから新しく作るのではなく、与えられた背景知識と観測データに基づいて帰納と仮説推論を通じて生み出すことになる。その際に利用される背景知識を機械可読な形で構築・整備することは重要である。自然言語処理による論文などからの知識抽出、オントロジーの整備、実験条件やメタデータの整理などが必要である。

システム生物学の場合には、背景知識や観測データの多くは論理表現を用いてモデル化された、遺伝子・タンパク質・代謝物質の相互関係ネットワークなどである。人工知能研究における知識表現もやはり「節」と呼ばれる論理式で表現されることが多く、AIシステムによる推論とシステム生物学の研究には一定の親和性がある。このような「節」の集合を背景知識として用い、単位節の連言式として新しい仮説を出力するという定式化が多用される^[14]。生成された多数の仮説の中から確率値などによりランキングし、最尤仮説を出力する手法が提案されている（仮説推論システムの構成は図3-1のようになる^[75]）。

人間の常識では考えられないような仮説まで含めて、大量の仮説を生成・探索することとなるが、完全にランダムあるいは全探索のようなことは計算資源効率的に見て実用的でないだろう。従って、ある種の制約条件、境界条件の元での仮説生成・探索が求められるが、この条件はレベル5であっても人間の手によって慎重に与える必要がある。仮説は、論理式のような形を取る場合や、因果グラフなどの形状をとることも想定され、その中での探索の高効率化が求められる。

データから知識を抽出する部分では、非常に多くのパラメータで記述される複雑な現象から深層学習を用いて規則性を見出すことも考えられる。そうした場合に得られる知識は、人間が理解できる形式にはなっていないことが想定される。そのため、高次元の中間表現の解釈や予測結果の事後説明などAIの説明可能性に関する研究開発が重要となる。

(2) 既存知識との整合性検証

有効な仮説の生成を効率よく行うためには、膨大な既存知識との整合性チェックが欠かせない。人間が仮説を生成する場合には、全く何の基盤もないところから思いつきで生成するわけではなく、多くの場合は膨大な知的基盤に立脚して生成するものである。仮説生成の自動化においても、新たに生成された仮説の既存の知識に対する整合・矛盾を迅速評価するしくみが必要である。

ただし、科学研究における「知識」はある意味ですべて「仮説」であり、実験検証を経て「確からしい」ということの程度が違うだけで、仮説と知識の間にそれほどの大きな違いはない。自動的な仮説生成においても、あまりに既存知識と矛盾しすぎるものは予め除外しておく必要があるが、比較対象としている既存知識のほうの間違っていたとなるケースも科学の歴史において多数知られているため、多少の矛盾を許容するような制約条件の設定や探索アルゴリズムの設計が鍵となるだろう。仮説の評価には、人間の価値観・帰納バイアスなども考慮する必要があり、技術的にチャレンジングであるが科学的な発見や理解の本質的な部分である。

AIの研究開発としては不完全な知識のもとでの推論や、ノイズに頑健な記号推論、機械学習と知識表現・推論の統合などの研究開発が必要である。また、一般に、対象領域の専門的知識の獲得は簡単ではないためその領域での専門的な背景知識や言語に依存しない形での一般的な推論（メタ推論）の実現も重要である。

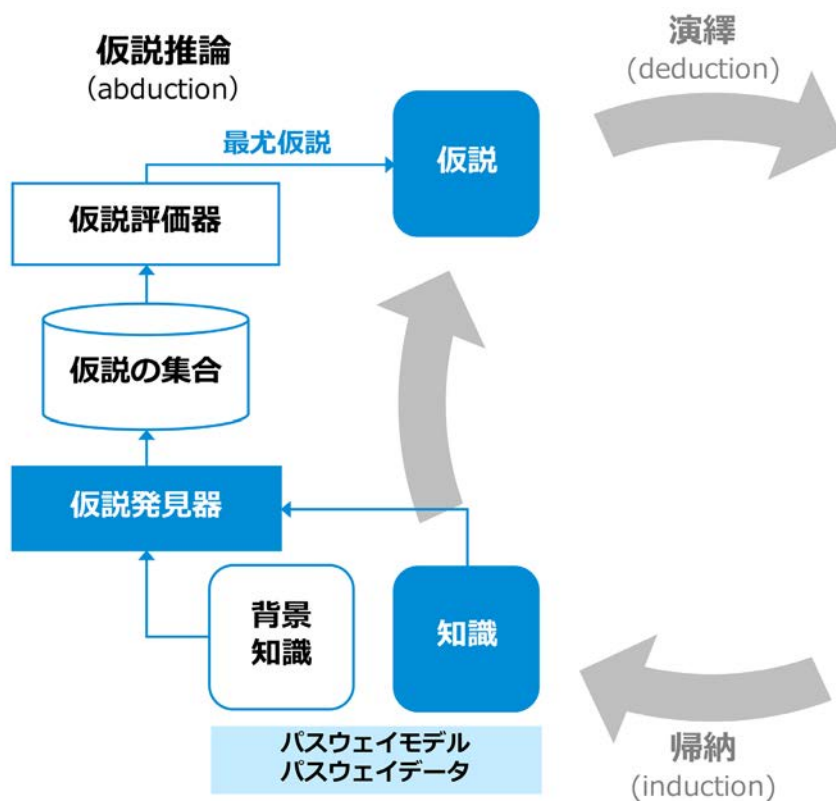


図3-1 システム生物学で提案されている仮説発見プロセス^[75]

3.3 仮説評価・検証のハイスループット化

(1) 実験計画の自動化

生成された新しい仮説に基づいて、その検証のための実験計画の自動化と、実験そのもののハイスループット化が必要となる。仮説検証(やその推定精度の向上)に必要な検証実験は時間・コストの観点からは、ロボットによって実験を実行するにしても、その回数を極力削減したいというモチベーションがある。

材料科学や創薬の分野では、新規仮説として提示される多数の化合物について、興味ある物性値を数値シミュレーションによって求め、実際に合成実験に供する化合物を絞り込む「バーチャルスクリーニング」と呼ばれる手法が多用される。高精度の量子化学計算や第一原理計算、あるいは分子動力学法を用いたドッキングシミュレーションなどの計算量は大きく、膨大な化合物の全てについて計算できない場合も生じる。そのような場合には、少数の化合物についてのシミュレーション結果を教師データとして、教師あり機械学習によって数値計算をバイパスするということが多用される^[76-78]。

これに加えて、仮説の検証に最も効果のある実験条件をベイズ推定を用いて割り出し、実験計画を最適化したり、能動的観測を行ったりする手法の開発も重要な研究テーマである。

(2) ハイスループット実験

実験ロボットなどによる物理的な実験の自動化・高速化・低コスト化も不可欠である^[79]。膨大な仮説の探索に対応し、必要となる実験の数は膨大になると考えられる。実験手法や手順も広範で複雑なものとなり、それらを高速にかつ正確に実行するには、ロボットが必要である。例えば、生命科学分野ではセルソーターの物理的な制御スピードや、材料科学分野における触媒の合成・評価などの所要時間など、全体のプロセス中の時間的なボトルネックになっているケースもあり、ここでのブレイクスルーはハイスループット実験成功の鍵をにぎる。また、ハイスループット実験から算出されるデータの蓄積と整理も重要な技術課題である。

実験自動化ロボットの導入は作業のスピードアップだけでなく、実験プロトコルの標準化や共有など、実験の再現性確保の意味でも重要である。離れた地点で同じ条件設定の実験を同じ品質で行い再現性を確認することや、開発された新しい実験プロトコルの評価なども、ロボット化によって容易となる。

現状では、ひとつひとつの測定や実験操作の自動化は進んでいるが、実験プロトコル全体で見ると、自動化済み操作の間に人による手作業が入るのがほとんどである。このような自動化されていない「つなぐ部分」はボトルネックとして残り、実験全体の自動化・ハイスループット化を妨げることになる。搬送ロボットや移動ロボットの導入、実験・計測機器のネットワーク化などを進め、相互に連携するシステムを構築する必要がある。また同時に、実験パラメータや稼働ログなどの取得と蓄積、実験プロトコルを記述する言語（ある種のプログラミング言語）の開発、熟練技術者の暗黙知の言語化・データ化などを通して、計算機によって実験プロセスを最適化できるように形式化することが重要である。

