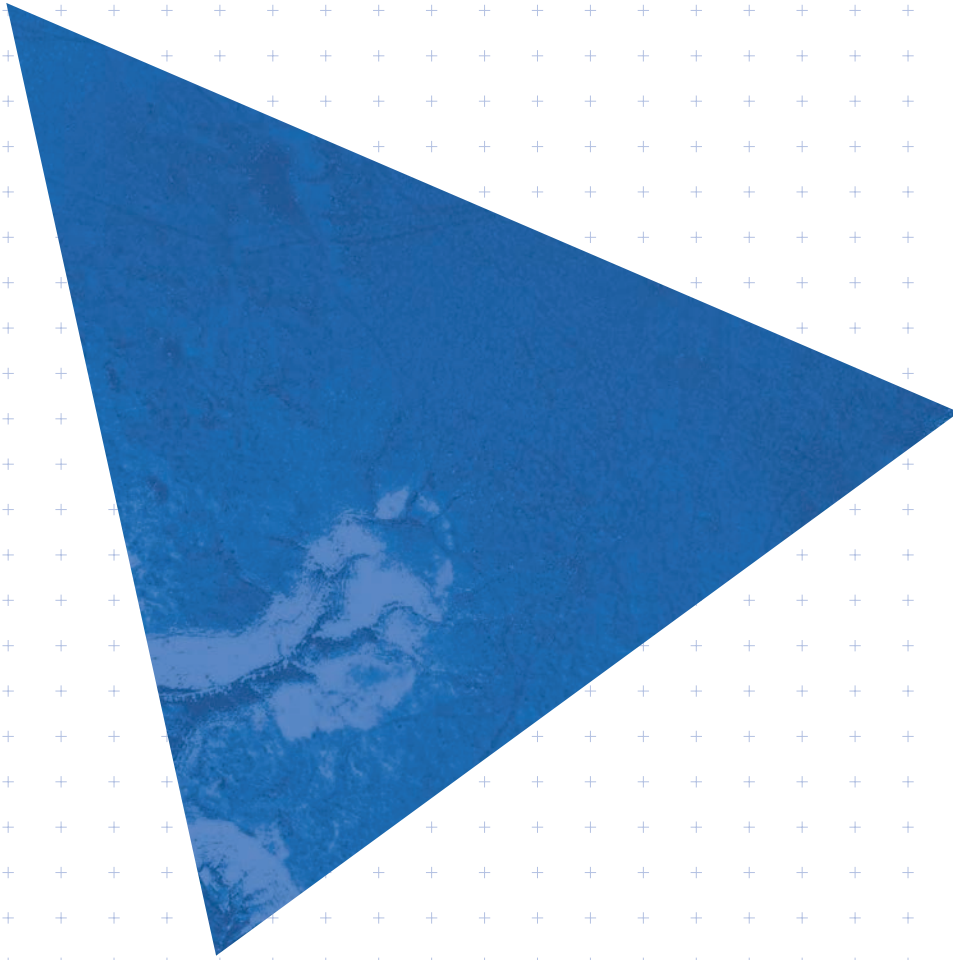


科学技術未来戦略ワークショップ報告書

人工知能と科学

2021年1月22日（金）開催

ワークショップ報告書
CRDS-FY2021-WR-01



エグゼクティブサマリー

本報告書は、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）が2021年1月22日に開催した科学技術未来戦略ワークショップ「人工知能と科学」に関するものである。

CRDSでは機械学習、ロボティクス、ビッグデータなどデジタル技術を活用した新たな価値創造と変革（DX：デジタルトランスフォーメーション）が、科学技術の様々な分野の研究開発にも生じているとの認識から、21世紀の科学技術のあり方の変容についてまとめた報告書「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」を2021年1月に発行した。

本ワークショップでは、その先にある未来像として、深層ニューラルネットワークやトポロジカルデータ解析などの数学・情報学的なツールや、スパコンや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。ワークショップでは、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、今後の可能性と課題を議論した。

具体的には

1. どのようなツール・手段があり、どのように使われているか？ 課題は何か？
2. 学術分野ごとの分野固有の問題に対応するものか？ それとも、科学一般に適用可能か？
3. 今後の普及・展開にはどのような方策が必要か？

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。

これらの議論を踏まえ、CRDSでは国として重点的に推進すべき研究領域と具体的研究開発課題を検討し、研究開発の推進方法も含めた戦略プロポーザルとして関係府省や産業界・学界等に提案する予定である。

目次

1	開催趣旨	1
2	科学を俯瞰する	4
2.1	物理 ～機械学習と物理学～ 橋本 幸士（大阪大学）	4
2.2	AI 駆動型生命科学の実現に向けた研究戦略 高橋 恒一（理化学研究所）	10
2.3	マテリアルズ・インフォマティクスの現状・課題・展望 徐 一斌（物質・材料研究機構）	18
2.4	統計的因果推論と機械学習：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）	28
3	戦略についての提言・総合討論	34
3.1	科学と道具 丸山 宏（Preferred Networks）	34
3.2	人工知能と科学の今後の展開 上田 正仁（東京大学）	35
3.3	「人工知能と科学」ワークショップ ～論点と私見～ 福島 俊一（JST CRDS）	36
3.4	総合討論（1）	38
3.5	科学哲学から見た科学の自動化 呉羽 真（大阪大学）	40
3.6	Nobel Turing Challenge 北野 宏明（ソニーコンピュータサイエンス研究所）	43
3.7	総合討論（2）	47
付録 1	プログラム	49
付録 2	参加者リスト	50

1 | 開催趣旨

嶋田 義皓 (JST CRDS)


ITの普及、デジタル化、それから新型コロナウイルスの感染拡大もあり、研究開発システムや研究のやり方は大きく変わってきている。CRDSでは1月に報告書¹も出した。この流れの中で、科学研究の方法論もこれから変化していくのではないかと見ている。今日は、その先に何があるのかということを考えてい


図1-1に示したように、背景としてはこのような研究開発のシステムのデジタルトランスフォーメーション(DX)に加えて、機械学習技術の進展がある。ブラックホールシャドウの可視化の例に見られるように、機械学習はすでに多くの分野でコモディティツール化している。これは、新しい科学的発見の方法論が生まれつつあるという兆候だと捉えている。


一方、科学者も人間であるので、その認知能力のいろいろな限界による影響も少しずつ見えてきている。1人の科学者が読みきれないほどの論文が出版され、見つけたいものが見つけれられないなど影響がある。また、これまで進めてきた要素還元主義が必ずしも有効でない非常に複雑な現象を捉えたいというニーズも増えている。中には、認知バイアスというのはどうしても避けられないところがあり、何らかのツールや方法で抑えるということの必要性が指摘されている。

背景

- 1. 研究開発システムのDX**
 - データ駆動アプローチと計算理論的アプローチ
 - 計測・センサ・ロボット技術とAI技術との融合
 - オープンサイエンス・オープンイノベーション型研究PF
- 2. 機械学習の進展**
 - 教師あり機械学習、パタン認識、スパースモデリングなど、MLはすでに科学研究に必須のコモディティツール(文房具)
 - 医療画像認識では人間の専門家と同等の精度
- 3. 人間の認知能力の限界の顕在化**
 - 要素還元主義の限界(低次元・線形の関数での近似が必ずしも適切でない)
 - 論文数の爆発的増加(情報の地平線問題、マイノリティリポート、曖昧性)
 - 認知バイアス(仮説近視眼、テキサスの狙撃兵、非対称の注意、Just-so-storytelling)








© 2021 CRDS | 1


図1-1 本ワークショップ開催の背景

1 JST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, CRDS-FY2020-RR-06 (2021) <https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2020-RR-06.html>

人工知能（AI）や機械学習技術を科学研究に適用するということの可能性や問題点はいろいろ議論され始めている（図1-2）。本日お招きした、北野先生、丸山先生の発表では必要となる研究開発のほかに問題点も議論されている。また米国エネルギー省からは、これを計算基盤の側からもしっかり支えなければいけないというレポートも出ている。英国チューリング研究所によるイニシアティブも進められている。国際競争の観点からも、今すぐこの方向を強力に推進しなければいけない時期にきていると見ている。

AIや機械学習と一口に言ってもいろいろな技術があり、すでに様々な分野で目に見える形で役に立っている。例えば図1-3左に示したような認知バイアスのない仮説空間の探索というのは様々な分野で出てくる一般的な問題である。材料探索や創薬などでは、実験回数の最小化や機能の最適化など、計算機による仮説空間の探索は非常に有効な手だてになりつつある。


また、もう一つはとても複雑なシステムをモデリングするときに、機械学習ないしはニューラルネットワークが役に立つのではないかと考えられている。大きく期待されている分野としては、生命科学、とくにシステムバイオロジー分野だろう。それに加えて、量子多体系などを含む物理の世界でも期待が高まっているのを見ている。本日のワークショップでは前半にこの辺りのところの議論を期待している。

AI・データ駆動科学の兆し

網羅的探索・仮説検証、深層学習などにより、人間の認知限界や認知バイアスを超えた科学的発見がこれから大きく進展する兆し

Nobel Turing Challenge


AIによる科学的発見の可能性に対するグランドチャレンジ [北野, 2016]



<https://ci.nii.ac.jp/naid/110010039613>

高次元科学


人間に扱えない規模の多パラメータの現象から規則性を発見できる [丸山, 2019]



https://japan.cnet.com/blog/maruyama/2019/05/01/entry_30022958/

AI for Science

人間研究のハイスループット化にむけた技術開発・基盤整備・人材育成の重要性が指摘された[DoE, 2020]



<https://www.anl.gov/ai-for-science-report>

© 2021 CRDS | 2


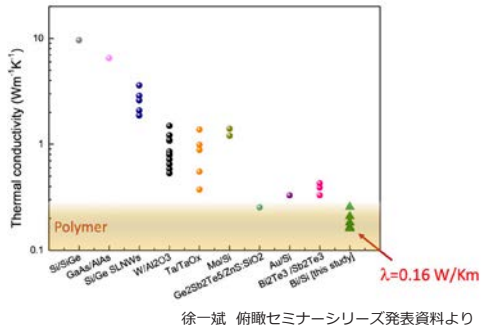


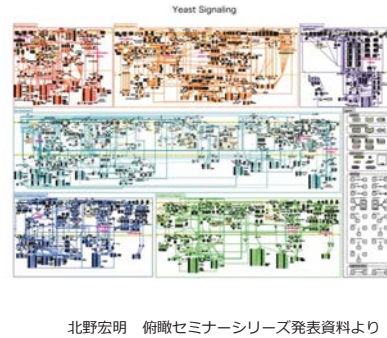
図1-2 AI・データ駆動科学の兆し

科学技術上の効果

認知バイアスのない仮説空間の探索



複雑システムのモデリング



材料 非従来型の高性能材料の発見。仮想スクリーニングで実験回数を最小化。

創薬 人間が研究しにくい相互作用が弱い化合物まで探索（ロングテール）。

生命科学 要素還元できない代謝パスウェイなどをシステムとして分析・理解。

物理 量子多体系などの複雑な系の記述。逆問題・システム同定問題を解く。

© 2021 CRDS | 3



図1-3 科学技術上の効果

今、科学を進める方法として理論科学、計算科学、実験科学、データ駆動科学とあるがこの先、計算機の力、ITの力に期待しているところは、とくに「仮説」に関することである。一つはこれまでの知識や解釈から新しい仮説を生み出してくるプロセス（＝仮説推論）である。ここで、人間の認知能力を超えた仮説の生成であったり、探索であったりが可能になると期待される。一方、自然科学では仮説は検証される必要があり、たくさん仮説が生成されても高速に検証できなければボトルネックとなってしまふ。したがって、仮説検証・評価のハイスループット化も同時に進めなければいけないと考えている。

今日、議論したいのは、主に3点である。まず現時点でどのようなツールや方法論が用いられているか眺めたい。ツールといってもソフトウェアや実験装置だけでなく、例えば数学的な手だてや因果というものに対する統計的な手続きなども含める。そういったツールがいろいろな分野でどのように使われているのか、また、そこでどういう課題があるかについて議論し共有したい。

もう一つは、分野による違いを議論したい。タイトルでは「人工知能と科学」とあたかも「科学」を一つのもののように書いているが、実際には非常に多様な分野があり、ツールの使われ方も様々だろう。機械学習に対する考え方や必要性というのも分野ごとに異なると思われる。議論を通じて、その差をつぶさに見たい。またその逆に、自然科学一般に、普遍的に使えるものがあるとすれば何なのか、分野を越えて共通したものはあるのか、ということも議論したい。

最後に、CRDSが、あるいは我が国がこの話を進める上でどういったことに気を付け、どのような戦略を持って、どういった方策を打つべきかを議論したい。研究費や研究プロジェクトという形だけではなく、これを進めるために必要な仕組みの部分についても議論できればと思う。

2 | 科学を俯瞰する

2.1 物理 ～機械学習と物理学～

橋本 幸士（大阪大学）

私の専門分野は理論物理学、特に素粒子理論で、先ほど話の出た還元主義的な事柄に根ざした分野である。そういう分野の人間の私が機械学習を広く物理学に適用することに関して、いろいろな研究者と交流したので、その報告ということになる。まず、初めに現状と物理理論のトピックについて簡単に紹介し、第2番目に位置づけと今後の課題についての私見を、話したいと考えている。

「ディープラーニングと物理学 2020」という、オンラインのセミナーシリーズを5月頃に始めて、現在、およそ1,000人の企業と大学の研究者がこちらに登録されて、隔週で熱い議論が戦わされている。メンバーには、機械学習の研究者もいれば、物理の研究者、学生も含めてたくさんいて、楽しい盛り上がりを見せている。このセミナーは日本語で行っているが、アメリカとヨーロッパが入るタイムゾーンでも同じようなものが起こっていて、こちらも1,000人以上の登録者があり、非常に似た形になっている。日本物理学会でも同テーマでシンポジウムを企画したところ、たくさんの方が興味を持っている。

このような盛り上がりは、多くの物理学の個別分野それぞれで起こっており、各分野で機械学習を取り入れた研究が独立に発表されるだけでなく、機械学習と例えば素粒子物理とか、機械学習と何々というふうな形の研究会が世界各地で開催されている。その数も膨大になってきており、私の専門の超弦理論の分野だけでも、年におよそ7～8回ぐらいオンライン国際会議が行われているという感じで、世界各地でそういう状況になっている。

機械学習というと、もちろん、画像認識の進展というのが非常に顕著で、その物理学への応用というものは、このブームが来る前からずっと行われていたものである。最近超新星の検出に、機械学習による認識が使われて、効率を大きくアップしたという話は記憶に新しい。大量のデータが得られる素粒子実験において、ジェットから素粒子をどういうふうに分別するかといったことにも、機械学習的なテクノロジーが20年以上使われているという現状がある。よって、実験技術に関していえば、機械学習が得意とする部分を応用することはトリビアルになされていて、最近のテクノロジーを使って、研究者がそれを更に改良できないかというふうな状況にある。

一方で、この3年ぐらいの顕著な発展として、実験ではなく理論分野で機械学習的な手法が使われるようになってきたという点が新しく、これが流行を見せているということである。図2-1-1に挙げたのは、私が気付いたトピックのリストだが、これら以外にも大きな発展がたくさんあり、その一部だけを紹介している形になる。

重要なので、上から少しずつコメントする。まず、「量子多体系の基底状態の波動関数の構築」。これは物質を知るために量子的に物質の相を決めようとする、つまり、電流が流れるかどうかとか、そういうことを知ろうとすると、物質の原子の配置から決まるハミルトニアンを決めて、それから、決まるシュレーディンガー方程式を解いて、基底状態の波動関数、電子の状態を求めるとい、一連の手続きが物質科学の基礎になる。ここで、波動関数を求めるというのが大変難しい問題で、そこに機械学習から考えられた手法は最近大きく発展しているという話題がある。これについては後で説明する。

2番目の「ニューラルネットワーク (NN) の時空解釈と物理系への応用」は、自分の研究で恐縮だが、ニューラルネットワークがどういうものかということ調べる研究である。量子重力分野ではネットワークが本質的な役割を果たしている。

1-1

「機械学習と物理」のトピック

量子多体系の基底状態の波動関数

[Carleo Troyer Science355 (2017)602]

NNの時空解釈と物理系への応用

[Tanaka Tomiya Sugishita KH Phys.Rev.D98(2018)046019]

自己学習モンテカルロ、有効理論構築

[Liu Qi Meng Fu Phys.Rev.B95(2017)]

分子動力学法

[Behler J.Chem.Phys.145(2016)170901]

相図の予想、相転移の検出

[Ohtsuki Ohtsuki JPSJ85 (2016)123706]