ロボットの導入や機器のネットワーク化による実験の自動化・高速化に加えて、実験対象の整備も重要な課題である。とくに、研究対象自体を操作・観測できる実験基盤と、仮説から演繹的に導き出される予測（これが実験検証に供される）の数値シミュレーション環境の2点が整っていることは、プロセス全体の自動化にとって重要である。例えば、細胞生物学では、研究対象となる細胞をコントロールされた環境下で飼育でき、細胞を操作するロボット実験技術も整っている。加えて、次世代シーケンサーや蛍光顕微鏡などを用いたハイスループットの大量データ取得が可能であるため、予測モデルをデータに基づいて構築する基盤が整っている好例と言える^[10, 15]。材料科学も、コンビナトリアル合成装置による制御環境下での試料準備や、イメージングセンサーを利用したハイスループット計測、そして第一原理計算による数値シミュレーションなど、個別の要素は整備されている^[6, 28]。

3.4 人間中心の科学研究サイクル統合

(1) アーキテクチャ設計

各種の要素技術をハードウェア・ソフトウェア的に1つのプラットフォーム上に統合し、科学的発見プロセス全体を閉じたループとして一貫して自動化することが極めて重要である。とくに、多種多様な実験データやシミュレーションデータ、そして学術論文や実験結果のデータベースをどのように位置づけるか、そして個別のサーバーなどに分散している知識体系を、いかに計算可能な形で集積化し、体系的に蓄積し続けるかといった、データの取得と蓄積を中心とする自動化システム全体のアーキテクチャ設計は極めて重要な課題である。

現状では、実験データや論文などは人手でキュレーションしてデータベースに手入力している状態である。先述した実験の自動化が進めば実験プロトコルとともに均一な実験データが大量に出力されるようになり、データベースへの入力作業の自動化も必要になるだろう。その上で、既存の専門知識への記号接地などを通して知識化できれば、次の仮説推論に使える状態になる。

これと合わせて、データから抽出された知識が既存の知識体系あるいは他の分野の知識体系と矛盾していないかどうかの自動チェック機構が必要である。この部分は、矛盾が見つかった場合にどちらかが間違いなのかそれとも新発見につながるヒントなのかの峻別など、技術的なハードルは高いと考えられる。何をトリガーにこのループを作動させるかといった問題設定や、ループが巡る探索領域の境界設定は、当面は人間が決めるものと考えられるが、その部分のメタな探索（＝境界設定の探索）についても自動化する可能性を探索することも有意義であろう（これは表3-1における自動化レベル5に相当する）。

このAIシステムのユースケースとして、科学者が自身が立てた仮説の検証に使ったり、自身では思いつかない仮説にどのような物があろうのかを探索したりといった使い方が考えられる。KJ法やPREP法、TRIZ法などの発想法との組み合わせも有益だろう。そのため、自動化された科学的発見ループを、予め人間とのインタラクションを取り入れた形にデザインしておくのが良いだろう。その意味では、このAIシステムは人間協調型で、人間と対話しながら科学研究を進めるシステムとなるだろう。

(2) 科学の科学

科学研究サイクルの自動化を実現する上で、基盤技術整備に加えて、科学研究プロセス自体を研究対象とする、いわゆる「科学の科学」も重要である^[80]。セレンディピティなど科学的発見に重要と考えられるプロセスの解明や、それをAIシステムに取り入れるような構成論的アプローチの研究などを行う必要がある。

先述した研究開発課題のうち科学分野ごとに進めるべきものと、共通技術としてくり出せるものの峻別も重要である。表3-2にはセミナーシリーズ（付録A）で指摘された分野ごとの課題をまとめた。仮説推論に用いる既存知識や前提条件、帰納バイアスなど、そのものは分野依存であるがそれをデータベース化や機械可読化する技術は分野を越えた共通基盤技術となるだろう。大規模データからの知識抽出^[81, 82]や各種の機械学習手法^[28, 60, 83]、深層学習（とくにCNNを用いた画像認識）^[5, 24]などは、すでに多くの科学分野での共通基盤ツールとなっている。また、実験自動化に欠かせないロボットや各種の計測装置については分野依存の側面は小さくないが、実験プロトコルの記述言語や制御アルゴリズム、実験計画を自動化するソフトウェアツールなどは数理あるいは情報学の問題設定として共通的な研究開発が可能である。そして、ツールやプロトコルの共有を通じ、分野を越えて科学研究AIシステムのデザインパターンの構築と普及も不可欠である^[84, 85]。

表3-2 セミナーシリーズで指摘された分野ごとの課題

	(1) 仮説生成・探索	(2) 仮説検証
物理	・ 帰納バイアスやゴールの設定などは人間依存	・ 機械学習は第3の実験
材料	・ 人間に理解できる仮説の確立 ・ スモールデータからの学習 ・ 既存知識ベースとの接続	・ ハイスループット化可能な実験は限られる ・ ハイスループット化がコスト削減にならない ・ シミュレーションが現実とあまり一致しない
生命	・ 複雑すぎて人間には理解不能 ・ 公表結果にも間違いが含まれている ・ 教師あり学習には人間の認知バイアスが入る ・ 教師なし学習では生物学的な解釈ができない	・ ロングテール探索は研究者の成果に繋がらない ・ 実測にかかる時間がボトルネック ・ 機械学習用と人間用では実験系の設計が違う ・ ハイスループットの計測系がない
医療	・ 認知バイアスのため疾病分類は普遍的でない ・ 臨床データは少ないので深層学習により高精度化できない ・ モデル自体の検証プロセスが必要 ・ 疾患の再定義には臨床医師のコンセンサスが必要	・ 動物実験の代替、人の代替モデルの確立が必要 ・ GAN などを用いてバーチャルビッグデータを生み出す方向性 ・ 機械学習で得られた相関から、医学的な因果関係を導くには、基礎生物学・基礎医学に戻ってメカニズム検証が必要
創薬	・ 従来の創薬の成功例は偶然の発見がほとんど ・ 考えうる化合物の種類が多い (10^{60}) ・ 機械学習の予測に対し説明が必要 (レギュレーションからの要請もある) ・ 多因子下での検証が困難	・ 疾患により情報の量や質がバラバラ ・ データには欠損が多い ・ 負例の実験データ (有効でなかった化合物) も残すべき ・ 漢方や予防に関しては、データがない
情報	・ 因果推論には人間の直観を組み込むことが必要 ・ 機械学習と因果推論の組み合わせは深く検討されていない ・ 科学的発見には人間の認知問題がある。1) 情報地平線問題、2) 情報ギャップ問題、3) 表現型不正確問題、4) 認知バイアス問題、5) マイノリティリポート問題	・ 機械学習で得られるのは経験則であり法則式でない ・ 数学的許容性、客観性、普遍性、再現性、健全性、簡潔性などの要件定義とそれらを検証する能動的実験が必要 ・ 科学的発見を生むセレンディピティ、偶発性、科学的直観などの実装 ・ 認知バイアスのない探索と、人間の価値観を反映した評価の実現

コラム

SF と人工知能の未来

優れたSF 作品は未来社会に関する様々なビジョンや警告を与えてくれる。人間と人工知能との関係は、アイザック・アシモフが描く様々なロボットをはじめ、アーサー・C・クラーク「2001 年宇宙の旅」のHAL9000、ロバート・A・ハインライン「月は無慈悲な夜の女王」のマイクロフトなど、古くから描かれてきた。

ジェームズ・P・ホーガン「未来の二つの顔」では、自らの生存を守るために反乱を起こした人工知能スパルタクスが、最終的には人間と協調することが最善の戦略であることを学習する。チャールズ・ストロス「アッチェレランド」では、人工知能が担う経済活動(経済2.0)から人間が完全に閉め出される未来像が描かれている。人工知能の現在と未来を俯瞰する取り組みとして、人工知能をテーマにしたショートショートSF 作品に人工知能研究者が解説をつけるという人工知能学会編「人工知能の見る夢は」も興味深い。

本プロポーザルの内容と関係が深いテッド・チャンの短編「人類科学の進化」を紹介しよう^[86]。この作品はネイチャー誌の特集企画「さまざまな未来」に掲載されたものだ。

物語は、ある科学雑誌の編集者が読者向けに書いた文という体裁で進む。その時代には人間の読む学術誌は通俗記事ばかりで、地位はかなり低くなってしまっているようだ。じつは、この世界では、メタヒューマンと呼ばれる超知性が人間の理解力を凌駕する研究成果を次々とあげているのだが、それらはDNT(デジタル神経伝達)という人間には理解不能な媒体を通じてのみ提供されているのである。そして、ここでの科学者の役割といえば、その超知性が生み出した科学的成果物に対し、リバーエンジニアリングにより解釈を試みることになってしまっているのだった。

もちろん、彼らの科学(メタヒューマン科学)による成果をありがたく利用させてもらえばそれでいいということも言えるが、やはり人類の知的水準は継続的に高めていきたい(そしていつかは超人類を上回る?)という願望も見え隠れする。人間に理解できない超知性が進める科学は、ある意味「人工知能=神」とする宗教のようなものだと思っても可い。

この編集者は人類の科学は不要とはならず、超知性が取りこぼした分野での人間の貢献はいろいろ考えられ、「メタヒューマン科学」の成果に気おされる必要はないとしている。そして、メタヒューマンを可能にした科学技術はもともと人間が発明したことだと結ぶ。

さて、現在の人類の知的水準を大幅に上回るような超知性が出現したとき、私たちはどのように対応すればよいだろうか? 確かに、このプロポーザルで見たように、技術的なハードルは低くない。それでも、SF の世界の話だと高をくくり、真面目に考えるには値しないだろうか?

4 | 研究開発の推進方法および時間軸

4.1 推進上の課題と推進方策

本研究開発を進める上では技術的な課題解決以外に、表 4-1 に挙げた推進上の課題の解決を図る必要がある。まず、本研究開発を進める上で重要となる AI やロボティクスの研究開発には、技術を集約・統合する必要があるが、現状では人も機器も多くの研究機関に分散して存在している点がある。また、とりわけ実験自動化ロボットは集積することで効率が向上するにも関わらず整備・運用のコスト面でひとつの研究室などに集積しにくい。これらの課題に対する方策として 4.2 節で「共同利用施設の強化」を挙げる。

また、開発した AI システムやロボット技術、あるいは、AI を使った科学研究という方法論の普及には、多くの分野における実際の科学研究の現場で使い物になるということの確認が不可欠である。そのためには、AI・ロボティクスの専門家と各分野の研究者との協働・交流を通じて、具体的な問題を解いていく必要がある。本プロポーザルでは共有されたゴール「グランドチャレンジ」の達成を目指した研究開発の推進を提案する。

さらに、研究対象の制御性や本質的な特性によりハイスループット化可能な実験が限られたり、既存知識ベースやデータベースの整備状況も分野によってまちまちであったりといった、分野の固有事情を考慮して研究開発を推進することが不可欠である。その上で、数学的な道具立て、データベース・知識ベース、ツールや実験プロトコルなど分野を超えた教育・訓練が必要となる。この点については 4.4 節「分野を超えた教育・普及」で詳しく述べる。

表 4-1 推進上の課題と推進方策

推進上の課題	共同利用施設の強化	グランドチャレンジ	分野を超えた教育・普及
AI・ロボティクスの研究開発には技術を集約・統合する必要があるが、人も機器も分散している。	○	○	
実験自動化ロボットは集めると効率が上がるにも関わらず一研究室での整備・運用には高コスト。	○		
科学研究現場で使い物になることを確保するために、具体的な問題を解いていく必要がある。	○	○	
AI・ロボティクスの専門家と各ドメインの研究者との協働・交流を進める必要がある。		○	○
分野によりハイスループット化可能な実験は限られる。データの整備状況も分野によってまちまち。			○
数学的な道具立て、データベース・知識ベース、ツールやプロトコルなどの教育・訓練が不足。			○

4.2 共同利用施設の強化

科学研究プロセスを自動化するAI システムは、計算機、データベース、実験ロボット、計測機器などがネットワークで結ばれたサイバーフィジカルシステムである。1 台数億円にもなる実験ロボットの価格を考えると、大型のグラントを獲得したとしてもひとつの研究室でこのシステム全体を保有し維持するのは困難だと考えられる。従って、JST のCREST や未来社会創造事業のようなプロジェクト型の研究費とは別に、共同利用施設の設置が望ましい。データ解析からの帰納、仮説推論、数値シミュレーションによる演繹、などの部分についてはオープンデータの活用や共同利用の計算機資源を使うなどが可能な面もあるため必ずしも共同利用施設の新設は必要ないが、ロボットを用いた実験自動化については共用ハードウェアを用意する必要がある。

図4-1 に「AI 駆動科学」共同利用施設の構成案を示す。最下の「プラットフォーム層」ではAI やロボットなど基盤技術の研究開発が行われ、最上層の「サイエンス層」の研究室や研究プロジェクトごとにホストされる。その一部は受託研究という形で、当該の共同利用施設の研究者が実施するというものもあるだろう。サイエンス層とプラットフォーム層を繋ぐ役割として「マトリクス層」を設置する。この層はサイエンス層のプロジェクトを支援する時限付きチームが構成され、ホストするプロジェクトごと、あるいはそれらのプロジェクトをある程度まとめた分野ごとに、必要となるプラットフォーム層の専門家とオペレーションの専門家の混成チームとなる。

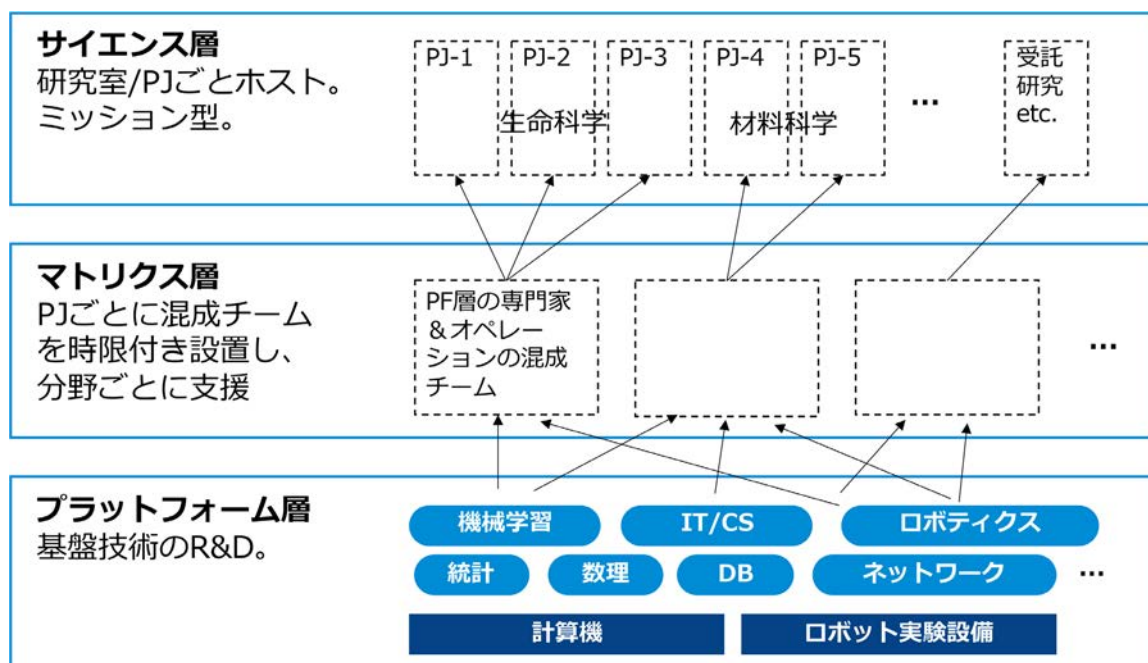


図4-1 「AI 駆動科学」共同利用施設

このような共同利用施設がもつ機能は以下のような内容が考えられる。学術分野や産業ドメインに応じて、複数の施設が多様性をもった設置・運営形態となるのが望ましい。

- ・実験ロボットや実験設備の共同利用支援機能
- ・大学・国立研究開発法人・民間企業の共同研究実施機能
- ・実験データや実験プロトコルの収集・蓄積・管理機能

- ・大学・国立研究開発法人の研究成果の民間企業への橋渡し機能
- ・大学・国立研究開発法人発スタートアップの立ち上げ支援・設備供与機能
- ・ツールや方法論の教育・トレーニング機能
- ・プラクティスの調査、デザインパターンの構築・普及展開機能
- ・研究マネジメント・知財マネジメント機能