[Tanaka Tomiya JPSJ86(2017)963001]

物理量の関係間の写像

[Fujimoto Fukushima Murase Phys. Rev.D98(2018)]

解の探索と分類

[He Phys.Lett.B774(2017)564]

[Carifio Halverson Krioukov Nelson JHEP09(2017)157]

図2-1-1 機械学習と物理に関する重要なトピックス

3番目の「自己学習モンテカルロ、有効理論構築」は、量子計算をしようとする確率に支配された多くの配位を自動的に計算機で生成する必要があり、これをモンテカルロというが、大変時間がかかるためスーパーコンピュータを使う必要がある。その操作を如何にして効率よく行うかという研究がこの30年続いているが、そこに自己学習法という機械学習の手法を使い、有効ハミルトニアンというものを構築して、それで、経路積分という量子計算をスピードアップするという研究が最近、非常に盛んになっている。ここで得られた有効理論というのは、元々の理論を新たに少ないパラメーターで記述するハミルトニアンになっているので、そこから物理が出てくるという可能性も大いにあり、そういう議論がなされている。

4番目の「分子動力学法」については、たくさんの粒子があって、それをシミュレーションしたい時に用いるが、本当に全ての相互作用を入れてシミュレーションを行うのは膨大な計算コストがかかるため、有効的な相互作用というのを人間が手で置き換えて計算していた。その人間が手で置き換える部分を機械学習によって効率よく行うこと、すなわち、専門的な職人芸を機械学習に置き換えるといったことが最近なされている。

5番目の「相図の予想、相転移の検出」というのは、実験で到達できないような領域がどのような性質を持っているかを予想するときに、既存の部分が分かっているところ、これを違う物質で学習させて未知の物質についてそれを適用するとか、そういうふうなことが行われている。

6番目の「物理量の関係間の写像」。これは、例えば中性子星のようなエキゾチックな物質において例えば半径と質量の関係、これは非常に大事な天文学的な量であるが、これをクォークの運動方程式からどのように計算するか、この計算手法はおおよそ分かっているが、その間に積分や微分が非常にたくさん入っていて、実際には計算が困難で、実質上の計算職人芸になっている。こういうのを置き換えていって、機械学習で簡単に行うといったモデルビルディングができないかというような話がある。

7番目は数学的な話だが、「解の探索と分類」というのは、例えば整数解しか許さないような整数論の代数方程式があったときに、その解というのはどんなものがあるか、これは数学上の非常に重要な問題だが、ここで強化学習を使ってエージェントに学習させることで、解にたどり着くような手法というのを人間が分かる形で作っていくといった、発展がある。おおよそこれらは非常に理論のピュアなところであり、こういうところで機械学習が活躍し始めているというのは、私には大きい衝撃であった。

以上のトピックスの中から、一番目の内容だけを簡単に紹介する。物質の基礎的な問題としてハミルトニアンという物質の性質を規定する大本があったときに、そのハミルトニアンで書かれるシュレーディンガー方程式を解きなさいという問題がある。その解のことを波動関数というが、原子の数が多数ある場合、その分だけ波動関数のXに当たる部分が多くなり、この関数を決めるというのは大変な問題となる。そこで、これまで、物理学者たちは仮定関数として簡単に物理的直感に基づいた関数形を使って近似を行ってきた。最近、ニューラルネットワークの登場により、機械学習の万能近似定理に基づいて、ニューラルネットワーク自身を波動関数だと同定することで、これまでと異なる新しい仮定関数が登場した。これが2017年のことである。

1-5 ニューラルネット状態が勝る場合がある

例: 2次元反強磁性
ハイゼンベルグ模型
[Carleo, Troyer '17]

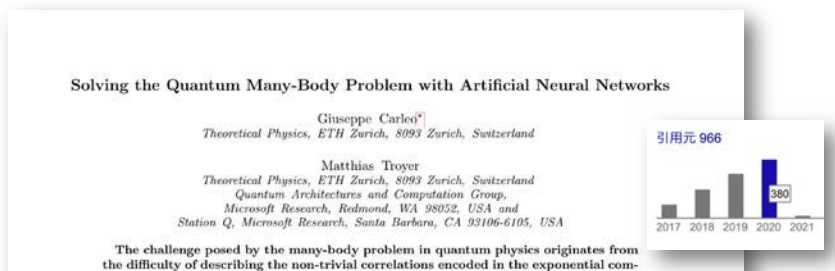
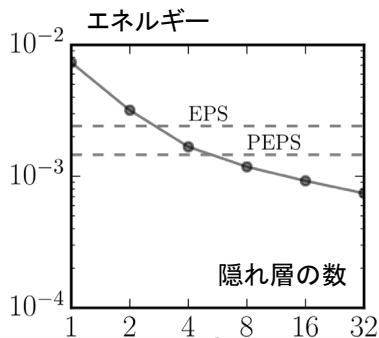


図 2-1-2 ニューラルネットを用いた波動関数の推定

実際にそれを使ってエネルギーを下げるようにパラメーターを調節していくと、図 2-1-2 に示すような、従来の限界を超えた低いエネルギーの状態が発見され、この手法が大変簡単なことから、多くの人がこの研究を参考にして様々な物質系の波動関数を解くようになった。この論文の現在の被引用件数は1,000 近くに達していて、一大分野になりつつある。こういう具体的な応用例として成功したものが幾つもある。

後半5分間を使って、物理学における機械学習の位置づけと今後の課題について私見を述べる。

まず、歴史的な観点として物理学がどう革新を起こしてきたかということを復習すると、顕著な例はデータ科学としてティコ・ブラーエが惑星の観測を行って、その弟子のケプラーがケプラーの法則を発見したという歴史がある。

この歴史を科学の流れということではなぞらえて考えると、図 2-1-3 に示すように、まず、ティコ・ブラーエの実験結果があり、そこからデータを取り出す。一方、それをモデル化した(=顕わな関数形を決めた)ケプラーがいて、その関数形でデータをフィットすることで、関数形のパラメーターの値が決まり具体的な関数が得られ、さらに、具体的な関数を用いて予言することで実際に実験による検証が可能になる。この一連の手続きが「実験と理論が科学の両輪である」と言われるゆえんである。

機械学習は現状、どこにあるかというと、簡単のために教師付き学習、教師なし学習、強化学習の三つの観点でいえば、教師付き学習は先ほどの、ニューラルネットワークで波動関数を構築する話で出た仮定関数と同様に、関数形の制限が取り払われてフィッティングができるようになった状態と言うことができる。教師

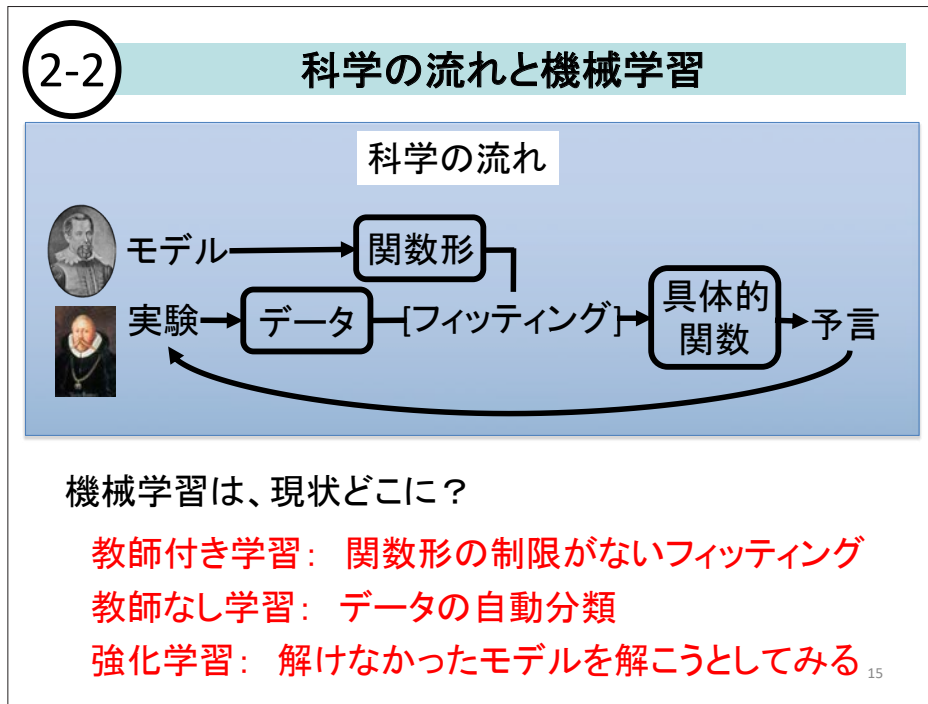


図 2-1-3 科学の流れの中の機械学習の位置づけ

なし学習はどこにあるかという、データを自動的に分類してくれるというところではないかと思う。また、強化学習はモデルから関数形を作り出す部分を効率よくするという可能性があると考えられる。もちろん、これだけではないが、このような形でこれまでの科学の流れの中に、機械学習を押し込めることができると思う。

物理学における機械学習の役割は何だろうかという話があるが、私は、「第3の実験」と呼ぶべき部類に入るのでないかと思う。第1の実験は実世界での実験、第2の実験は数値実験、これは1990年代にスーパーコンピュータが現れて計算機科学として大きな進展を出しているが、仮想世界での実験にあたる。今、来ているのは物理的な観点から見ると第3の実験に相当する。

ニューラルネットワーク、AIはブラックボックスだと言われるが、その話もグレーであろう。そういうブラックボックス的なところから、どういう数値結果が出てくるのかということ人間がどこまで解釈できるのか、これは実験に当たると考えている。よって、それを解明するという観点も含めて、これは第3の実験と呼べるのではないかと思う。

この第3の実験が可能にしつつあることとして、次のようなことがある。

一つ目は「職人芸の置換」。今まで例えば人生をかけて、この技術を磨くといった科学者は意外と多い。その人に依頼して、それで初めてこのシステムが動くとか、例えば大きな電磁石のスイッチを入れる人はこの人しかできないといった、そういうことはよくある。理論についてもそういうことがあり、職人芸の置換ということが機械学習で期待され、実際に行われていることだと思う。

2番目のところは「解や理論への示唆」ということである。機械学習はブラックボックスだといわれるが、たくさんのデータをうまく解釈できる形で提示してくれるような、そういうシステムに組み上げることもできる。出てくるパラメーター数は、例えば1個から100万個までいろいろ変えることができる。それを自由に変えてみて、その中で解釈可能な、そして、そこから物理的な原理を人間が抜き出せそうな、そういうふうなものを示唆してくれる形の機械学習の利用というのは大いになされていると思う。

3番目の「情報科学との融合」は、期待を込めていっている。機械学習の動作原理などに、今まで物理学が大きく影響してきたと思う。情報科学と物理学が機械学習というプレイグラウンドで融合することで、お互いにより研究の発展が見込まれるのではないかということで、現在、こういう研究も大きく飛躍しつつあるところだと思っている。

機械学習の物理における位置づけをもう少し長い目で見てみると、そもそも物理学は、素粒子、原子核、宇宙、物性のように分かれており、これは解くべき問題がエネルギースケール別に分かれているからである。ただし、そこでは数理という大きな横串があるので、この数理のうちの一つとして機械学習を位置づけることができれば、物理学の広範な応用が期待できるというふうに考えている。例えばトポロジーという数理、これはノーベル物理学賞が出たりしたが、そういったものと同様に機械学習が位置づけられればよいと考える。

最後に、今後について簡単に説明する(図2-1-4)。まず、今、勃興しつつある機械学習と物理学の融合分野について、地図をまず作らないといけないと考えている。この3年ぐらいは、研究者の個人の直感で、もしくは個別のつながりで進めていく例が多く、全体を俯瞰するというような機会があまりなかった。機械学習

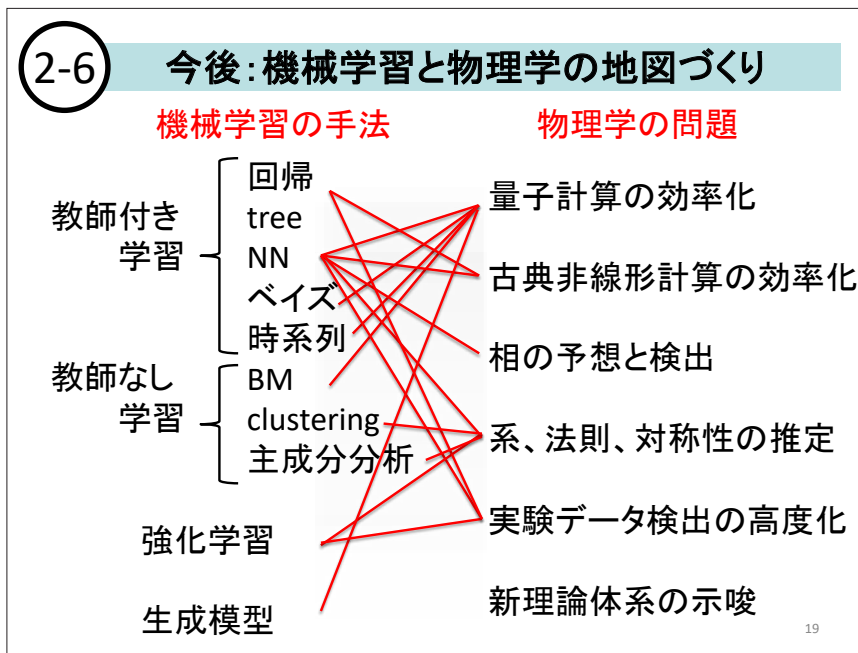


図2-1-4 機械学習と物理学の今後

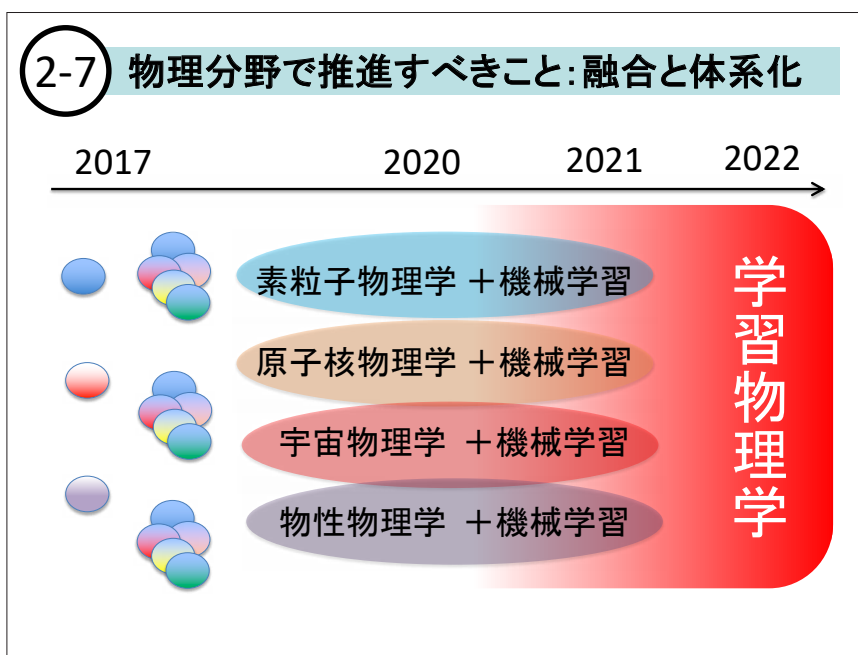


図2-1-5 融合と体系化

の手法は多彩であるし、物理学の問題も前述のようにエネルギースケールによって個々の多くの問題があるため、これらがどんなふうにつながり得るのかということを見ても大きな目で見ることが、まず、直近で一番大事なこと、今年、来年に、やらないといけないことだと思う。

もう少し長い目で見ると、物理分野で、特に理論で推進すべきことは、図2-1-5のようになる。2017年頃に個々に非常にすばらしい研究が生まれて、それに追随する形でたくさんの研究が生まれたが、それらは今のところ、まだ、個々の研究であり、これから分野に染み入るような形で、発展しているという状況にある。ただし、横のつながりというのはいまだにあまりなくて、それぞれの分野で互いに意思疎通しながら、それぞれの問題を解決しようとしているという段階にある。先ほど述べたように、機械学習は横串を入れる数理体系でもあるので、今後の発展をもう少し加速したいと思うのであれば、これらにきちんと横串を入れて地図を作って、「学習物理学」とでも呼ぶべき新しい学際領域で、物理学と学習の融合分野を位置づけ、そこに行けばどういうツールがあるか分かるような形にして、研究者に提供するというのが、スタンダードな物理学と機械学習の関係構築になるのではないかと思っている。