このような仕組みの有効性は科学の分野全域にわたるが、実験環境の準備や制御性の良さ、データベースや知識ベースの整備状況などからみてDX化や自動化が比較的しやすい分野が先行するだろう。そして概念実証や成功例を積み上げ、他の分野へも展開していくことになる。この観点で、まず導入が進む分野は生命科学と材料科学だと考えられる。生命科学の中はとくに細胞内の分子ネットワークやタンパク質の動態など、データベースやオントロジーなどの基盤が整っている分野が先行するだろう。これらの分野はひとつの実験にかかる時間サイクルの面でも望ましい。また、化学、材料科学、創薬の分野も、探索すべき仮説空間の設定の工夫こそ必要だが、実験自動化も容易であり科学研究サイクルのクロースドループを比較的構成しやすい。データの整備状況は生命科学分野に比べると心もとないが、自動実験による系統的なデータ取得の必要度が高いとも理解できる。新化合物の発見、新薬開発、ワクチン開発など産業応用から見ても重要度が高く、AIシステムの導入は進むだろう。

このような拠点の運営は、国立大学や国立研究開発法人とは大きく異なるため、全く新規の外部法人として民営化して運営されるのが望ましい。とくに、既存の法人の得意分野や組織構造にとらわれない柔軟で機動的な運営が求められるため、既存の慣行から離れられる組織体や運営の仕組みが重要である。例えば、内閣府が進める外部化法人制度の利用が考えられる。このような新法人であれば、既存の大学や民間の力を活用しつつ、オープンイノベーションの促進も期待できる。

4.3 グランドチャレンジ

科学研究サイクルを自動化するAIシステムの実現方法には様々なアプローチが可能であり、現時点でどのような方法が最も有望かということも不明である。このような場合、国が戦略目標としてゴールを明示するようなミッション志向型のグラントプログラム^[87, 88]に加えて、掲げられたグランドチャレンジの達成に向けたアイデアを幅広く募るチャレンジプログラムの創設も有効である^[7]。英国アラン・チューリング研究所では「The Turing AI scientist grand challenge」というイニシアティブも立ち上がった^[12]。

具体的なグランドチャレンジの例を表4-2に示す。ここに挙げたものは2050年頃の達成が望まれる挑戦的課題であり、第3章で紹介した自動化レベル（表3-1）と照らしたときの達成までの時間軸は図4-2のようになる。グランドチャレンジの達成には概ねレベル4以上が要求され、難易度と達成予想時期は分野によって異なる。

チャレンジプログラムは、ある課題について、具体的な手法の指定をすることなく幅広いアプローチの提案を募集するもので、課題達成の度合いに応じて賞金を与えることが多い^[89]。米DARPAは革新的な技術開発を目的としてチャレンジプログラムと呼ばれる賞金付の競技会を実施している^[53]。科学研究サイクルの自動化についても、具体的で挑戦的な課題を明示した上で、アプローチを指定することなく幅広い提案を募ることで、開催者の思いもよらないアイデアや技術を集めることができると期待される。また、競技会や実証実験などによって技術動向やフィージビリティの確認、そして有望なものを絞り込んでいくといったことも可能となる。

日本では政府資金を賞金にすることができないため、チャレンジプログラムの実施はDARPAとは異なった方式をとる必要がある。民間企業からの協賛金等を賞金に使用したり、あるいは、賞金とは別のインセンティ

ブを参加者に与える工夫などが考えられる。その上で、将来の潜在的なユーザーまで巻き込んだコミュニティの醸成や当該プログラムによって生まれた成果の企業への橋渡しの促進なども重要である^[90]。

このようなグランドチャレンジを利用した研究開発の推進で重要な点は、示されたゴールが専門家ではなくても理解できる内容ということ以上に、その達成度を明確に判定できるような定量的指標が必要である。

表 4-2 グランドチャレンジの例

分野	グランドチャレンジ
AI・ロボット	ノーベル賞級の新発見とそれに対する意味のある新仮説をAIシステムが提示する。
生命科学	特定の細胞の内部構造・相互作用の作用機序を自動で推定し制御する。
医療	臨床データや <i>in vitro</i> 実験データからの疾患バイオマーカーの候補を推定する。
創薬	新型ウイルスに対する安全なワクチンの開発期間を10分の1に高速化する。
材料科学	構造が与えられたとき、最適な合成方法を決定し、成功するまで合成を繰り返す実験ロボット。
地球科学	季節スケール（＝数ヶ月）での精度の良い気象予測の実現

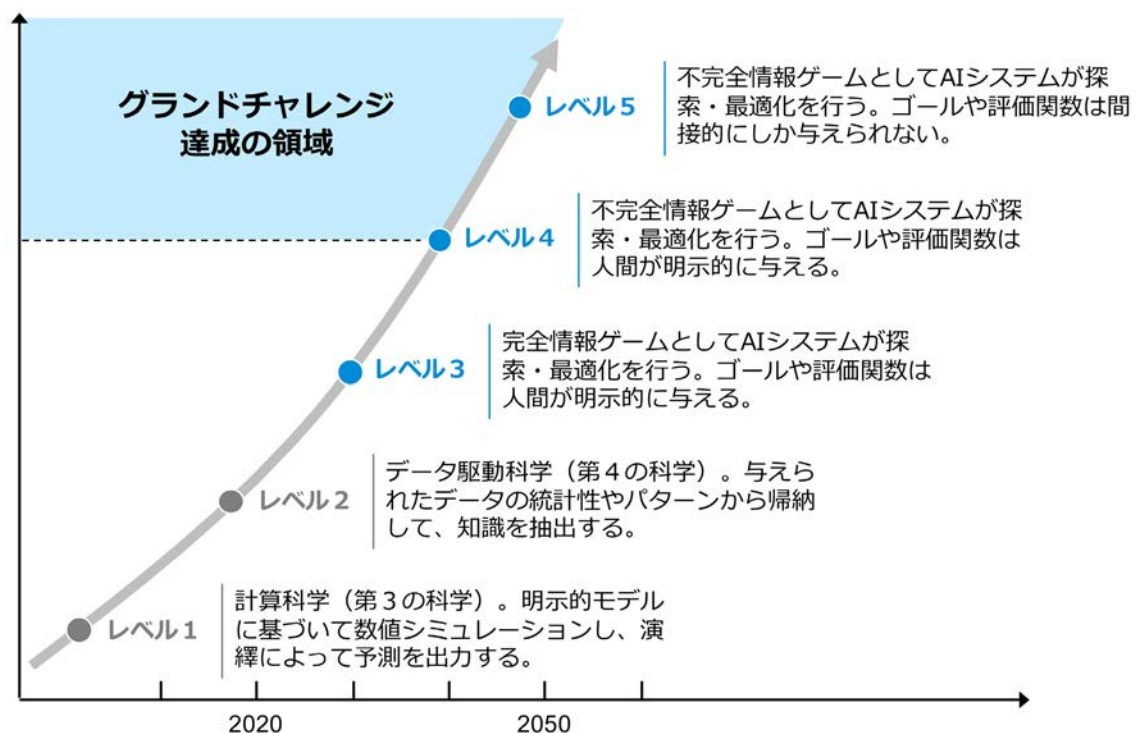


図 4-2 グランドチャレンジ達成までの時間軸

4.4 分野を越えた教育・普及

科学研究プロセスを自動化するAIシステムがさまざまな技術分野・産業分野に取り入れられるようになると、各分野のもともとの知識・技術と、AI・ビッグデータ技術の両方がわかる人材や実験ロボットの運用スキルを持つ人材・組織の育成が重要になる。現状ではマテリアルズインフォマティクス^[6]やバイオDX^[5]などと分野ごとにDXを進める施策体系になってしまっているが、今後は、これらの個別の施策に加えて、分野の垣根を越えた研究推進が重要である。3章で述べたように分野に依存しない共通基盤技術としてのAIやロボット技術についての先端研究を進めるとともに、図4-1に示したような共同利用施設を通じた分野間の研究交流や共通部分のくくりだし、プラクティスの共有などを進め、科学研究AIシステムのデザインパターンを構築・普及することも不可欠である^[84, 85]。