【質疑応答】

Q：人工知能学会と物理学の間で取り組みを行って、これを加速していくにはどうしたらいいかという点に関して、今、何か考えはあるか。

A：共催シンポジウムとか、たくさんの研究者、科学者が同時に参加できるような場を継続的に作るということはもちろんだと思う。しかし、新しい領域と作るというのは先ほども述べたように時間がかかる。そういう方向よりは、もう少し柔軟な、例えば現在、オンラインもあるので、そういうものを利用して、合同で研究者がたくさん集えて学べるような、ものを開催して、それを継続的にやっていくということが有効だと思う。

Q：そういった、合同会議の中で違う分野の人の共通言語みたいなものが生まれつつあるものなのか。

A：言葉の問題は、どの研究者も入っていくときにいろいろ障壁になると思う。私はそういうのを解消しようと思って、物理学の言葉で機械学習の教科書を書いてみたりしたが、そういう考えが広がっていかないと、個人の力だけでは難しい。翻訳とか、学生の教育の面、で継続的に接続しないといけないと思う。研究者と学生を教育するという、そういうところも、物理学と人工知能学会で一緒にできると良いと思う。

Q：人間の認知能力を超えたような科学的発見をいかに触発していくのかというところが非常にポイントかと思っている。機械学習によって、我々が扱ってこなかったようなところで新しい発見をしたときに、我々の生物科学的な脳が扱えるようなコンパクトな表現で法則を記述できるという保証は全くない。そういったことを踏まえた上で、今後の計算技術、機械学習の技術に求められるものというのは今までの延長線上でいいのか、それとも全く新しいアспектが必要になってくるのか。

A：私は、今まで科学はきちんと進展してきたと思っているので、長い積み重ねの末に確立された科学的な手法に今の機械学習の進展を落とし込むことでよい進展があり、人間が予測できる形でサポートできるのではないかという気持ちがある。だから、先ほど示したような、今までの科学の流れのどこに機械学習が位置するのかということを考えてみたりした。

しかし、実際に人間の認知が可能でないような科学は可能なのかというのは面白い問いだと思う。

それに対する答えは、それがどういうふうになるのか分からないというのが正直なところである。自然というのは分からないもので、それを分かろうとするために科学が進展してきた。機械学習というのは、それを分かった形に最終的にはしてくれる、そのつなぎの部分かもしれないという意味で第3の実験というふうに述べた。真の実験対象となる自然は一つしかないが、機械学習は人間が用意できる様々な実験の環境を作ってくれるという意味で、人間が理解しやすいところから理解しにくいところまで連続的につないでくれる。そういうものが機械学習なんじゃないかというふうに物理の立場からは思う。

2.2 AI 駆動型生命科学の実現に向けた研究戦略

高橋 恒一（理化学研究所）

サイエンスの研究現場における機械学習技術の展開が足元でかなり進みつつあるが、本発表では、その先にある科学研究の自動化の可能性について、生命科学分野を中心に述べる。

科学研究というプロセスを全部自動化するのが私のライフワークだ。仮に科学研究がそもそも全自動化可能なのかどうかという大きな疑問は置いておいたとしても、科学研究というものを自動化するためにはどんなシステムを構築したらよいか、という風に構成論的視点を持つことは、科学研究を構成する様々な知的プロセスのより深い理解につながり、そして科学研究自体の効率化、加速にもつながっていくと思う。つまり、「科学の科学」の視点が非常に有用なのである。このテーマについては何本か論文を書いている。

データをじっと眺めてその中に含まれるパターン・法則性を抽出することは、いわゆる第1の科学：経験記述に該当し、帰納的なプロセスである。これをコンピュータ化すると第4の科学とJim Grayが呼んだデータサイエンスになる。一方で、仮説命題やモデルのような科学的知識を出発点として、そこからどういったものが観測されるかを予測することは第2の科学に該当し、演繹的なプロセスである。これを前方推論やシミュレーションのように計算機化すると第3の科学、計算科学になる（図2-2-1）。

2 科学を俯瞰する

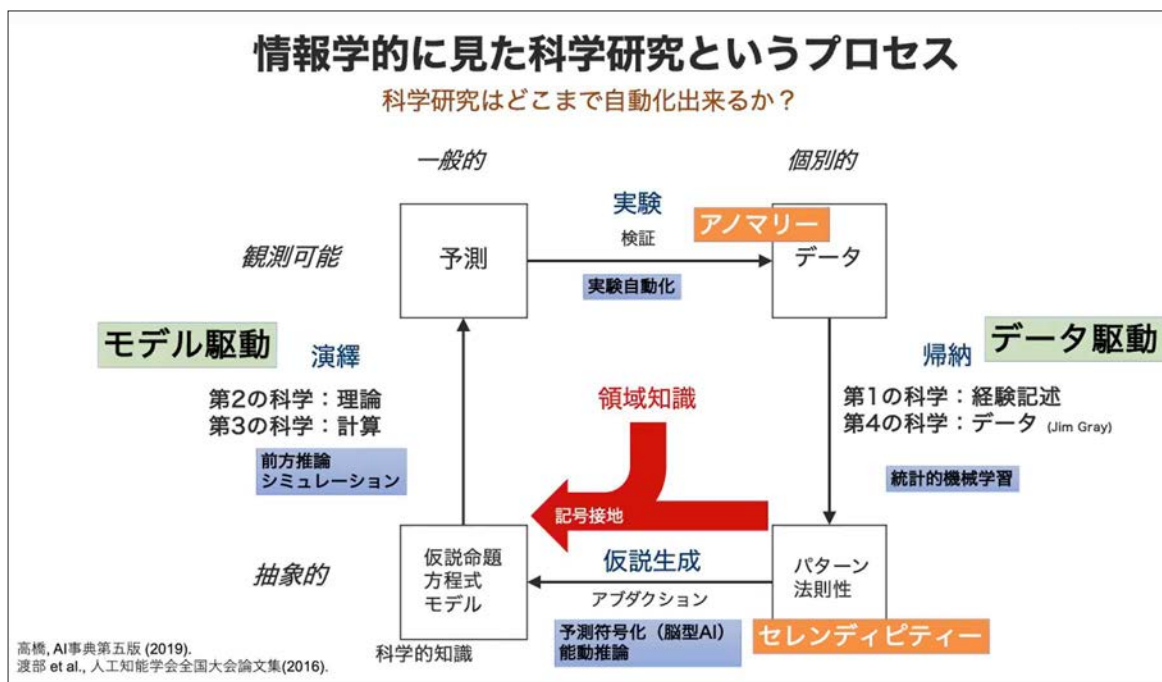


図2-2-1 科学研究のプロセス

ここでポイントとなるのは、ここで見つけたパターンや法則性はそのままでは科学的知識ではなく、既存の科学的知識、領域知識と接地し、この文脈の中で説明されて初めて科学的知識に組み込まれるということである。また、予測に対して実際に実験をしてみた結果、予測と実験結果が合っていればこの仮説は強化されるし、合っていなければアノマリーという形で新しい発見を触発する。また、図ではパターン・法則性が仮説命題やモデルを生成するというプロセスだが、科学史を考えるとセレンディピティで起きてきた大きな発見がたくさんある。偶然や予想外のものをどのようにして包括的、形式的に捉えるべきかは非常に重要な視点である。そして、この図で述べたいことの本質は、右側の帰納的なデータ駆動と左側の演繹的なモデル駆動をつなげ

ていくことの重要性である。そのために現状欠けている部分を補完、強化してゆく手段として実験の自動化・ロボット化と次世代の人工知能技術を使った仮説生成のハイスループット化を使ってゆこう、というのが本日の最も重要なメッセージであり、私が第5の科学と呼んでいるコンセプトである。第5の科学については2014年ぐらいから文科省や経産省を始めいろいろなところで話をしている、最初はほとんど門前払いであったが、今回こういったワークショップに誘っていただいたり、またCSTIでも取り上げていただいたりと、非常に世界が変わったと感じている。過去の産業革命は工場が起点だとすると、次の産業革命の起点は研究開発現場になるかもしれないとも考えている。

こういったAI駆動科学は、様々な科学分野の中でどういった分野を起点に考えていけばいいのか。例えば、論理推論系、確率モデル系もあるし、ロボティクスが使いやすい組合せ探索系である物性物理や材料分野も非常に有望であり、様々な候補がある中で、私は細胞生物学が最も筋がいいと考えて取り組んでいる。細胞は十分複雑な研究対象である一方、ラボの中で実験系が閉じており境界条件が非常によく定義されていることから、ロボット実験による力業での大量データ取得が可能である。さらに、バイオロジーの知識表現は、オミックスやパスウェイグラフといった構造的によく整理された形で表現しやすいという特性があり、仮説探索空間の定義と限定が非常にやりやすい。

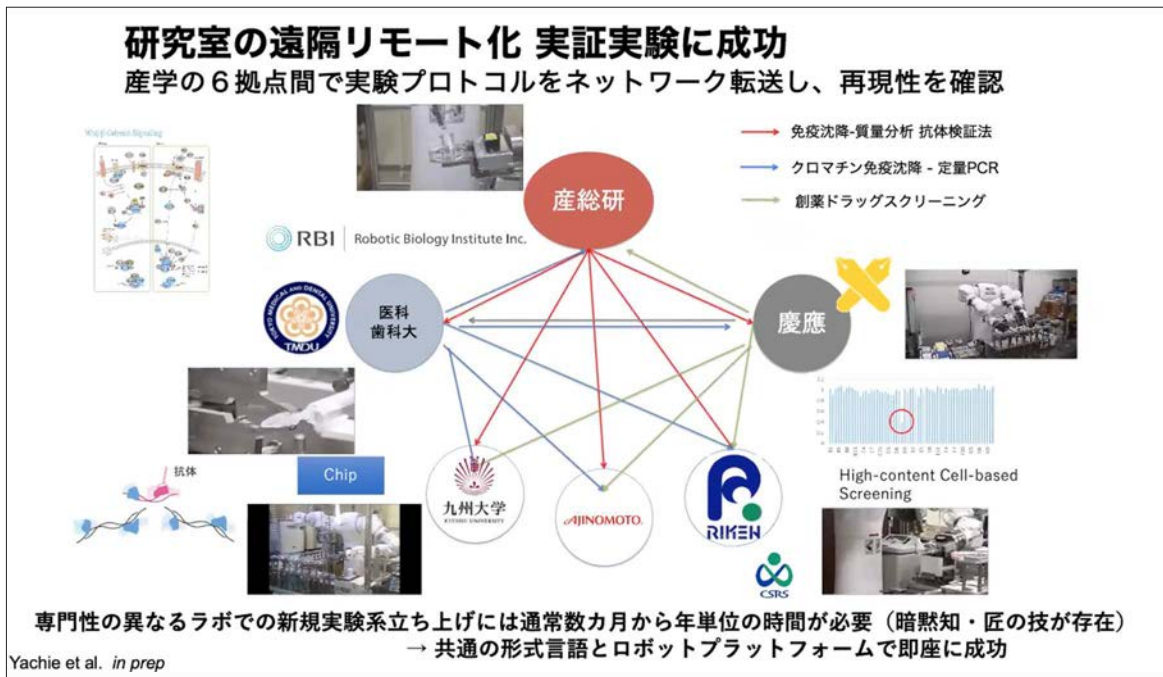


図2-2-2 遠隔リモート研究室の実証実験

ここから、まずは細胞生物学の実験自動化について、続いて後半に少しAIの話をしていただく。

JST未来社会創造事業で、ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速という、私が代表を務める本格研究プロジェクトが2021年1月1日から走り始めた。AI駆動の前にまずはその基礎として、生命科学実験をプログラミングとして再定義することを目指すプロジェクトである。過去にやった実証実験では、国内6か所にロボットを置いて、専門性が異なる実験室の間で実験プロトコルをインターネットを介して転送し、本当にその実験が再現できるのか確認するという試みを行なった(図2-2-2)。実験には、私がかつてCIOとして関与していた産総研技術移転ベンチャーであるRBI株式会社が開発した双腕型実験ロボット、ラボドroidを用いた。通常、専門性が異なるラボで新しい実験系を立ち上げようとする、数カ月、年単位の時間が必要だが、即座に再現できるということを実証した。

ここで大事になるのが、実験プロトコルの記述である。我々は、実験手順をプログラミングとして表現するためのLabCodeという言葉を開発している。この言語により、実験操作をグラフの形で書き下し、実験操作間の並行性を検出してラボの中にある異なる主要ロボット機器に割り振って並列スケジュールにするというような技術を確認した。この技術は将来の大規模ロボット実験センターの基礎技術になると思っている。

また、こうした基礎技術の応用として完全自律継代培養技術の開発を行なった。細胞の継代培養という操作は、研究現場では労働環境面での足かせになってきた。ロボットと顕微鏡を組み合わせ、顕微鏡から得られた画像から細胞状態を推定し、それを基にモデルベースで今後の状態推移を予測して、ルールベースで判断して実験をする、というクローズドループのシステムを作った。去年のコロナの状況でラボに全く立ち入れないという状況で、無人で稼働して貴重な細胞サンプルを守ることが出来た。

更に進んで、同様のロボットを使って、ヒトのiPS細胞から臨床グレードの網膜の細胞を分化誘導するための最適パラメータをコンピュータに見つけさせる、という自動実験計画も試みた。非常に巧みな技を要求し通常では40日間かかるプロトコルをロボットで実装し、ベイズ最適化を使うことで、従来人手では数年かかっていたような条件探索が半年で完了したということで、大きな研究加速効果を実証した。

我々は最終的に、ラボというものをサイバーフィジカルシステムとして再定義したいと考えており、そのためにLDOS (Laboratory Distributed Operating System) と呼ぶオペレーティングシステムを開発している。搬送系や記述言語、ネットワークシステム、ワークフローエンジン、UIといったものをパッケージとして、1～2年ぐらいかけてロボット実験センターを建設しようと取り組んでいるところである。

私の所属する理化学研究所生命機能科学研究センター (BDR) においては、研究を構成する様々なプロセスの自動化を目指したセンタープロジェクトを立ち上げた。BDRを構成する全ラボ数66に対して17ラボが参加している。

LASA (Laboratory Automation Supplier's Association) という学会も立ち上げた。去年10月に年会を開き、研究機関86、企業173社含めた600名超に参加していただき、JSTにも後援いただいた。分野として非常に盛り上がる兆候が見えて来たと感じる。

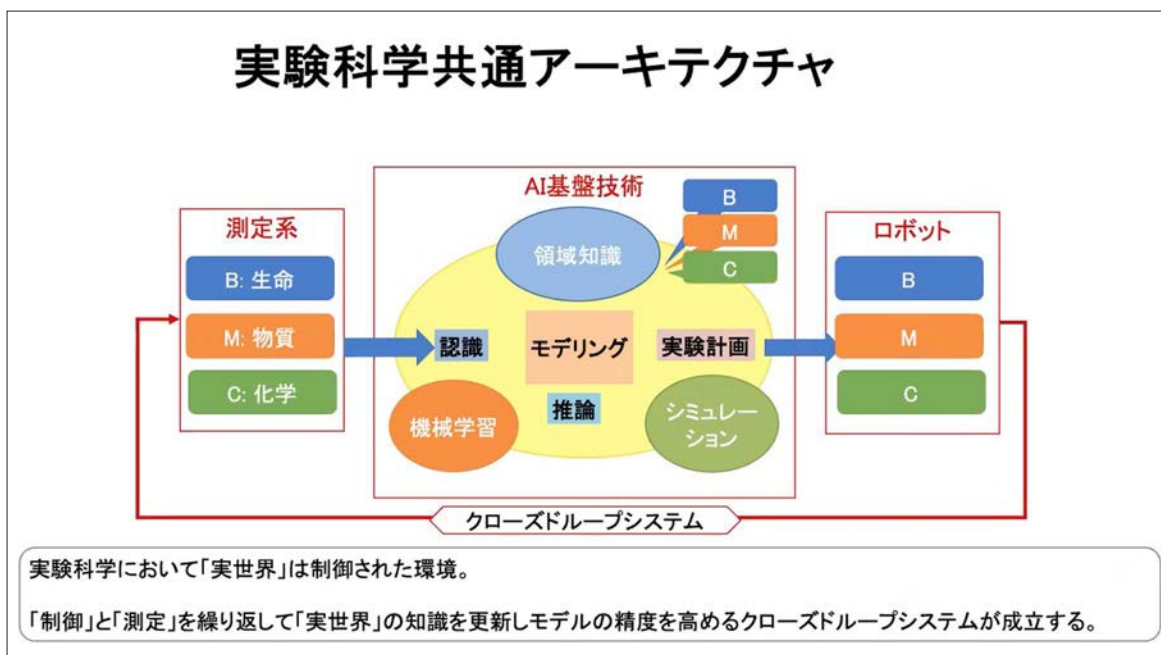


図2-2-3 実験科学共通アーキテクチャ

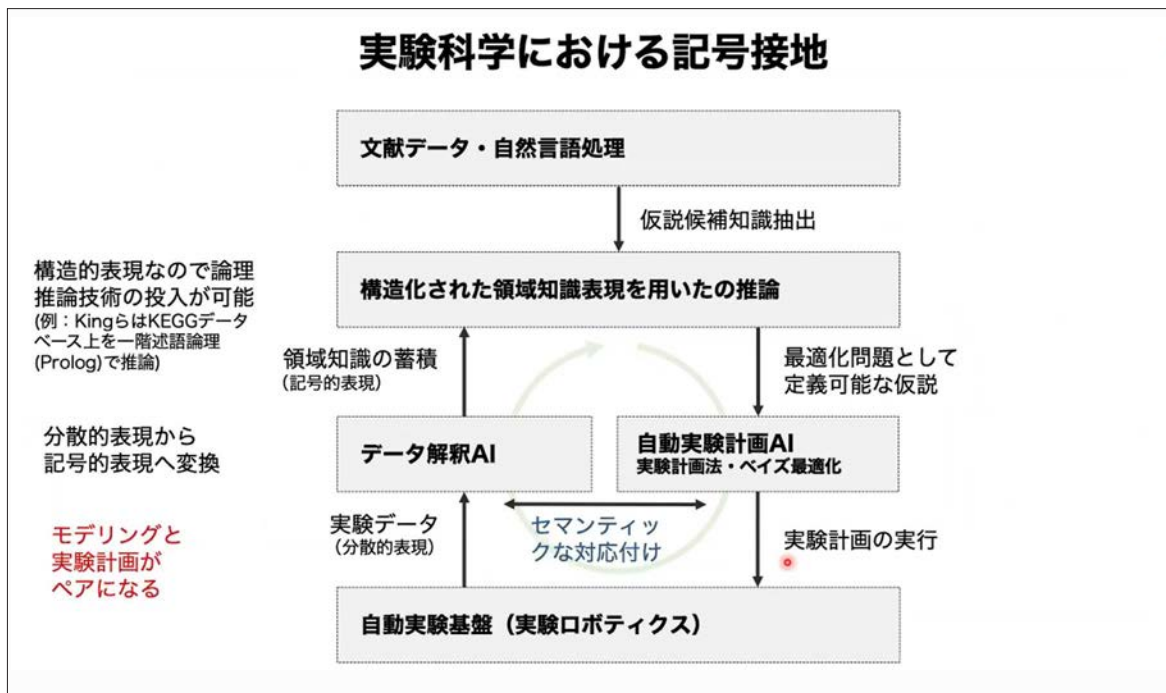


図 2-2-4 領域知識と実験データの接地

後半はAIの話をしたい。今までのAIの歴史を考えると、アルファ碁や定理証明、それからスタンフォード大のMYCINという投薬計画を自動作成するエキスパートシステムのように、比較的閉鎖系に近く形式的によく定義された問題については多くの成果を上げている。一方で、実世界、つまり開放系において一般的な課題に対応出来るAI、いわゆる汎用人工知能(AGI)の開発はAI研究の長年のゴールであるものの、まだまだ道半ばである。AGI開発に向けては未解決問題がまだまだ幾つも存在すると思われる。そのような状況で、実験科学では、前半で述べた通り、実験室という閉じた環境、境界条件が設定され、そこでロボットにより行われる実験操作は物理的に定義されており、測定系として何を測るかも決まっているために、半閉鎖系の状況を作り出しやすい。つまり、実験ロボットと測定系をうまく組み合わせることでクローズドループのアーキテクチャを構成することが出来れば、現状のAI技術であっても比較的働きやすい状況を作り出すことが可能だ。領域知識やモデルベースのシミュレーションも組み合わせながら実験計画を連続的に生成するようなやり方であれば、モデル駆動とデータ駆動の融合のプラットフォームとしても使える(図2-2-3)。

例えば、蛍光タンパク質を対象とした場合、実験として行なう遺伝子変異株の調製は、プロトコルとして構造化されている。また測定系は、蛍光の波長もしくは強度の測定とよく定義されており、領域知識としては配列、構造、文献といった情報がデータベースに大量にたまっている。測定系から出てきた数値のデータを、グラフニューラルネットワークなどを用いて構造的に定義した上で、シミュレーション等も含めて幾何学空間にマップし、次の実験計画を立てる。

この時、一番ボトルネックになりつつあるのが、基盤としての実験ロボティクスから出てきたデータを、上位にある既存の領域知識にどうやって接地するのかという点である。ロボット実験の場合、実験計画の部分からループになっているので、実験計画を立てる時点で実験計画プロトコルをセマンティックにアノテートした上で、そのアノテーションを用いて実験データの解釈を行なうことができる(図2-2-4)。

例えば、蛍光イメージングの場合だと、実験を計画する時点でどの分子を光らせているのか、どの分子の蛍光タグを付けたのか分かっているため、光っているものは恐らくこの分子だろうというストレートな推論が成り立ちやすいことから、分子構造や分子間の相互作用などの領域知識を用いた推論も可能となる。例えば、阪大の上田昌宏先生の研究で、細胞表面にある上皮成長因子の分子にGFP(緑色蛍光タンパク質)をタグし

て粒子追跡し、そのintensity、diffusivity分布から統計モデルとして分子間のインタラクションネットワークを抽出するという事に成功した。一方我々の研究室で、反応ネットワークモデルを起点に1分子粒度をシミュレーションして、さらにその結果に基づいて顕微鏡画像を生成モデルとしてシミュレーションする手法を開発した。そうすると、生成されるであろう実験データを生成モデルとして予測することができる(図2-2-5)。上田先生の研究はデータからモデル、我々のシミュレーションはモデルからデータにあたるが、この実験により生成された統計モデルがイコール仮説やモデルではないということがポイントであり、実験計画を立てる時点で、何を光らせるのか定義するといったセマンティックな情報から実行可能なモデルに持っていくことができると、一つのクローズドループが実証できるのではと考えている。

この分野で先行しているRoss D Kingは、出芽酵母の代謝モデルと遺伝子間制御ネットワークを対象として、推論してモデルを改善する、というループを回したが、我々の試みと構図としては同じである。違いがあるとすると、我々は反応ネットワークモデルをボトムアップに構成することを目指しており、この辺りには将来性があると考えている。

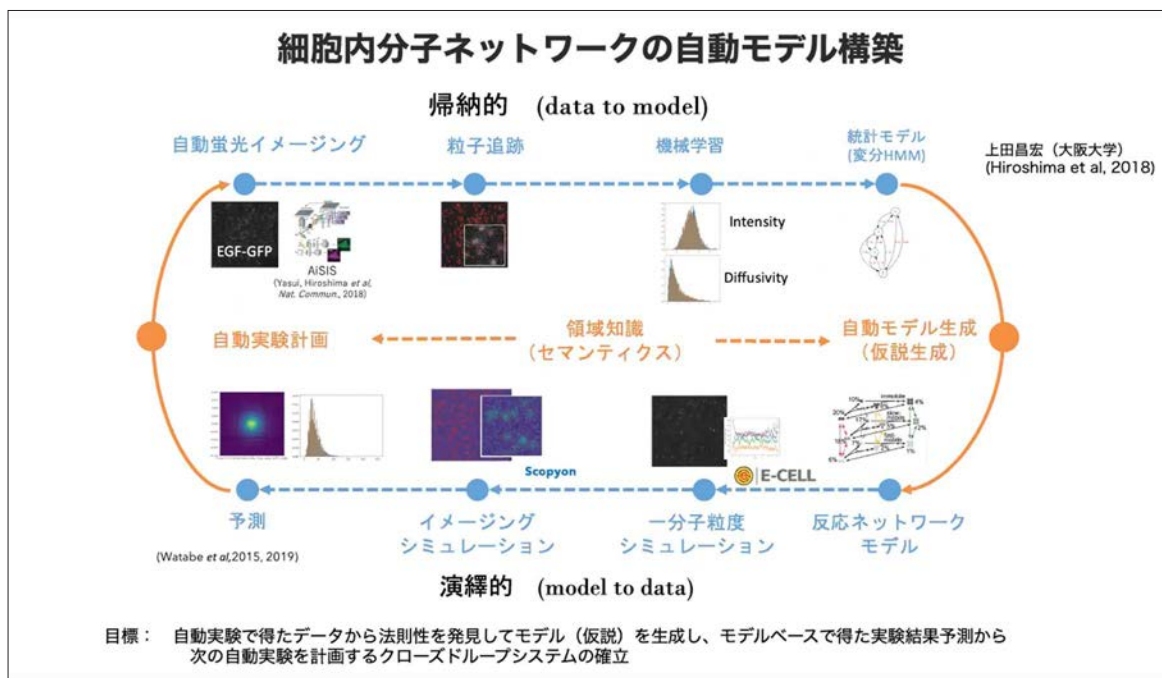


図2-2-5 細胞内分子ネットワークの自動モデル構築ループ

能動推論的なスタイルであるモデルを使った実験計画と結果予測の同時生成に対して、出てきた結果の予測と実験結果、実際の結果との距離を定義できれば、いわゆるアノマリーを形式的に定義し、機械に驚きというものを付与することができると考えている。アノマリーを最大化するように最適化すれば、好奇心の実装になるかもしれないし、あるいは、想定しない実験結果が出てきたときにその好ましさに一定の指標を与えることが出来ればセレンディピティの評価につながっていく可能性がある。

私が兼務する理研の未来戦略室において、長期シナリオとして社会的な課題やインパクトも含め今後AI駆動型科学がどういうふうに進んでいくのかということ、2050年までを想定して検討しているところである。10年ぐらいのタイムスパンで考えてみると、一つの提案としては自動モデリングによる知識発見というのが、手の届く見込みがあるターゲットではないかと考える。対象としては、部分的に未知の内部構造を持ったもの、例えば生命科学の場合は細胞などを対象に予測性を持った実行可能なモデルを自動実験計画と自動モデル改善を繰り返しながら逐次的に自動構築する共通アーキテクチャーを開発した上で、それを各分野に展開し、

それぞれの分野で少なくとも一つの役に立つ知識を発見する、というのが具体的なマイルストーンになると考
える（図2-2-6）。現状の生命科学分野の課題としては、まだまだ実験ロボットは高価格なため、共通で利用
できる拠点形成が大事である。

最後に、今日も参加されている呉羽氏は、AI 駆動型科学の結果として科学の阻害・異質化というものが起

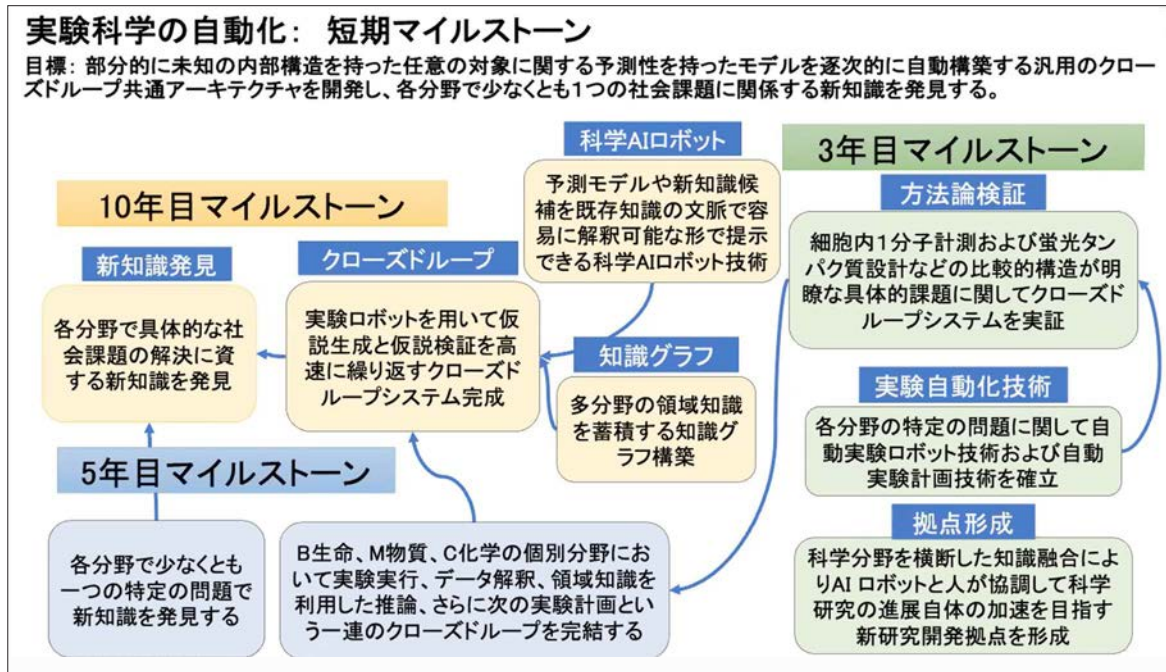


図2-2-6 実験科学の自動化における短期マイルストーン

き得るという可能性を指摘して、私も科学と技術が今後乖離してゆくシナリオをウェブメディアやRISTEXの
小冊子などで発表しており、「科学と技術の離婚」で検索すると出てくるのでご覧いただきたい。日本だと
そうでもないが、欧米では科学するAIにはかなり文化的な抵抗感があると思われる。こういった抵抗感の根
本には、ハードテイクオフシナリオ、つまり機械がやっていることが人間に理解できなくなっていくという恐怖
感があると思う。これを放置してしまうと一般社会の理解を得にくくなる可能性が想定される。それに対して、
本日紹介したようなクローズドループで人間の領域知識に都度接地しながら、逐次的に知識を発見していくス
タイルを確立できるとすれば、そういった抵抗感を回避しつつ進んでいける一つの方策となり得ると考える。

現在、科学研究のスタイルとして、科学的知識というものは客観的・絶対的に存在するものではなく、科
学者のコミュニティの中で共有されて初めてそれが知識として認められるという間主観的な見方が主流と
なっている。ただ、本当に知識が科学者の間で共有されているかというと、実際には非常に専門分化してい
て分断していると思う。こういった分断をうまくつなげて集約するための道具としてAIを使うと、人と機械が共
生したような新しい科学研究スタイルを目指していくことができるのではと考える（図2-2-7）。

人間中心のAI駆動型科学

- ・ 呉羽・久木田(2019)はAI駆動型科学による科学の疎外・異質化(Alienation of science)の可能性を指摘。
- ・ これとは独立に、高橋は「科学と技術の離婚」シナリオを提示 (RAD-IT21 2019.9.14、RISTEX-HITE小冊子vol. 4 p16)。
- ・ 「科学するAI」への抵抗感： 放置すれば一般社会の理解が得にくい状況も想定される。

➡ 自動モデル構築を中心とするクローズドループアーキテクチャを用いて人の領域知識(モデル)へ都度接地しながら逐次的に新知識を蓄積すれば、いわゆる「ハードテイクオフシナリオ」への対処の一策となる。

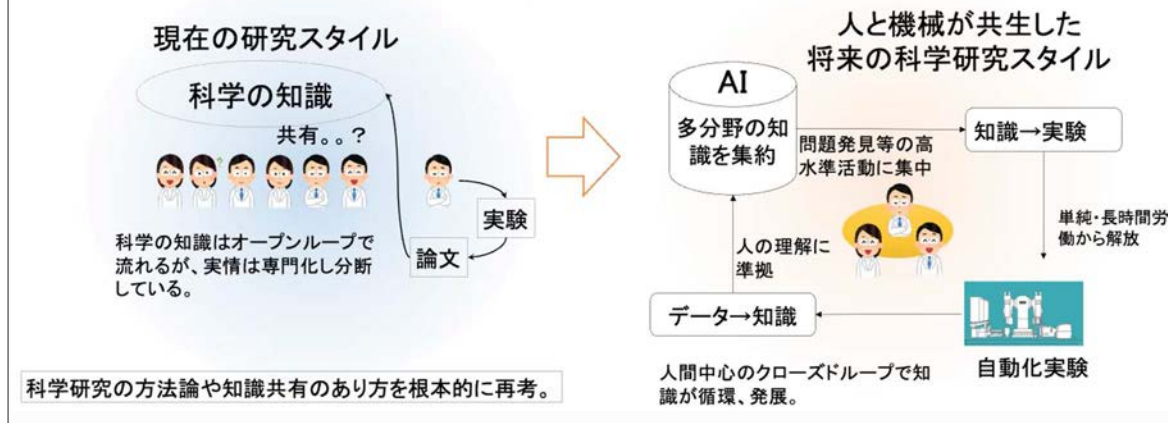


図2-2-7 人間中心のAI駆動型科学

【質疑応答】

Q：「データからモデル」と「モデルからデータ」のループに関して、一旦最適化のループに入った後は、人間は基本的には中には入らなくてよいのか。

A：理想としてはその通り。実際にはまだまだ人間の手を下さなければいけないところがあり、形としてつなげてみるのが大事だと考えている。講演の中の蛍光イメージングの場合だと、蛍光タグを付けたEGFレセプターは、ダイマー化やリン酸化の修飾のパターンが非常に多数あるが、例えばダイマー化は拡散の様態の変化により判別できるため、EGFレセプター（上皮成長因子受容体）のネットワーク近傍に関しては、クローズドループによりネットワークモデルが描けるめどは立っている。一方、そもそもの分子にタグをして、どのネットワークを発見すると価値があるか、例えば細胞の分化状態の予測やがん化の細胞内決定に重要な情報が得られるのか、という判断はループに含まれていない。発見した知識がどのぐらいの価値を持つかということを判定するための評価関数は、現在は外から人間が与えており、ダブルループになっている。評価関数自体を間接的に表現できるようになると人間の不介入が更に進むと考える。