また、本プロポーザルが提案する科学研究サイクルの自動化は、あくまでも手段であり、科学研究における問題解決や価値創造の側からの発想が重要である。そこで、分野横断的な技術者・研究者と、価値創造を牽引するリーダー人材との両面から人材育成を進めていくことが求められる^[11]。前者については、研究分野の異なる学会間の交流^[91, 92]が盛んになりつつあり、同様の動きの広がりが期待される。また、さまざまな技術を統合し科学研究サイクルや問題解決のプロセス全体を一気通貫で動かす共同利用施設や拠点の形成は、人材育成の面からも極めて重要である。

科学の多くの分野では、科学の方法論について広く教育を行う必要がある。科学研究のあり方が変化している中で、数学や論理学、統計などの推論ツールや、論文、国際会議などのコラボレーションツールについての基礎教育の充実は必須である。科学研究で必要となる統計や機械学習に関するITツールのハンズオン教育は、すでに多くの大学で始まっている。

「AI戦略2019」^[59]や「第6期科学技術・イノベーション基本計画」^[4]で取り上げられているように、AI・データ駆動型研究推進の強化は、統計的思考やデータに基づく問題解決力などの育成を目指すデータ・AI人材の育成と重なる部分も大きいだろう^[93, 94]。

また、分野によって検証・証明のプロトコルは異なっているため、共通部分の共有や、分野ごとの特性に合わせた教育を行うべきである。とくに、顕微鏡、望遠鏡、各種測定装置などから得られた実験・測定データの分析では、相関と因果の違いやその適切な取り扱い方など統計・データ科学の教育も重要である。これに加えて、いつでも認知バイアスが生じうることを認識し、バイアスを取り除く（あるいは緩和する）方法について、その方法論やツールの共有・普及を進める必要があろう。分野の融合促進やプラクティスの共有には「ディープラーニングと物理学」^[60]のような草の根的な研究会を通じたコミュニティの醸成も重要である。

機械学習をベースとするシステムを動かす上で、重要となるのはデータの共有であろう。とくに、多くの場合で公開するモチベーションがない負例・失敗例のデータが、機械学習モデルにとっては重要となるため、提供・公開するインセンティブの設計が重要である。例えば、実験の事前登録制や負例・失敗結果であっても業績として認めるなどのしくみづくりが重要である。また、国による研究費でのデータ収集やデータベース構築ではグラント期間終了後のデータベースの維持管理は常に課題となるので、人的・金銭的に持続可能性のある手当が必要である。例えば前述の共同利用施設に、データベースの維持管理機能をもたせることも考えられる。

付録A 検討の経緯

国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）では、2020年度の戦略スコープ策定委員会において、本テーマを戦略プロポーザルを作成すべきテーマの候補に選定し検討チームを発足させた。検討チームは2020年4月から活動を開始、1年間余りに渡って検討を進めてきた。その間、以下のようなセミナーとワークショップを開催し、研究開発状況の把握や研究課題・方向性の議論を深めてきた。

A.1 俯瞰セミナーシリーズ

本プロポーザル作成にあたり、関連する研究分野に高い専門性を有する有識者を個別にセミナーに招き研究内容や推進体制、国内外動向についてヒアリングした。

セミナーシリーズでは、CRDS 報告書「デジタルトランスフォーメーションに伴う科学技術・イノベーションの変容」（2020年4月発行）^[2]の先の未来像として、機械学習、スパコン、実験ロボットなどの様々な道具の力による科学研究のあり方の広がり、それにより得られる知のフロンティアの可能性に着目した。セミナーでは、計算機科学・情報科学側と科学技術の分野側の両面から今何が起きているか俯瞰することから始め、可能性と課題を議論した。具体的には

- （1）第4の科学（データ駆動科学）までとの違いは何か？ 新たなツールのどのような機能・性能が、人間の性能を超えた（あるいは強化した）ことになるのか？ しきい値のようなものがあるか？
- （2）科学による知のフロンティアはどこまで、どのように広がっていくのか？ ツールを使い理解を広げていく方向とは別に、人間が理解できない科学のような方向にも広がるか？
- （3）新しいツールは、科学技術における人間の活動のどの部分を代替することになるのか？ 具体的に期待される問題設定・用途や利点は何らか？

の3点を中心に幅広い観点で議論し、科学技術と推進方策・戦略の両面からボトルネック課題を探索した。シリーズ全体の企画構成の立案および議論への参加、総合討論での議論など、以下2名の専門家をアドバイザーとして招聘した。

上田正仁 東京大学大学院理学系研究科 教授
丸山宏 株式会社 Preferred Networks PFN フェロー

セミナーの招聘有識者は表A-1のとおりである（セミナー実施日時順、敬称略、所属・役職は実施当時）。詳細については報告書を参考されたい。

表 A-1 俯瞰セミナーシリーズ「機械学習と科学」

実施日時	タイトル・発表者
7月13日 13:00-14:30	科学の変容－アストロバイオ構成主義－ 久木田水生（名古屋大学）
7月16日 14:00-15:30	データと測定数理制約による科学的モデルの発見 鷲尾隆（大阪大学産業科学研究所）
7月27日 10:00-11:30	機械学習と物理 橋本幸士（大阪大学）
7月30日 13:00-14:30	材料における機械学習の現状と将来展望 徐一斌（物質・材料研究機構）
8月4日 10:00-11:30	データ駆動による因果仮説探索 清水昌平（滋賀大学/理化学研究所）
8月4日 13:00-14:30	Creating the Engine for Scientific Discovery 北野宏明（ソニーコンピュータサイエンス研究所）
8月6日 13:00-14:30	細胞計測解析を人から解放し、人知を拡張する 太田禎生（東京大学/シンクサイト株式会社）
8月11日 10:00-11:30	機械学習、数理科学に基づく健康・疾患層別化と予測 川上英良（理化学研究所/千葉大学）
8月18日 10:00-11:30	因果推論－決定論的アプローチ－ 陳洛南（中国科学院系統生物学重点实验室）
8月24日 10:00-11:30	記号推論と科学 井上克巳（国立情報学研究所）
8月27日 13:00-14:30	機械学習によるデータ駆動型研究が拓く創薬と医療 山西芳裕（九州工業大学）
9月3日 13:00-14:30	プロセスインフォマティクスWS からの内容紹介 眞子隆志（JST-CRDS）
9月8日 10:00-11:30	モデル駆動型アプローチからみた逆問題の諸相 山本昌宏（東京大学）

A.2 科学技術未来戦略ワークショップ「人工知能と科学」

本プロポーザル作成にあたり、下記の通り、科学技術未来戦略ワークショップを開催した。詳細についてはワークショップ報告書を参考されたい。

概要

日時：2021年1月22日（金）14：00～17：00

場所：オンライン（zoom）

主催：科学技術振興機構研究開発戦略センター（CRDS）

招聘有識者

（発表者）

上田正仁 東京大学大学院理学系研究科 教授

北野宏明 株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所 所長

呉羽 真 大阪大学先導的学際研究機構 特任助教

徐 一斌 物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門 副部門長

清水昌平 滋賀大学データサイエンス学系 教授

高橋恒一 理化学研究所生命機能科学研究センター チームリーダー

橋本幸士 大阪大学大学院理学研究科 教授

丸山 宏 株式会社 Preferred Networks PFN フェロー

（コメンテータ）

伊藤 聡 公益財団法人計算科学振興財団 チーフコーディネーター

浦本直彦 三菱ケミカルホールディングス Chief Digital Technology Scientist

プログラム

14：00～14：15 趣旨説明・参加者紹介

14：15～15：35 セッション1「科学を俯瞰する」

14：15～14：35 橋本幸士（大阪大学）

14：35～14：55 高橋恒一（理化学研究所）

14：55～15：15 徐一斌（物質・材料研究機構）

15：15～15：35 清水昌平（滋賀大学）

（休憩）

15：45～16：45 セッション2「課題と戦略」

15：45～15：50 丸山宏（Preferred Networks）

15：50～15：55 上田正仁（東京大学）

15：55～16：15 福島俊一（JST CRDS）

16：15～16：30 呉羽真（大阪大学）

16：30～16：45 北野宏明（ソニー）

16：45～17：00 ラップアップ

付録B 専門用語説明

因果グラフ

複数の変数の間の因果関係の連鎖（因果構造）をグラフで表現したもの。因果構造の全体像を視覚的に捉えやすく、因果効果の推定を行う際の基礎となる。

因果関係と相関関係

相関関係は因果関係の必要条件であるが、それだけでは因果関係があるとは断定できない（十分条件ではない）。隠れた要因（潜伏変数）によって、本来は無関係の2つの変数にあたかも因果関係があるかのように推測されることも生じる。