Q：既存の領域知識とモデルの接地について、具体的にどのようにつないでいるのか。

A：SBML (Systems Biology Mark-up Language) によりパスウェイを記述したデータベースを構築し、領域知識としている。例えばある遺伝子をノックアウトした時に、直接影響を及ぼす分子はどこなのかということはパスウェイのデータベースから分かるため、論理的な前方推論を使って摂動をかけつつモデルを改善していくことが可能である。

Q：人間中心のAI駆動型科学について。科学的実験の自動化によって人間が高水準の活動に専念できるという話があった一方で、仮説の自動生成やセレンディピティの定式化により、人間ならではの思われているプロセスもAIが可能となってしまうと人間が疎外されてしまうのではと考える。その場合に人間はどのように科学に参加していくのか。

A：科学の自動化が人間性の疎外をもたらす懸念があることは発表の中で説明した。ただ、人間性の疎外がアノマリーやセレンディピティの自動化による必然の帰結かといえば、必ずしもそうではない。理研・

未来戦略室の長期シナリオ構築の中で、自動運転のようなAI駆動型科学の自動化レベルの設定を行なおうとしている。現在はAIを最適化の道具として使い、様々な問題を最適化課題の形式に落とし込んで解いているというのが分野の現状である。ここで重要な点は、評価関数・目的関数は人間が与えているということである。発見した知識の価値自体を、ある目的関数によって定量的に、形式的に定義できるようになると、「こういった問題に取り組みたいので、こういった価値を最大化する知識を発見してください」という形で実験計画を立てることができるようになる。目的関数がより間接的、抽象的に定義出来るようになるほど、自律性すなわち自動化のレベルが上がる。ただ、目的関数がいかに間接的、抽象的になっても、そもそも何を研究するか、何が面白いのかあるいは重要なのかという価値付けは最後まで人間の仕事として残る。つまり、howよりwhatが重要になる。Whatを考えることは非常に創造的で人間の一番得意なところだと思うし、今後の人材教育ではこういった部分を伸ばしてゆく必要がある。

2.3 マテリアルズ・インフォマティクスの現状・課題・展望

徐一斌（物質・材料研究機構）

マテリアルズ・インフォマティクス（MI）の現状・課題・展望について発表する。材料研究における中心課題は、材料のプロセス・構造・特性の間の相関関係を見出し、特性を最適化することにある（図2-3-1）。周期律、電子論、物性物理の進展により、一部の材料プロセスについてはシミュレーションできるようになったものの、ほとんどのプロセス研究は、試行錯誤により実験的に行われているのが現実である。機械学習（ML）により相関関係を素早く見出して、材料設計（特性の最適化）のステップに入ること、実験の効率を向上させるのが材料研究者の夢であり、それゆえにMLに対する期待が大きい。

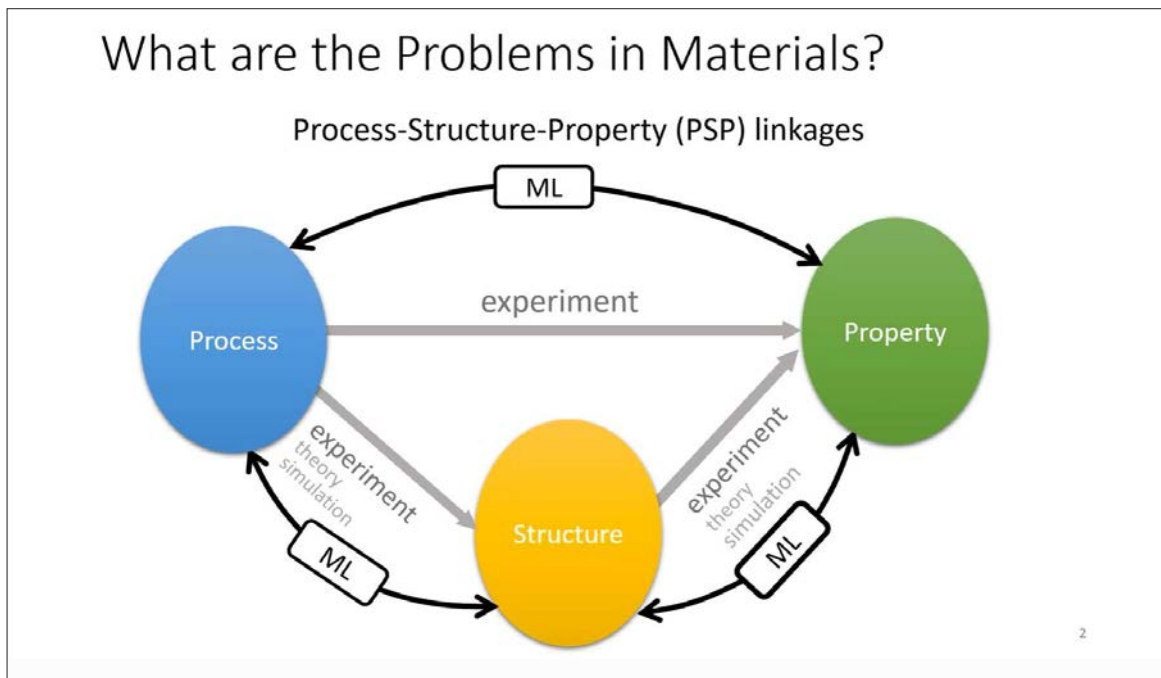


図2-3-1 材料研究における課題（材料のプロセス・構造・特性の間の相関関係）

材料データに関する約140年の歴史を振り返る（図2-3-2）。材料データの重要性は1880年代から認識されており、データ収集は既に始まっていた。その当時は、データハンドブック（Landolt-Börnsteinハンドブック等）やデータシートでデータが保存されていたが、1990年以降、コンピュータ技術の発展により Pauling FileやMatNavi等のデータベースが開発され、現在では（膨大な情報を収集・蓄積した上で分析し、何らかの有意性を見出して提案する）ビッグデータの形に変わってきている。

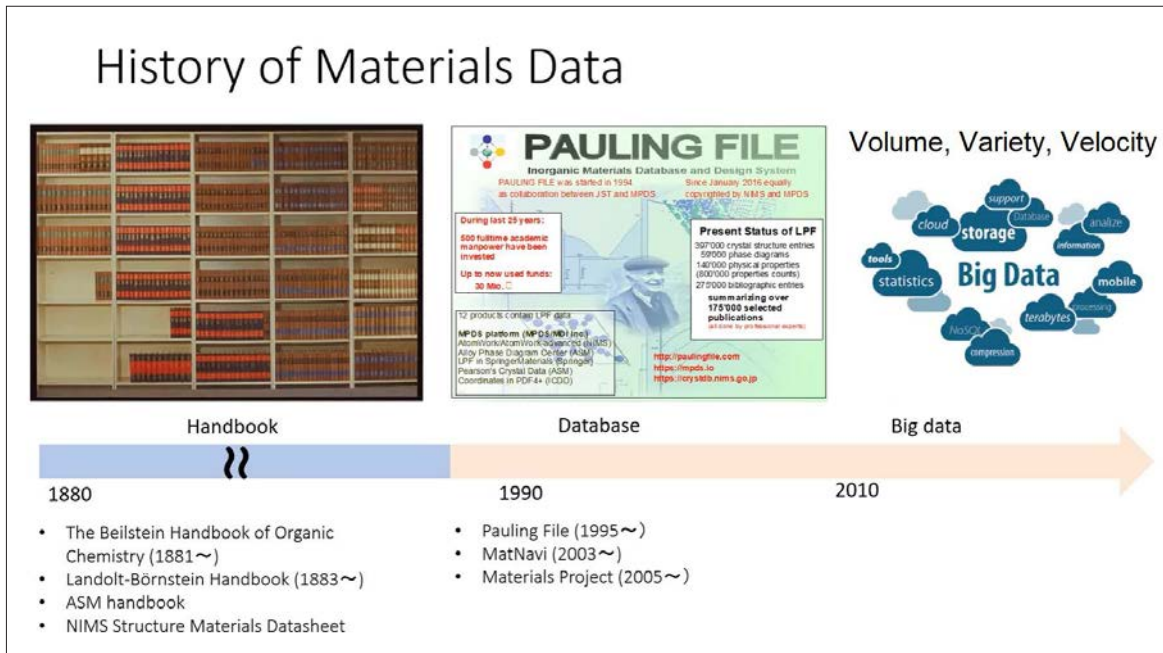


図 2-3-2 材料データに関する約 140 年の歴史

次に、材料データの入手可能性について述べる（図 2-3-3）。図中の水色で示した材料空間内において、現在知識として持っているものを黄色部分で表示とすると、データとして入手できるのは小さい黒点にしか過ぎない。なぜならば、実験で探索された材料空間は局所的であり、その実験結果は、ほとんどデータとして保存されていないからである。例えば、1 元系（1 原子からなる系：約 100 種類）では、その存在が 100% 知られているのに対して、2 元系（約 5000 種類）で 72%、3 元系（約 160000 種類）で 16%、4 元系（約 3920000 種類）で 0.6%、5 元系（約 75290000 種類）で 0.03% が知られているのみである。

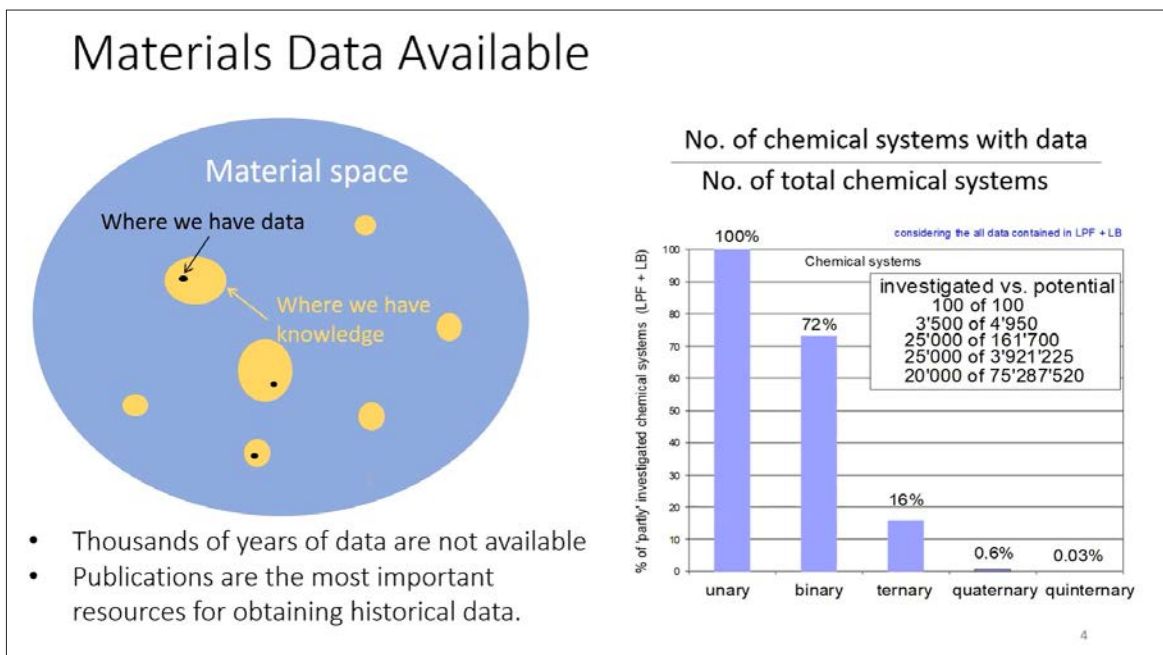


図 2-3-3 材料データの入手可能性

このような状況の下、2010年のオバマ大統領による一般教書演説に端を発した2011年に米国におけるMGI (Materials Genome Initiative) に続き、次々に各国でマテリアルズ・インフォマティクス (MI) 関連のプロジェクトが立ち上がった。新物質の探索を目指すMIプロジェクト (MGI (米国)、NOMAD (ドイツ)、MARVEL (スイス)、MI²I (日本)) および、材料のプロセスと特性の最適化して実用材料の創製を目指すMIプロジェクト (SIP (日本)、MGE (中国)) が代表的である (図2-3-4)。エルゼビア社が提供する学術文献検索ツールScopusを使って、“material + machine learning”のキーワードで調べたMI関連の論文数の年次推移が示すように、2017年以降、MI研究の成果としての論文が急激に増えてきている (図2-3-5左)。

次に、機械学習 (ML) による界面の特性の予測に関する我々の研究成果を報告する。界面は材料の中に数多く存在している。界面の特性の支配要素 (つまり影響因子) がたくさんあり、現在の物理モデルで解析することは難しいので、データ科学のアプローチとして、界面の熱伝導、および界面のイオン電導度の観点から、新しい探求を試みたのである (図2-3-5右)。

2つの材料の界面でフォノン (格子振動の量子) が散乱され、界面熱抵抗 (ITR) が生じる。図2-3-6に示すように、我々が87本の論文からWeb Plot Digitizerを用いて収集した実験データと、(フォノンの平均自由行程の寄与を考慮した) 界面熱抵抗に関する物理モデル (K. T. Regner et al., 2013) による予測結果を比較すると、物理モデルの予測精度は高いとはいえない。その原因は、界面熱抵抗は界面の物理的な要因だけではなく、化学的な要因や材料的な要因にも起因しているからである。そこで、我々は、3種類の記述子セット (特性の記述子、化合物の記述子、プロセスの記述子) を選び出して、MLモデルを訓練したところ、先の物理モデルより遥かに高い予測精度を持った3種類のMLモデル (LSBoost, GPR, SVM) が得ることに成功したのである (図2-3-6)。