オッカムの剃刀

14世紀の哲学者・神学者オッカムが議論で多用した「必要なしに多くのものを定立してはならない」とする原則。科学の文脈では「ある現象を説明する理論・モデルが複数ある場合、より単純なものの方が望ましい」という意味で用いられる。

仮説推論

演繹、帰納と並ぶ論理的推論のひとつ。関連する証拠を矛盾なく最もよく説明する仮説を導出するという形式の推論。アブダクションとも呼ばれる。

機械学習

データの背後に潜む規則性や特異性を発見することにより、人間と同程度あるいはそれ以上の学習能力をコンピュータで実現しようとする技術。教師あり学習、教師なし学習、強化学習といったタイプがあり、さまざまな方式（深層学習、サポートベクトルマシン、決定木、回帰分析、ベイジアンネットワークなど）が開発されている。

帰納バイアス

機械学習手法の汎化（学習データに現れていないデータ点を予測できるようにする）のために採用している仮定。例えば線形回帰では、入出力が線形の関係であることを仮定している。「オッカムの剃刀」は帰納バイアスの、ある種の古典的な例ともいえる。

逆問題

入力から出力を求める「順問題」の逆に、出力から入力やモデルを推定する問題。（1）既知のモデルと出力から未知の入力を推定する問題と、（2）既知の入力と出力から未知のモデルを推定する問題（システム決定問題）の2種類ある。

コンビナトリアル合成

材料となる元素や化合物の組み合わせを利用し、系統的な合成経路を用いて多種の化合物群を効率的に合成する手法。多品種の化合物群をライブラリーと呼ぶ。

システム生物学

生命現象をシステムとしてとらえ、システム工学の概念や手法を用いて生命現象の特性や動作原理を明らかにすることを目的とした学問分野。システムの構成要素の同定や網羅的な解析、動的な特性の解明など様々な研究がある。また、得られた知見を医療や創薬に活かす試みもあり、システム生物学の適用範囲は広い。

深層学習

多層ニューラルネットワークを用いた機械学習方式である。特徴量空間上での識別境界だけでなく、特徴量そのものも学習できる点が革新的で、画像認識・音声認識等の分野で従来方式を大きく凌駕する性能を示して注目を浴びた。さらに、アクション結果に対する報酬から、より大きな報酬を得る方策を学習する強化学習に深層学習を組み合わせた深層強化学習を用いた「AlphaGo」は、人間のプロ囲碁棋士を破って大きな話題となった。

説明可能AI（XAI）

ブラックボックス化しがちなAIシステムの判断根拠を可視化し、なぜその答えを導き出したのか人間が理解可能なようモデルに説明性をもたせる技術。対象とする機械学習手法やモデルの種類、説明の目的や用途に応じ様々な技術が提案されている。学習済みのモデルに後づけで説明を加える「ブラックボックス型」と、人が解釈できる学習過程や構造をもつ新しいモデルを開発する「トランスペアレント型」のアプローチに大別される。

セレンディピティ

予想外のものを発見すること。また、もともと探していたものとは別の価値があるものを偶然見つけること。自然科学の文脈では失敗や実験的な誤りからも見落とさずに新発見するという意味でも用いられる。白川英樹らによる導電性高分子の発見（ノーベル化学賞の受賞理由）がセレンディピティのエピソードとして語られる事が多い。

デジタルトランスフォーメーション（DX）

エリック・ストルターマン（ウメオ大学）が提唱した2004年には「ITの浸透により人々の生活をあらゆる面で良い方向に変化させる」ことを意味していたが、現在ではビジネス用語として「企業・組織がITを利用して事業や業務プロセスを根本的に変化させる」というような意味で使われている。

認知バイアス

人の判断や意思決定において、思い込みや個人の常識、固定観念、生活習慣、誤った情報、周囲の環境など種々な要因で非合理的な判断を行ってしまうこと。認知心理学や社会心理学で用いられる心理学用語。後知恵バイアス、確認バイアス、正常性バイアスなど様々なものが知られている。

バーチャルスクリーニング

膨大な数となる理論上可能な化合物を、合成・実験可能な数に効率よく絞り込むためのコンピュータ技術の1つ。医薬品開発では、ターゲット（タンパク質受容体や酵素）と最も良く結合する化合物の化学構造を特定するために、計算機シミュレーションを用いて高速に多数の構造を評価する。組み合わせが膨大となりすべてのケースについてのシミュレーションが困難となる場合には機械学習による手法も併用される。

バイオインフォマティクス

情報科学や統計学などの概念や分析手法、ソフトウェアツールによって生命現象を解き明かしていく学際分野の1つ。広義には、生物学、コンピュータサイエンス、情報学、統計学といった学問分野の組み合わせで構成される。その対象は多岐にわたり、ゲノム、トランスクリプトーム（ゲノムからの転写物）、プロテオーム（タンパク質）、グライコーム（タンパク質の二次産物として合成される糖鎖）、メタボローム（代謝ネットワークによって生じた代謝産物）、フェノーム（生物個体の表現形）など、生物学全体に拡大している。

パスウェイ

遺伝子やタンパク質など複数の生体分子の相互作用から構成され、生命現象を制御している生物学的過程や経路を図で表したもの。元々は主に代謝経路を指していたが、現在ではシグナル伝達系、タンパク質間相互作用、遺伝子の制御関係などお情報も含めてパスウェイとして扱われる。制御関係としては、酵素反応、転写、リン酸化、結合など様々なものが含まれる。

ブラックボックス問題

AI システムが下した判断の経緯や理由を、人間が理解することがほぼ不可能となる問題。深層学習ではニューラルネットワークが多層化したことで、内包される判断ルールや条件、その関係性を人間が直接解読することは望めない。そのため、深層学習を用いたAI システムが出した予測や答えについて、どのようなプロセスでそうなったかのかを追跡して人間がそのまま理解することができない。

マテリアルズインフォマティクス

計算科学やデータ科学を用いた物性予測、ハイスループット材料合成・評価、データマイニングによる特徴抽出などにより、新材料の設計、探索、発見を飛躍的に加速する取り組みや技術の総称。材料化学、物性物理学、データ科学、数学、コンピューターサイエンス、情報学など様々な分野を含む学際分野のひとつ。材料特性を支配する関係性を発見し、自由自在に材料開発を進めると同時にその背景にある原理を見出すことを主な目的とする。

リード化合物

医薬品開発における出発点となる新薬候補化合物。有効性、結合選択性、安定性、安全性などの化学的改良ののちに動物試験や臨床試験へ進み、最終的な新医薬品を導き出す（＝リード）化合物の意。植物や微生物などから発見される場合と、人工の化合物候補から発見される場合の両方がある。リード化合物の有効性や安全性を高めていくことは「リード最適化」と呼ばれる。