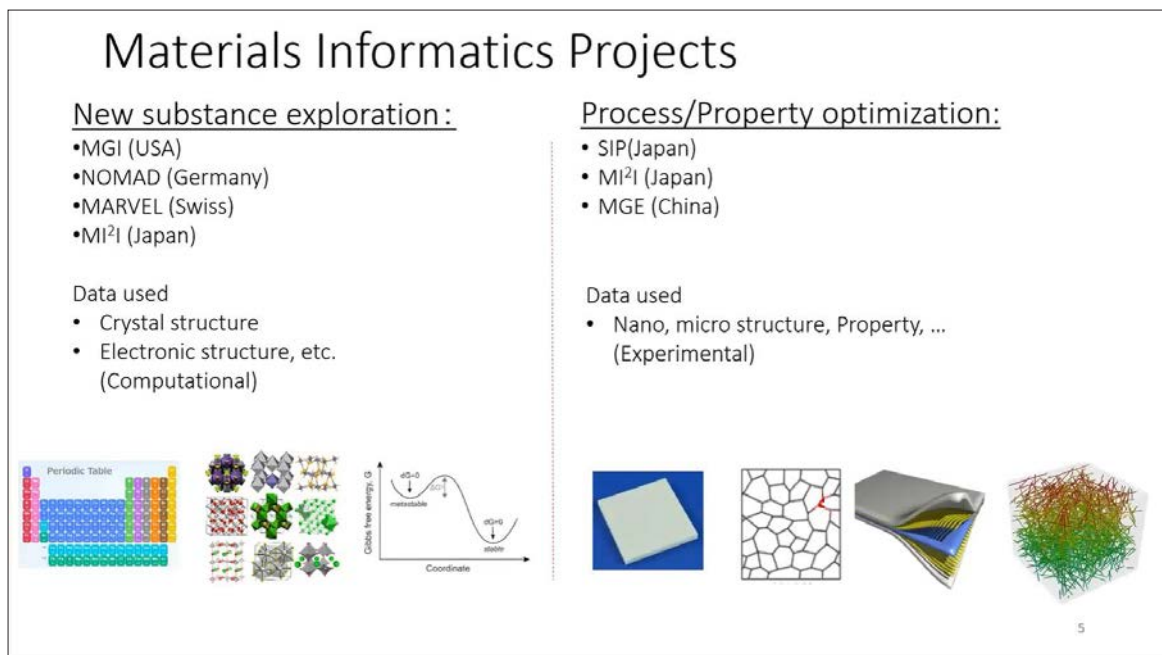


図2-3-4 マテリアルズ・インフォマティクス (MI) 関連のプロジェクト

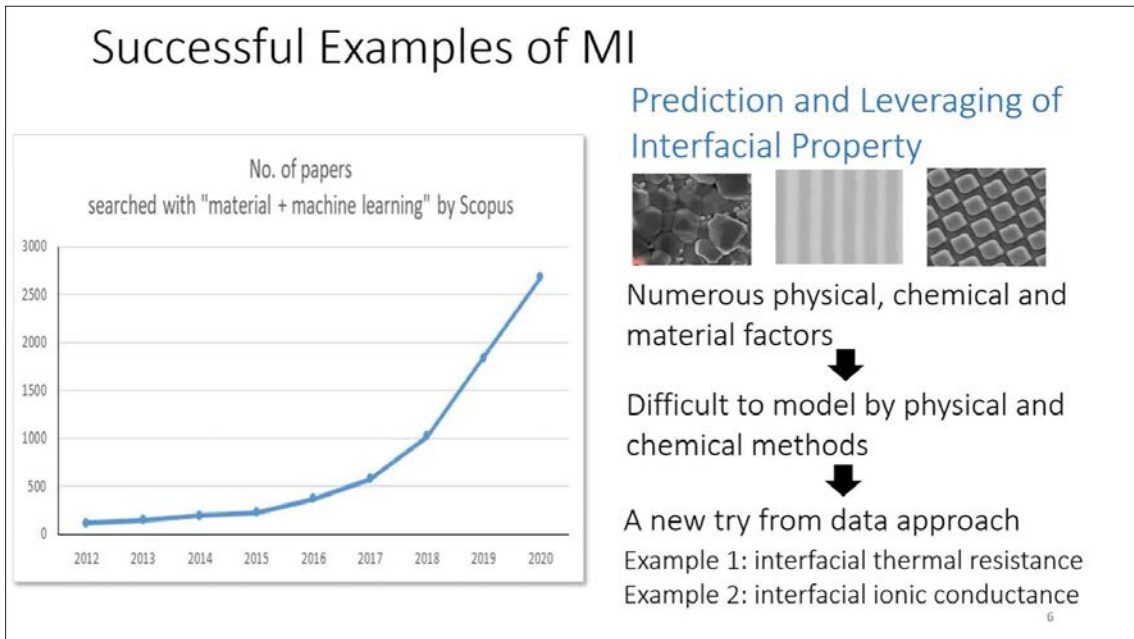


図2-3-5 MI研究の成果

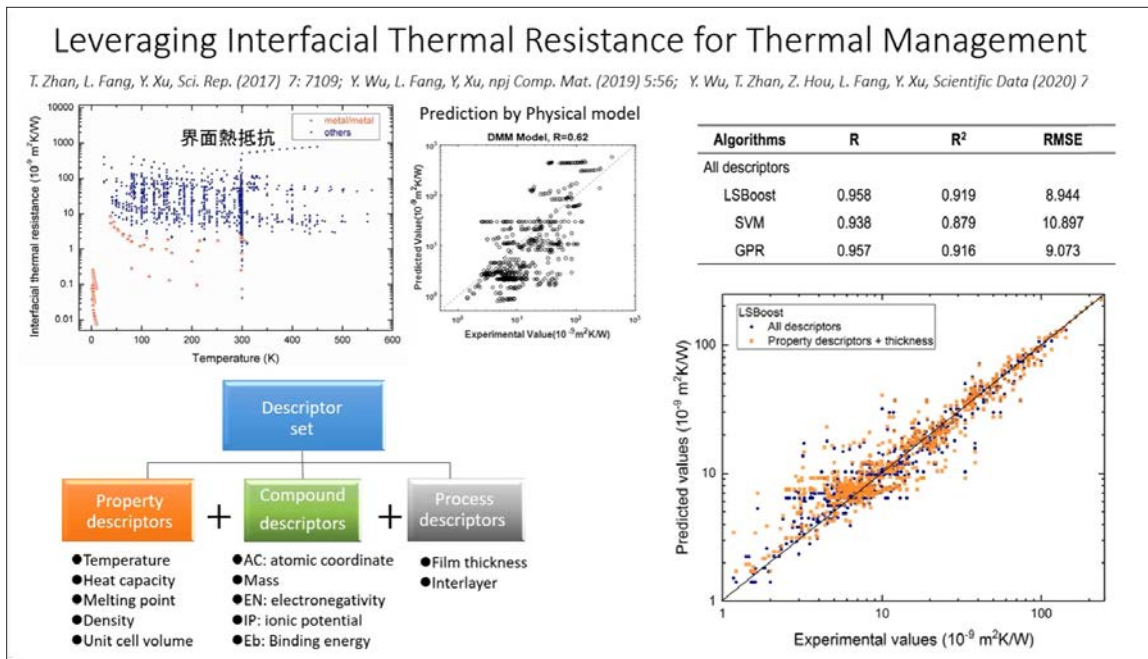


図2-3-6 熱マネージメントのための界面熱抵抗 (ITR) の活用

続いて、得られたMLモデルを使って、断熱材料の開発を試みた。まず界面熱抵抗 (ITR) の高い界面を選択しなければならないので、80000種類の材料の中から先の3種類のMLモデルを用いて、それぞれのMLモデルの上位100の界面材料候補を選び出した。その中でも25種類の界面材料については、予測が重複しているので、多次元尺度法 (MDS: Multi-Dimensional Scaling) を用いて、2次元MDSプロット (界面材料間の親近性データについて、類似したものを近くに配置) することで、相関性を多変量解析した。最終的には、専門家が界面の作製のしやすさ、界面の安定性、作製コスト等も考慮して、Bi/Si界面を選択した (図2-3-7)。そして、実際にコンビナトリアル・スパッタ装置を用いて、Siのマトリックス中にBiSiナノ複合体をハイスループット作製し、高分子の性能に匹敵する新しい断熱材料の開発に成功した (図2-3-8)。

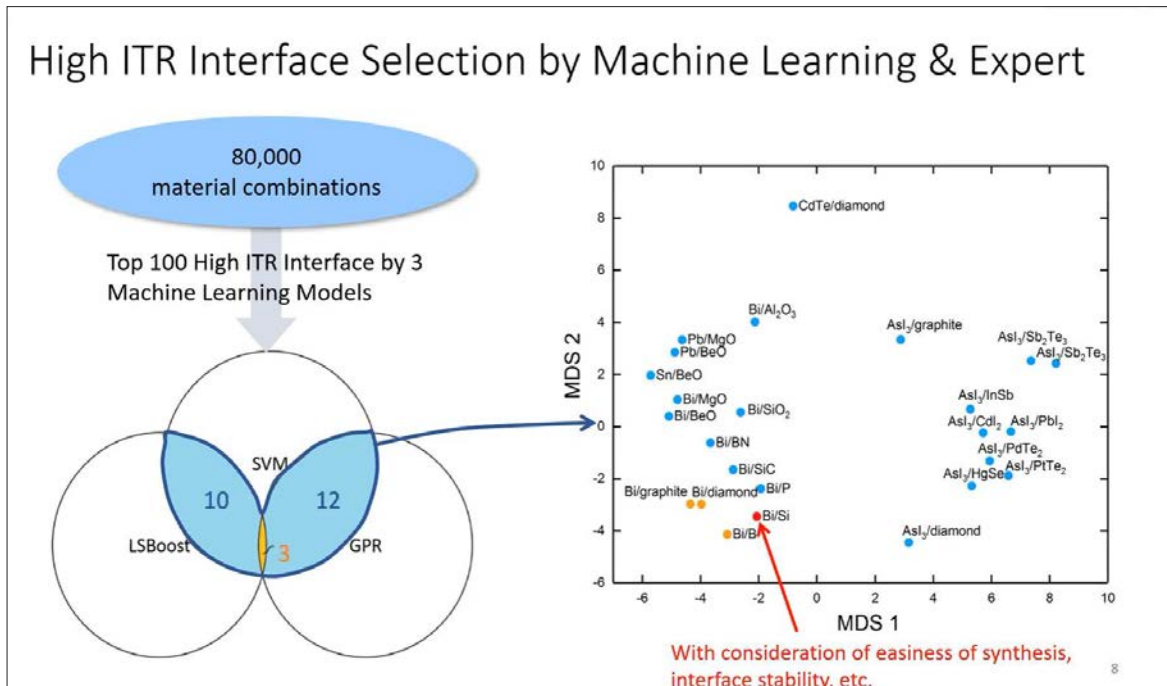


図 2-3-7 MLおよび専門家による高い界面熱抵抗 (ITR) を有する界面の選択

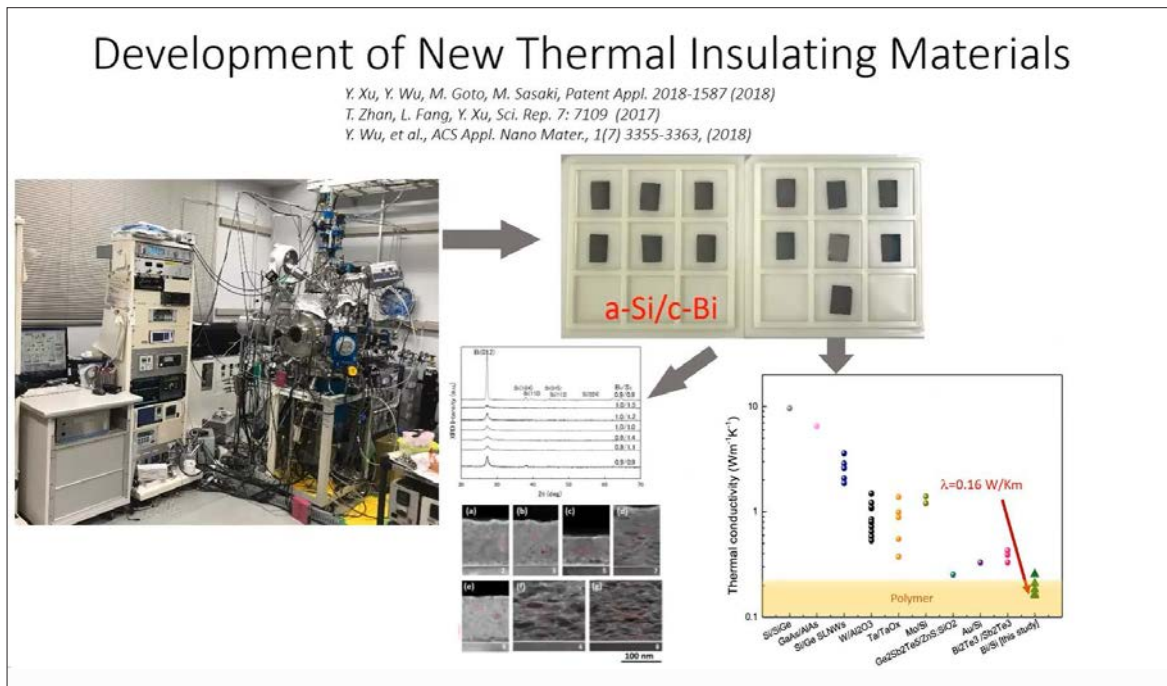


図 2-3-8 高分子の断熱性能に匹敵する新しい熱絶縁材料の開発

次に、固体電池に使われているLi固体電解質のイオン電導度に関する研究を紹介する。固体電解質はセラミック材料であり、そのイオン電導度には、結晶のイオン電導度と粒界のイオン電導度がある。後者は前者に比べて1~2桁程度低いので、開発のボトルネックになっている。もちろん、イオン電導度は実験条件に依存するが、定量的モデルがないので、実験の指針がない。そこで、我々は、論文からなるべく数多くの実験データ（化学組成、焼結温度、焼結時間、粒界サイズ、実験方法、等）を収集するとともに、結晶に関する情報（Liの原子位置、占有率、等）をNIMS無機材料データベース（AtomWork-Adv）から収集し、さらに電気陰性度や分極率の値も計算することで、そのようなデータを用いた機械学習（ML）モデルを作り、結晶のイオン電導度と粒界のイオン電導度を予測できることを示した（図2-3-9）。

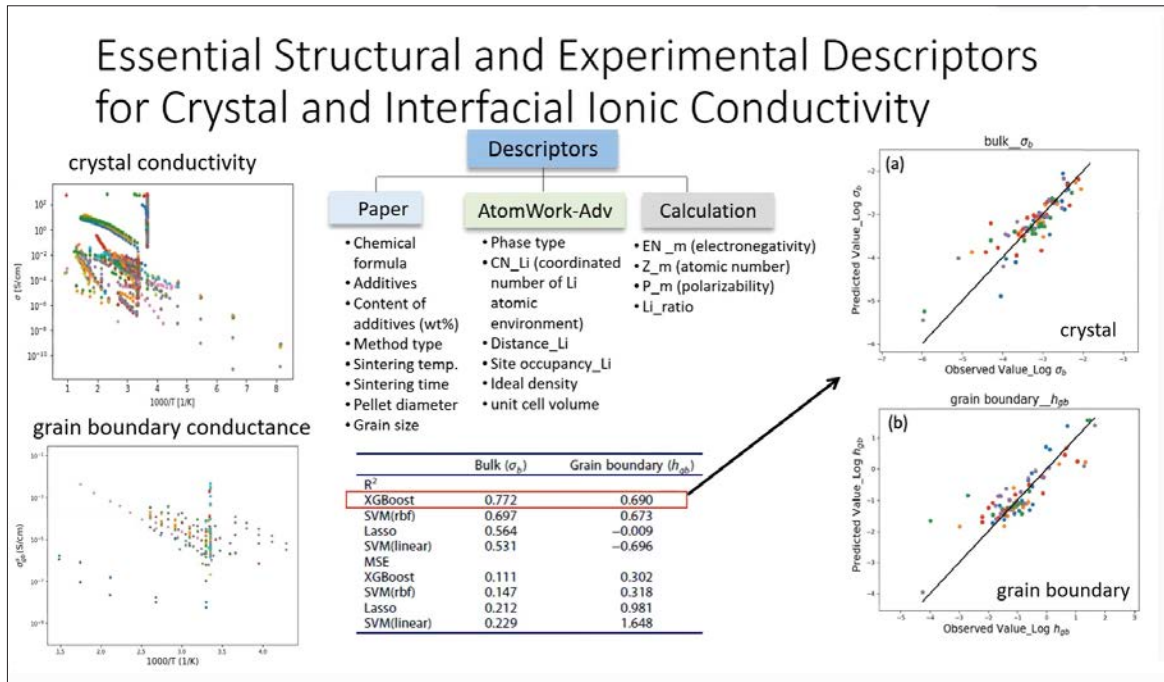


図2-3-9 結晶および界面のイオン熱電導度に対する主要な構造的・実験的記述子

このモデルを作った目的は、結晶および粒界のイオン電導度に与える重要な影響因子を抽出することにある。イオン電導度に影響を及ぼす重要因子（オレンジ色）と重要でない因子（青色）を結晶と粒界に分けて図2-3-10に示すと、結晶と粒界で重要因子に相違が見られるのが分かる。例えば、焼結温度は、結晶および粒界の両方において、イオン電導度に重要な影響を及ぼす。また、Liの占有率に関しては、結晶のイオン電導度に重要な影響を及ぼすが、粒界に対しては大きな影響を及ぼさない。一方、添加物は、結晶ではなく粒界のイオン電導度に重要な影響を及ぼす。さらに、粒径サイズは、あまりイオン電導度に影響はないという認識があり、MLモデルの記述子として選ばれていなかったが、イオン電導度を粒径サイズで正規化してみると、図2-3-10の挿図に示すように予測精度が向上することから、結晶および粒界の両方において、比較的重要な役割を果たしていることが分かる。以上の研究成果は、新しい固体電解質探索する上で、一つの指針になると考えている。

2 科学を俯瞰する

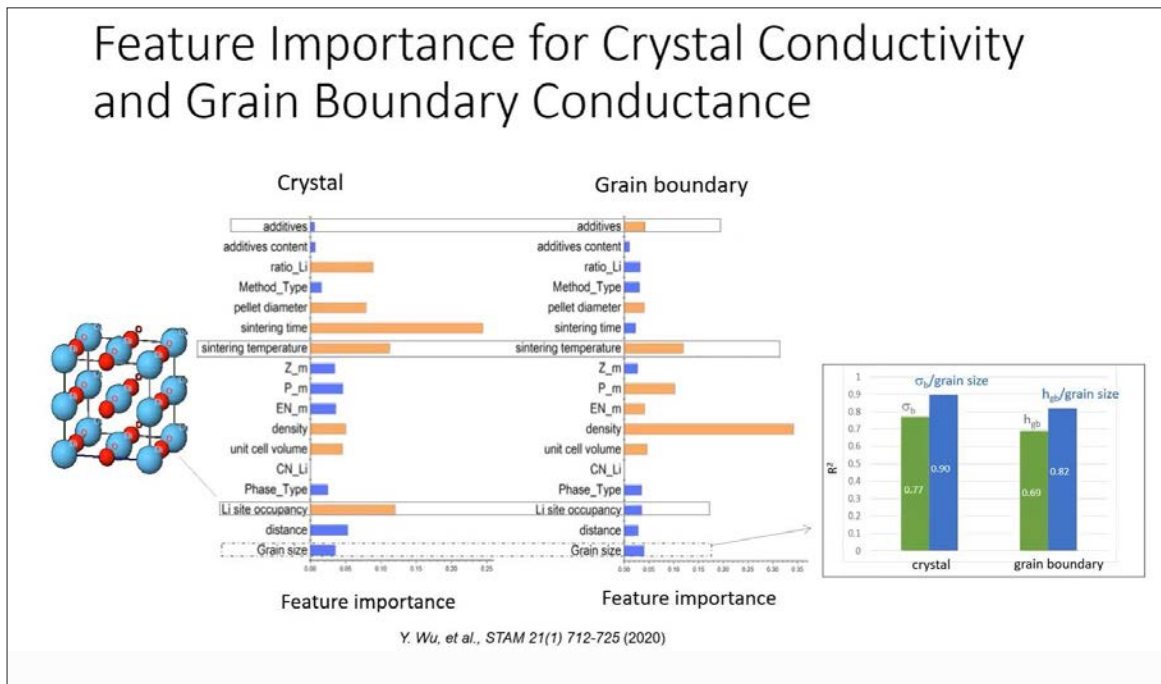


図2-3-10 結晶の熱伝導度と粒界熱伝導度の特徴的な重要性

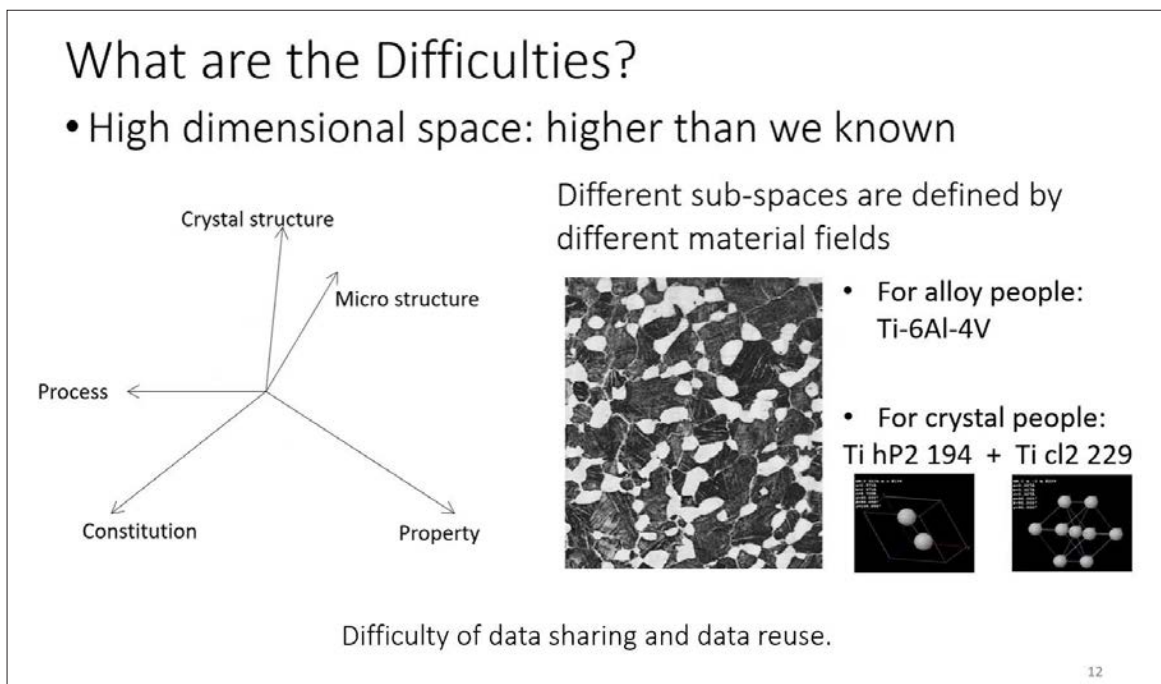


図2-3-11 MI研究における機械学習（ML）の難しさ（その1）

MI研究における難しさを、図2-3-11および図2-3-12を使って説明する。材料空間は我々が知る以上に高次元であるので、材料空間を表現する十分な座標軸（結晶構造、化学組成、特性、プロセス、ミクロ構造等）を全て定義することは難しい。材料を一つとっても、研究分野ごとに材料を定義する座標軸は異なり、それぞれ独自の材料サブ空間を定義している。例えば、機体構造部品に用いられる一般的なチタン合金は、金属の研究者はTi-6Al-4V（通称64チタン）と材料を定義するのに対して、結晶の研究者は、結晶構造の異なる2つの相（六方晶と立方晶）が共存しているTi合金という意味で、Ti hP2 194 + Ti cI2 229と表現している。

ここで、hP2とcI2は、結晶学において結晶構造を示す記号であり、194や229は空間群を表す番号である。したがって、研究者は分野ごとに違う座標軸を定義して材料を表現するので、分野を超えた材料データの共有は非常に難しい。また、材料空間には、物質境界（material boundary）により部分的に分けられた材料空間が数多くあり、電気的特性も金属、半導体、絶縁体と性質が異なってくる。したがって、材料の領域が変われば、特性の支配因子も変わり規則も変わるので、機械学習（ML）をすることは難しくなる。

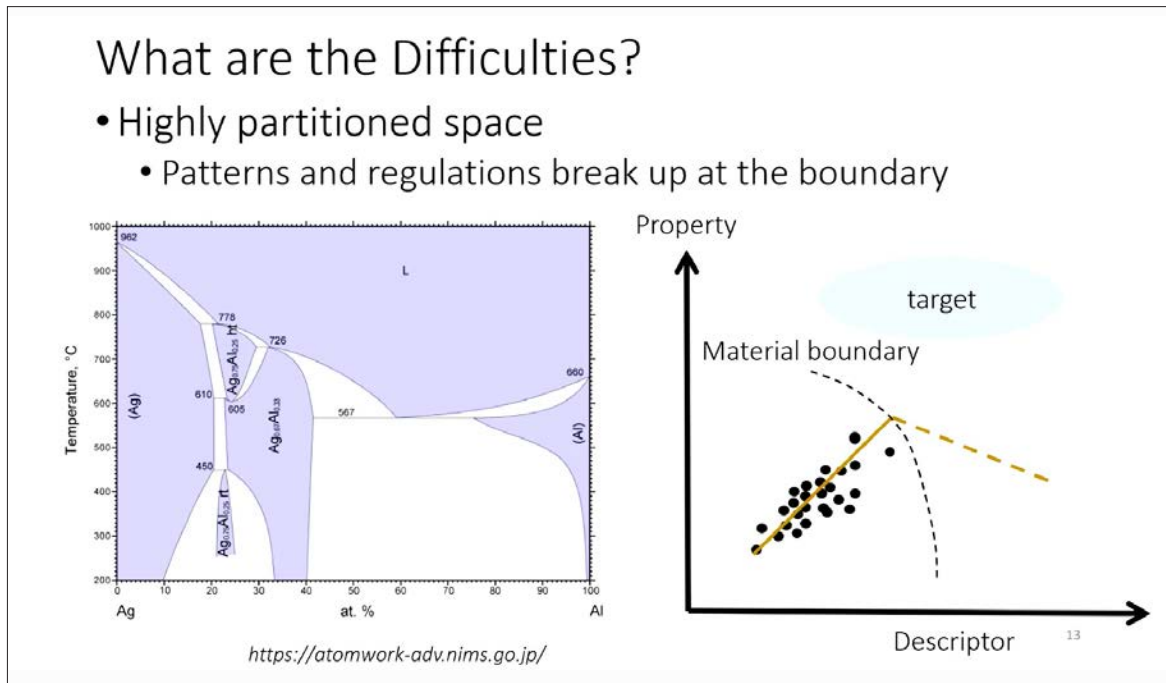


図2-3-12 MI研究における機械学習（ML）の難しさ（その2）

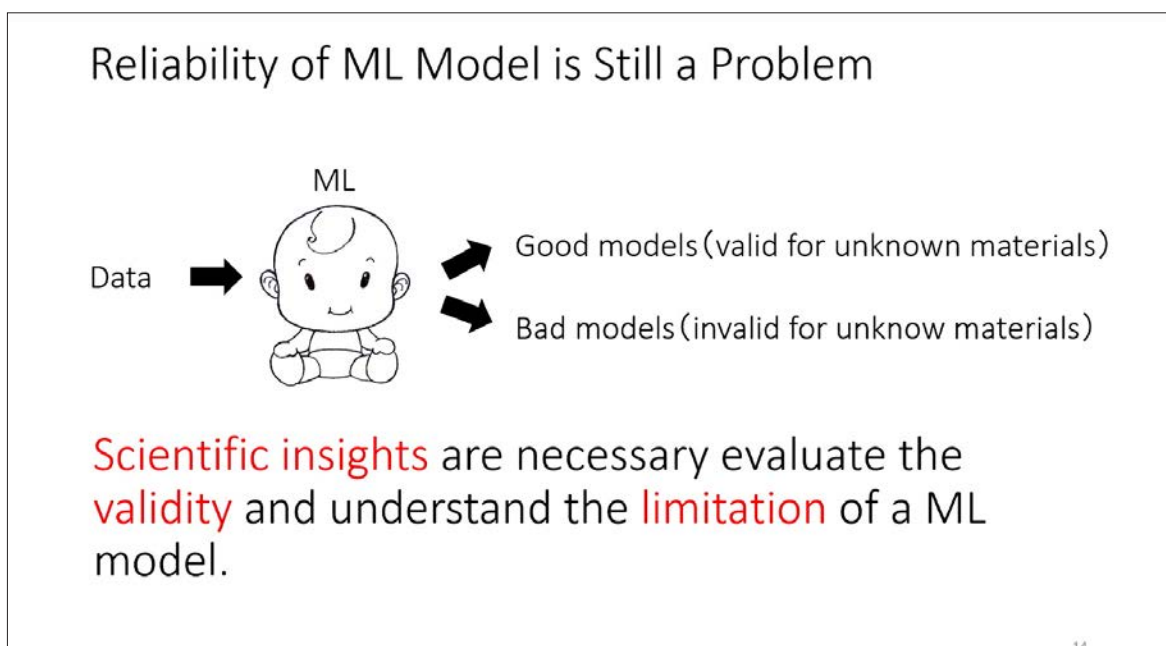


図2-3-13 機械学習（ML）モデルの信頼性の問題

2 科学を俯瞰する

MI分野が、将来どのように発展していくかを述べる。MIの有効性は実際に検証されている。特に、物理と化学の分野では、モデリングできない複雑な（界面等）材料現象に対する機械学習（ML）モデルの信頼性は、大きな課題である（図2-3-13）。現在のMLは、専門知識がないのでデータから全て学習してモデルを作り出す。このMLモデルの妥当性を判断するには科学的洞察力（専門知識）が必要であり、MLモデルの意味や限界を（ブラックボックス的ではなく）理解しなければならない。そのため、専門知識の全くない未知分野に対して、MLモデルが正しいかどうかの判断も難しくなる。

MIは有効であるので、これからも材料研究にMLは広がっていくだろう。しかしながら、データは少なく網羅性はないので、まずはスモールデータベースのMIが必要となり、中心的となると思う。今までは、MIはコンピュータ上の研究が主であったが、ロボットを使ったバイオ実験の最適化研究のように、実験室においてロボットを使った材料の最適化研究の流れが起り始めている。MLは、材料研究者にとって今では特殊技術であるが、将来的には材料研究者にも使いやすいアプリが開発されて、エクセルを使うような感覚でMLを日常的に使うような時代が来ると予想する。以上の3点（図2-3-14上枠内に記載）が、現在のMIの延長線上から予想される事柄である。

また、将来的には、MIのブレイクスルーにも期待している（図2-3-14）。そのためには、まずはデータにおけるブレイクスルーがなければならないと考える。MIの目的は実験の効率を上げることであるが、データの収集のために不必要な実験を行うことは現実的ではない。実験データでサイバー材料空間を埋めることは不可能であるが、計算データを活用すれば可能であると考え。現在、計算性能は飛躍的に向上して現実的なシミュレーションも可能となっていることから、将来的には（特に、量子コンピュータのような超高性能コンピュータが開発されれば）サイバー材料空間上でシミュレーションとMLを用いて材料設計を行い、実際に実空間でロボットによる最適化材料合成ができるようになることを期待している。さらに、AI技術自体のブレイクスルーも必要である。新しいものを作るには、これまでの知識を学習しなければならない。しかしながら、材料データの知識はデータとして保存されることは少ないので、人間のように自ら学習しなければならない。そのために、AIは本を読み、式を解けるようになることで、人類が蓄積した知識をAIが自ら学習して材料設計に活かせる時代が来ると、私は考える。

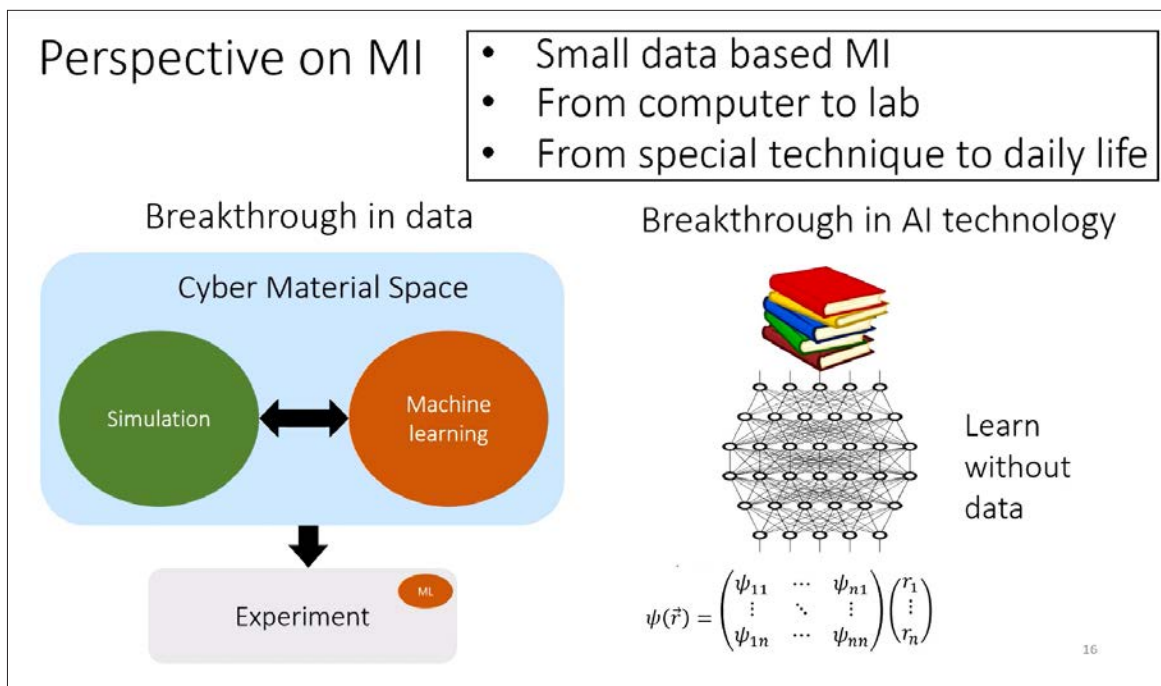


図2-3-14 MI研究の遥かなる飛翔に必要なブレイクスルー

【質疑応答】

Q：最近、化学会社でもMI研究を積極的に取り入れて開発研究を行っているが、まだまだ新材料発見のような大発見には至っていないのが実情である。そのような状況で、顧客が待つ市場までの時間を短くしていくかを鑑みれば、MIを実験室だけに押し込めておくにはもったいない。実験のところが速くならないと実用化にはつながらない。そのために、量産に向かうところをどう乗り越えるか、さらには顧客が期待するMIツールをどのように拡大していくかが化学のビジネスとして考えられる。実際に、化学者がMLをツールとして使い始めているのは事実だが、もっと人とAIが向き合って協調し合うような関係にならなければ大発見はできないと思う。化学者はAIひいては情報科学とどのように向き合うべきかという点に関する示唆はあるか？