参考文献

- [1] Tony Hey, *et al.* The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery. Microsoft Research, 2009.
- [2] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. デジタルトランスフォーメーションに伴う科学技術・イノベーションの変容. No. CRDS-FY2020-RR-01, 2020.
- [3] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. リサーチトランスフォーメーション(RX)ポスト/with コロナ時代、これからの研究開発の姿へ向けて. No. CRDS-FY2020-RR-06, 2021.
- [4] 内閣府. 第6期科学技術・イノベーション基本計画(令和3年3月26日閣議決定).
<https://www8.cao.go.jp/cstp/kihonkeikaku/6honbun.pdf>.
- [5] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. AI×バイオ DX 時代のライフサイエンス・バイオメディカル研究. No. CRDS-FY2020-RR-03, 2020.
- [6] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. (研究開発の俯瞰報告書) ナノテクノロジー・材料分野(2021年). No. CRDS-FY2020-FR-03, 2021.
- [7] 北野宏明. 人工知能がノーベル賞を獲る日, そして人類の未来: 究極のグランドチャレンジがもたらすもの. 人工知能, Vol. 31, No. 2, pp. 275–286, 2016.
- [8] 丸山宏. 「高次元科学への誘い」, cnet japan ブログ(2019年5月1日).
https://japan.cnet.com/blog/maruyama/2019/05/01/entry_30022958/.
- [9] 稲葉振一郎, 大屋雄裕, 久木田水生, 成原慧, 福田雅樹. 人工知能と人間・社会. 勁草書房, 2020.
- [10] 黒田玲子, 高橋恒一, 中釜斉, 唐津治夢, 武田計測先端知財団. ここまで来ました: 右巻き左巻き・AI駆動科学・がん医療の革新. 丸善プラネット, 2020.
- [11] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. (研究開発の俯瞰報告書) システム・情報科学技術分野(2021年). No. CRDS-FY2020-FR-02, 2021.
- [12] The Alan Turing Institute. The Turing AI Scientist Grand Challenge.
<https://www.turing.ac.uk/research/research-projects/turing-ai-scientist-grand-challenge>.
- [13] D.Waltz and B Buchanan. Automating science. *Science*, Vol. 324, pp. 43–44, 2009.
- [14] 井上克巳. 人工知能による科学的発見. 電子情報通信学会誌, Vol. 98, No. 1, pp. 35–39, 2015.
- [15] 渡部匡己, 都築拓, 海津一成, 高橋恒一. 人工知能による科学研究の加速. 人工知能学会全国大会論文集, Vol. 30, pp. 1–4, 2016.
- [16] J. Brainard. New tools aim to tame pandemic paper tsunami. *Science*, Vol. 368, pp. 924–925, 2020.
- [17] R. Nuzzo. How scientists fool themselves – and how they can stop. *Nature*, Vol. 526, pp. 182–186, 2015.
- [18] 中谷宇吉郎. 科学の方法. 岩波書店, 1958.
- [19] 戸田山和久. 科学哲学の冒険サイエンスの目的と方法をさぐる. NHK 出版, 2005.
- [20] 福岡伸一. 世界は分けてもわからない. 講談社, 2009.
- [21] H. Kitano. Systems biology: A brief overview. *Science*, Vol. 295, pp. 1662–1664, 2002.
- [22] 北野宏明, 近藤滋, 黒田真也, 金子邦彦. システムバイオロジー(現代生物科学入門第8巻). 岩波書店, 2010.
- [23] T. Hey, *et al.* Machine learning and big scientific data. *Phil. Trans. R. Soc. A*, Vol. 378, p. 20190054, 2020.

- [24] M. Raghu and E. Schmidt. A survey of deep learning for scientific discovery. arXiv:2003. 11755,2020.
- [25] S. Min, *et al.* Deep learning in bioinformatics. *Briefings in Bioinformatics*, Vol. 18, pp. 851–869,2017.
- [26] J. Schmidt, *et al.* Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *npj Computational Materials*, Vol. 5, No. 83, 2019.
- [27] A. Agrawal and A. Choudhary. Deep materials informatics: Applications of deep learning in materials science. *MRS Communications*, Vol. 9, pp. 779–792, 2019.
- [28] 岩崎悠真. マテリアルズ・インフォマティクス：材料開発のための機械学習超入門. 日刊工業新聞社, 2019.
- [29] 田中章詞, 富谷昭夫, 橋本幸士. ディープラーニングと物理学：原理がわかる、応用ができる. 講談社,2019.
- [30] G. Carleo and M. Troyer. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, Vol. 355, pp. 602–606, 2017.
- [31] K. Hashimoto, *et al.* Deep learning and the ads cft correspondence. *Phys. Rev. D*, Vol. 98, p.046019, 2018.
- [32] A. Adadi and M. Berrada. Peeking inside the black-box : A survey on explainable artificial intelligence(xai). *IEEE Access*, Vol. 6, pp. 52138–52160, 2018.
- [33] A. B. Arrieta, *et al.* Explainable artificial intelligence(xai): concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible ai. arXiv : 1910.10045, 2019.
- [34] 科学技術振興機構研究開発戦略センター. (戦略プロポーザル) AI 応用システムの安全性・信頼性を確保する新世代ソフトウェア工学の確立. No. CRDS-FY2018-SP-03, 2018.
- [35] National Institute of Standards and Technology. Four principles of explainable artificial intelligence (draft nistir 8312 (august 2020)) .
<https://doi.org/10.6028/NIST.IR.8312-draft>.
- [36] M. Schmidt and H. Lipson. Distilling free-form natural laws from experimental data. *Science*, Vol.324, No. 81-85, 2009.
- [37] G. Sugihara, *et al.* Detecting causality in complex ecosystems. *Science*, Vol. 338, pp. 496–500,2012.
- [38] S. L. Brunton, *et al.* Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *PNAS*, Vol. 113, pp. 3932–3937, 2016.
- [39] S.-M. Udrescu and M. Tegmarks. Ai feynman: A physics-inspired method for symbolic regression. *Science Advances*, Vol. 6, p. eaay2631, 2020.
- [40] G. Raayoni, *et al.* Generating conjectures on fundamental constants with the ramanujan machine. *Nature*, Vol. 590, pp. 67–73, 2021.
- [41] R. D. King, *et al.* Functional genomic hypothesis generation and experimentation by a robot scientist. *Nature*, Vol. 427, pp. 247–252, 2004.
- [42] R. D. King, *et al.* The automation of science. *Science*, Vol. 324, No. 85-89, 2009.
- [43] R. D. King, *et al.* Make way for robot scientists. *Science*, Vol. 325, No. 945, 2009.
- [44] K. Inoue. Linear resolution for consequence finding. *Artificial Intelligence*, Vol. 56, No. 301–353,1992.
- [45] B. P. MacLeod, *et al.* Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, Vol. 6, No. eaaz8867, 2020.
- [46] B. Burger, *et al.* A mobile robotic chemist. *Nature*, Vol. 583, 237 – 241, 2020.

- [47] Y. Iwasaki, *et al.* Comparison of dissimilarity measures for cluster analysis of x-ray diffraction data from combinatorial libraries. *npj Computational Materials*, Vol. 3, No. 4, 2017.
- [48] A. G. Kusne, *et al.* On-the-fly closed-loop materials discovery via bayesian active learning. *Nature Communications*, Vol. 11, No. 5966, 2020.
- [49] R. Mullin. The lab of the future is now. *Chemical & Engineering News*, Vol. 99, No. 11, 2021.
- [50] 内閣府. (ムーンショット型研究開発制度) ムーンショット目標3・2050 年までに、AI とロボットの共進化により、自ら学習・行動し人と共生するロボットを実現). <https://www8.cao.go.jp/cstp/moonshot/sub3.html>.
- [51] JST 未来社会創造事業. (「共通基盤」領域・本格研究) ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速. <https://www.jst.go.jp/mirai/jp/program/core/JPMJMI20G7.html>.
- [52] 文部科学省. 令和3 年度の戦略的創造研究推進事業の戦略目標. https://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/2020/mext_00051.html.
- [53] DARPA. Prize challenges. <https://www.darpa.mil/work-with-us/public/prizes>.
- [54] DARPA. Automating Scientific Knowledge Extraction (ASKE). <https://www.darpa.mil/program/automating-scientific-knowledge-extraction>.
- [55] Department of Energy. AI for Science (Report on the Department of Energy (DOE) Town Halls on Artificial Intelligence (AI) for Science). <https://anl.app.box.com/s/bpp2xokglo8z8qiw7qzmgtsnmhree4p0>.
- [56] Microsoft Research. Physics n ML. <https://www.microsoft.com/en-us/research/event/physics-ml-workshop/>.
- [57] Google Research. Google Accelerated Science. <https://research.google/teams/applied-science/gas/>.
- [58] Stanford Institute for Human-Centered Artificial Intelligence. Artificial Intelligence Index Report 2021. <https://aiindex.stanford.edu/report/>.
- [59] 内閣府. AI戦略2019～人・産業・地域・政府全てにAI～(令和元年6月11日統合イノベーション戦略推進会議決定). https://www.kantei.go.jp/jp/singi/ai_senryaku/pdf/aistratagy2019.pdf.
- [60] ディープラーニングと物理学 (deep learning and physics). <https://cometscome.github.io/DLAP2020/>.
- [61] 一般社団法人日本経済団体連合会. Digital Transformation (DX) ～価値の協創で未来をひらく～. <http://www.keidanren.or.jp/policy/2020/038.html>.
- [62] 大日本住友製薬. 大日本住友製薬と Exscientia Ltd. の共同研究 人工知能 (AI) を活用して創製された新薬候補化合物のフェーズ1 試験を開始 (2020 年01 月30 日、IR ニュース) . <https://www.ds-pharma.co.jp/ir/news/2020/20200130.html>.
- [63] United Nations. The 17 Goals (Department of Economic and Social Affairs, Sustainable Development). <https://sdgs.un.org/goals>.
- [64] A. M. Weinberg. Science and trans-science. *Minerva*, Vol. 10, pp. 209–222, 1972.
- [65] Michael Gibbons, Camille Limoges, Helga Nowotny, Simon Schwartzman, Peter Scott, and Martin Trow. *The New Production of Knowledge: The Dynamics of Science and Research in Contemporary Societies*. SAGE Publications, 1994.
- [66] 小林傳司. トランス・サイエンスの時代- 科学技術と社会をつなぐ. NTT 出版, 2007.
- [67] Y. Gil, *et al.* Intelligent systems for geosciences : An essential research agenda. *Communications of the ACM*, Vol. 62, pp. 76–84, 2019.

- [68] 樋口知之 (編著). データ同化入門 (シリーズ<予測と発見の科学> 6). 朝倉書店, 2011.
- [69] J. Willard, *et al.* Integrating physics-based modeling with machine learning: A survey. arXiv: 2003.04919, 2020.
- [70] マイケル・ワイスバーク (著), 松王政浩 (訳). 科学とモデル・シミュレーションの哲学入門-. 名古屋大学出版会, 2017.
- [71] Henk W. de Regt. *Understanding Scientific Understanding*. Oxford University Press, 2017.
- [72] 照井一成. コンピュータは数学者になれるのか? - 数学基礎論から証明とプログラムの理論へ-. 青土社, 2015.
- [73] SAE International. Taxonomy and definitions for terms related to driving automation systems for on-road motor vehicles. https://www.sae.org/standards/content/j3016_201806/.
- [74] 高橋恒一 (理化学研究所). 私信, 2021.
- [75] K. Inoue, *et al.* Evaluating abductive hypotheses using an EM algorithm on BDDs. In *the 21st international joint conference on Artificial intelligence (IJCAI'09)*, p. 810.
- [76] H. Yabuuchi, *et al.* Analysis of multiple compound-protein interactions reveals novel bioactive molecules. *Molecular Systems Biology*, Vol. 7, p. 472, 2011.
- [77] A. Seko, *et al.* Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and bayesian optimization. *Physical Review Letters*, Vol. 115, p. 205901, 2015.
- [78] R. Gómez-Bombarelli *et al.* Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a highthroughput virtual screening and experimental approach. *Nature Materials*, Vol. 15, p. 1120, 2016.
- [79] 夏目徹, 高橋恒一, 神田元紀 (企画). 特集: 新型コロナで変わる時代の実験自動化・遠隔化. 実験医学, Vol. 39, pp. 1-52, 2021.
- [80] Dashun Wang, Albert-László Barabási. *The Science of Science*. Cambridge University Press, 2021.
- [81] Andrew P. Beckerman, Dylan Z. Childs, Owen L. Petchey, 富永大介 (訳). Rをはじめよう生命科学のためのRStudio 入門. 羊土社, 2019.
- [82] 坊農秀雅, 山本泰智, 粕川雄也, 久保竜一, 大石直哉. 生命科学データ解析を支える情報技術. 技術評論社, 2019.
- [83] 金子弘昌. 化学のためのPython によるデータ解析・機械学習入門. オーム社, 2019.
- [84] Valliappa Lakshmanan, Sara Robinson, and Michael Munn. *Machine Learning Design Patterns: Solutions to Common Challenges in Data Preparation, Model Building, and Mlops*. O'Reilly & Associates Inc., 2020.
- [85] 澁井雄介. AI エンジニアのための機械学習システムデザインパターン. 翔泳社, 2021.
- [86] テッド・チャン (著), 浅倉久志 (訳). あなたの人生の物語. 早川書房, 2012.
- [87] M. Mazzucato. Mission-oriented innovation policies: challenges and opportunities. *Industrial and Corporate Change*, Vol. 27, pp. 803-815, 2018.
- [88] OECD. (OECD Science, Technology and Industry Policy Papers) Mission-oriented innovation policy in Japan. <https://www.oecd.org/sti/mission-oriented-innovation-policy-in-japan-a93ac4d4-en.htm>.
- [89] ポーラ・E・ステファン (著), 後藤康雄 (訳・解説). 科学の経済学. 日本評論社, 2016.
- [90] 小山田和仁. 革新的研究開発プログラムの制度・運営における課題: Darpa robotics challenge からの示唆. 研究・イノベーション学会 年次大会講演要旨集, Vol. 30, pp. 160-165, 2015.

- [91] 小林亮太, 岡本洋, 山川宏 (編). 特集: 物理学とAI. 人工知能, Vol. 33, No. 4, p. 391, 2018.
- [92] 会誌編集委員会 (編). シリーズ: 人工知能と物理学. 日本物理学会誌, Vol. 74, No. 1-11, 2019.
- [93] 樋口知之. データ駆動科学技術を担う人材の育成: 確率的思考と逆推論. 情報管理, Vol. 59, pp. 53-56, 2016.
- [94] OECD. Data-driven innovation: Big data for growth and well-being.
<https://www.oecd.org/sti/data-driven-innovation-9789264229358-en.htm>.

(ウェブサイトは2021年5月1日時点)

作成メンバー

総括責任者	木村 康則	上席フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット
リーダー	嶋田 義皓	フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット
メンバー	東 良太	フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット
	島津 博基	フェロー	CRDS ライフサイエンス・臨床医学ユニット
	相馬 りか	調査員	戦略研究推進部 ICT グループ
	福島 俊一	フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット
	的場 正憲	フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット
	眞子 隆志	フェロー	CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット
	宮藺 侑也	フェロー	CRDS ライフサイエンス・臨床医学ユニット
	若山 正人	上席フェロー	CRDS システム・情報科学技術ユニット

戦略プロポーザル

CRDS-FY2021-SP-03

人工知能と科学

～ AI・データ駆動科学による発見と理解～

STRATEGIC PROPOSAL

Artificial Intelligence and Science

-Toward discovery and understanding by AI-driven science-

令和 3 年 8 月 August 2021

ISBN 978-4-88890-751-4

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町

電話 03-5214-7481

E-mail crds@jst.go.jp

<https://www.jst.go.jp/crds/>

本書は著作権法等によって著作権が保護された著作物です。

著作権法で認められた場合を除き、本書の全部又は一部を許可無く複写・複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

This publication is protected by copyright law and international treaties.

No part of this publication may be copied or reproduced in any form or by any means without permission of JST, except to the extent permitted by applicable law.

Any quotations must be appropriately acknowledged.

If you wish to copy, reproduce, display or otherwise use this publication, please contact crds@jst.go.jp.

FOR THE FUTURE OF
SCIENCE AND
SOCIETY



<https://www.jst.go.jp/crds/>