A：AIをツールとして利用する材料研究者が新しいAI技術を開発することは期待できない。基本的には、AIの研究者の研究成果を利用する立場にあり、AIをツールとして利用することになる。ただし、AIを利用するときに、MIに向いている問題と向いていない問題があることを忘れてはいけない。全ての問題をMIで解くことは不可能であると思う。全く知識のないところで、間違った方向をMLモデルに示されたら困るので、少なくとも現段階では、必ずMLモデルの妥当性を判断するには専門知識が必要になる。また、データのないところではMIを遂行することはもちろんできない。ただ、定性的には分かるが定量的に説明できない（モデリングできない）問題には、MIは役に立つ。しかしながら、既知のデータから得られる規則を使って新しいものを予測する際には、同じ規則に従うのが大前提となるので、結局は現在の延長線上で（内挿的に）しか予測できない。つまり、古いデータから、全く別のものを発見するようなブレイクスルーを起こすことは難しい。そのような意味で、材料イノベーションの可能性には、やや疑問を持っているのが実情である。確かに、プロセスの最適化を行うのは向いている。全く知見のない、データもないところで（外挿的に）新しい材料を発見できる可能性は理論的に難しいのではないかと考える。

2.4 統計的因果推論と機械学習: 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)

最近、機械学習が非常に発展し、データサイエンスが非常に重要なものになってきているなか、統計的因果推論が再度注目されている。

統計的因果推論の例を挙げる。図2-4-1はチョコレート消費量とノーベル賞受賞者の数を国ごとに測ってサンプルを取ったものである。

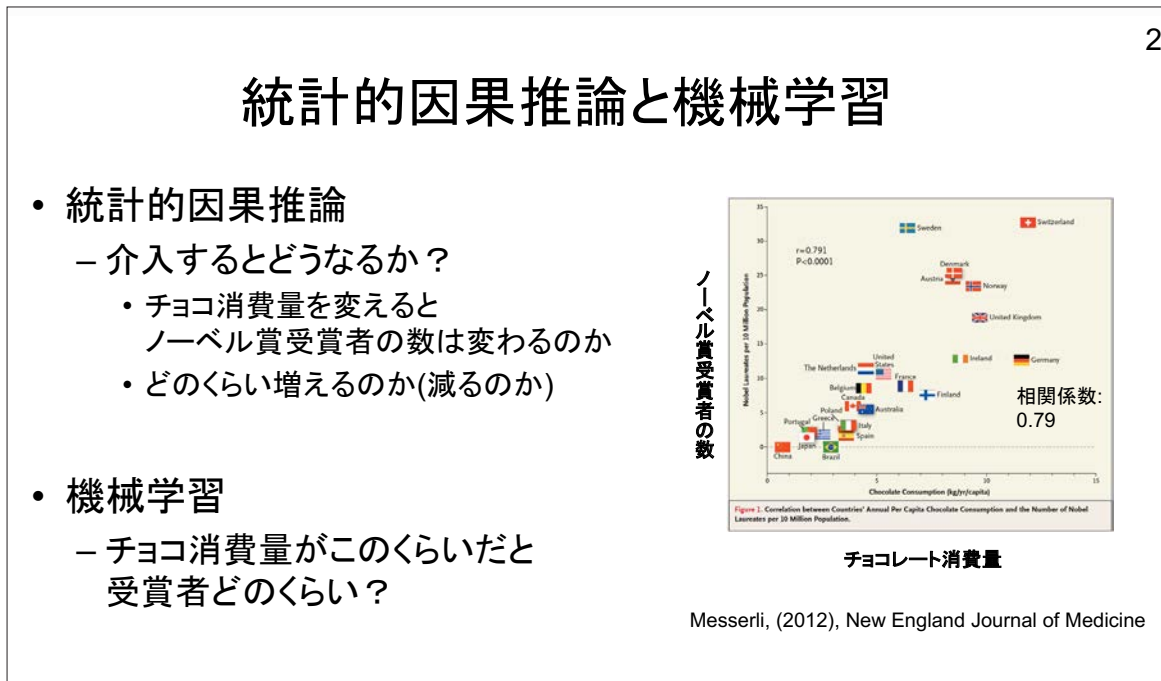


図2-4-1 チョコレート消費量とノーベル賞受賞者の数

この例においてチョコレートの消費量を増やしたらノーベル賞は増えるのかといった、介入するとどうなるかについて知りたいときに因果推論の出番となる。一方、機械学習は、チョコレートの消費量がこのくらいだったら受賞者はどの位いるのかといった相関関係を分析しているということになる。因果関係と相関関係の間にはギャップがある。ある相関が生まれる理由には、いろいろな可能性がある。チョコレートのせいでノーベル賞の数が増える場合、その逆にノーベル賞の数が増えたせいでチョコレートの消費が増える場合、これらのいずれでも同様な相関関係になり得る。また、仮に双方には直接的な因果関係がなかったとしても、背後にGDPといったサンプルには現れていない要素がチョコレートとノーベル賞の共通の原因になっていて、このような相関が生まれるという場合もある(図2-4-2)。

相関関係と因果関係のギャップ

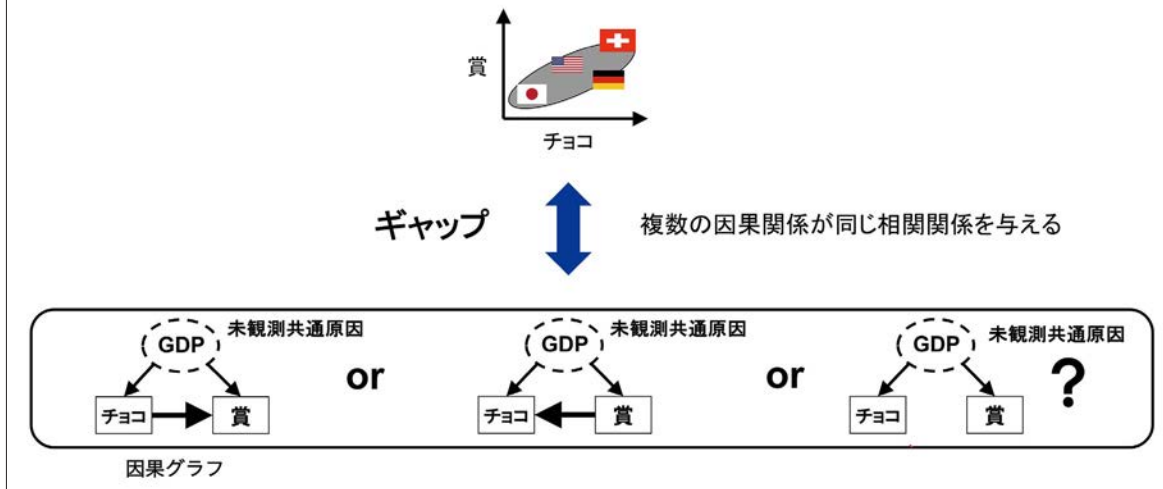


図 2-4-2 相関関係と因果関係のギャップ

実際に因果関係の推論はどのような手順で行うのか述べる(図 2-4-3)。まず推定したいものを決める。典型的なのは介入効果と呼ばれるものである。例えば、チョコレートの消費量を外から介入して強制的に増やすと、平均的に賞の数がどのぐらい増えるのかということを知りたいということである。

次に、基本的には領域知識を使うことで因果構造を描く。例えば、チョコレートと賞に関する変数を挙げて、どういう因果の向きになっているのかを表す因果グラフというものを描く。

ここまでできると、統計的因果推論の理論からチョコと賞以外にどんな変数を分析に含めるべきか理論から導くことができる。知りたい変数が、必ずしも手持ちの領域知識とデータから推測できるとは限らないが、推測の可否も含めて判定するような理論が作られている。もしあれば、その変数を観測することで推定できるといことになる。

統計的因果推論の手順の例

1. 推定したいものを決める: 介入効果

$$E(\text{賞} \mid do(\text{チョコ} = \text{多い})) - E(\text{賞} \mid do(\text{チョコ} = \text{少ない}))$$

2. **領域知識を用いて**因果構造を表すグラフを描く (実験か観察か含む)



3. どの変数(共通原因)で調整すべきかを**理論から導く**
4. (もしあれば) その変数を観測し調整に使い推定

$$E(\text{賞} \mid do(\text{チョコ} = \text{多い})) = E_{\text{調整に使う変数}} [E(\text{賞} \mid \text{チョコ} = \text{多い}, \text{調整に使う変数})]$$

図 2-4-3 相統計的因果推論の手順の例

これまで因果とは非常に扱いにくいものだと考えられていたが、この20～30年で因果を式で記述しようとする試みがなされ、ある程度、皆が納得するレベルのものが出来上がってきた。さらに因果関係をグラフで描く場合に、「領域知識」といった仮定を表現する道具が整備されてきた(図2-4-4)。

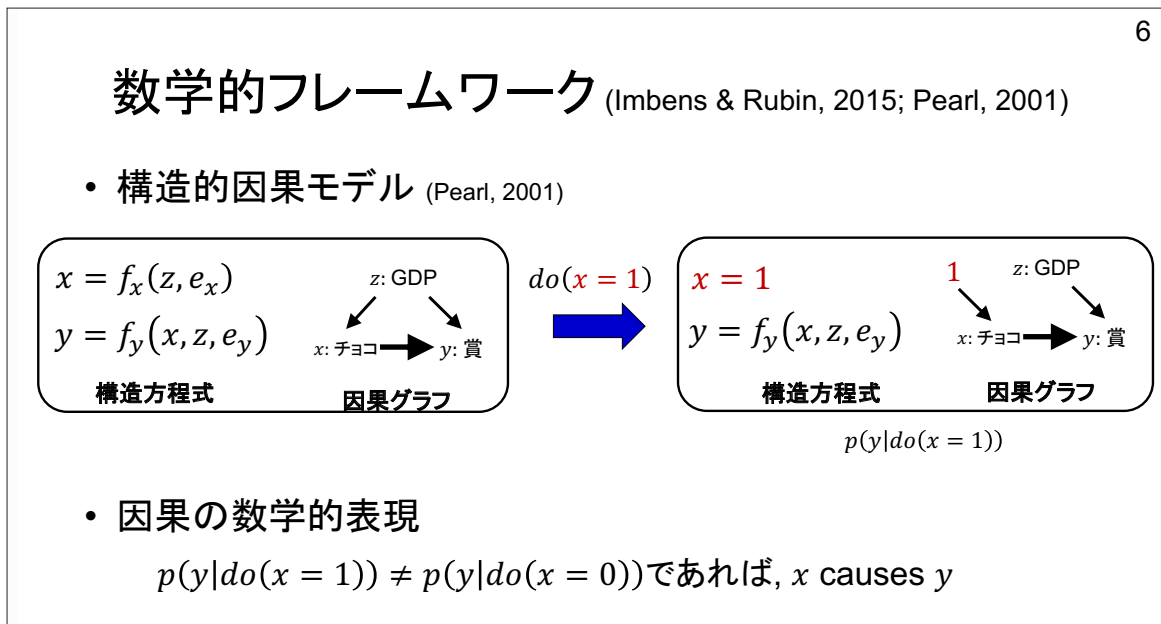


図2-4-4 数学的フレームワーク

因果構造については、因果グラフとして図示して説明することが多いが、その背景にはちゃんと構造方程式というものがあ、それによって記述をしていく必要がある。ここでの大きな問題として、これまでは「介入する」ということを表現する数学的な記号がなかったことが挙げられる。確率論においても「条件付ける」に対応する記号は存在するが、「介入する」に関する記号はない。

データが生成される過程を方程式で表現したとして、その方程式を取り換えて別のものにしてしまうことを「介入する」ということを表現することとした。これが因果を式で書くというときに非常に役立ったとされている。

このようにフレームワークの整備が進み、因果を推定するための手順が大分クリアになってきた。すなわち、因果推論がアルゴリズム化したと言える。

フレームワークが整備されたことにより非常に盛んに行われるようになった研究として、自分が推定したいと指定した介入効果は、自分が持っているデータと領域知識から推定可能なのかということを調べる理論に関するものが挙げられる。この辺は、機械学習では必ずしも取り上げていない面だと思う。

また、因果グラフを自分で描けたとして、そのときにどの変数を追加で分析に含めるべきかという議論や、そもそも領域知識を用いて自分で因果グラフを描くというのは大変なので、領域知識が足りないときにデータを使って描くということが挙げられる。いくつかの因果関係の候補があり得るときに、実際に介入実験を試みるのではなく、観察で得られたデータからどれがよさそうかというのを探るといったようなことが研究されている。これは因果仮説探索と呼んでいる。

因果仮説探索はいろいろな領域で応用されており、疫学や、経済学などの社会科学系、生命科学関係、それから工学関係でも応用されてきている(図2-4-5)。

データによる因果グラフ探索の適用例

<https://sites.google.com/view/sshimizu06/lingam/lingampapers/applications-and-tailor-made-methods>

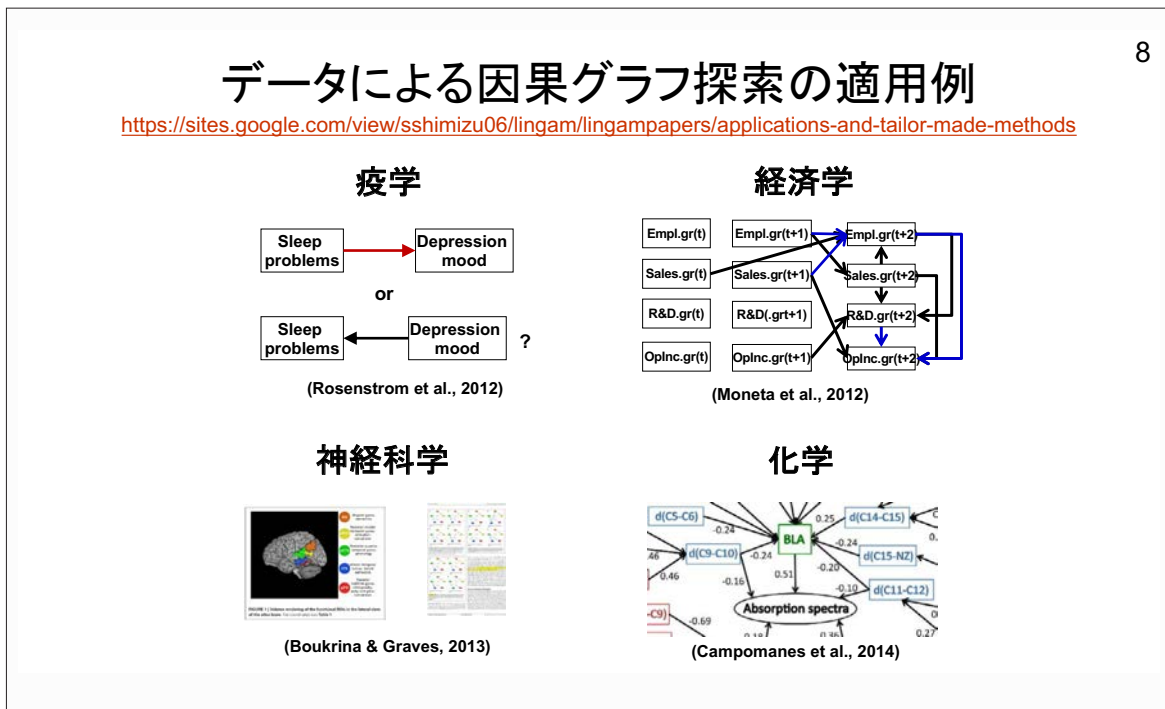


図 2-4-5 データによる因果グラフ探索の適用例

このように方法を作る側における変化があった一方で、使う側にとっても大きな変化があった。機械学習が実用化し産業への応用など至るところで使われるようになり、機械学習が得意なこと、できること、できないことについて、使う側がよく理解するようになってきた。機械学習で扱えないリサーチクエストionsが何か、自分で分かるので「これは機械学習では解けないから別の方法を使わないといけない」、さらには「これは因果推論を使わないといけない」といった知見が大分共有されてきていると思う。

因果推論は、薬の治験などに用いられてきたが、ウェブサービスや、行動経済学といった人文社会科学系など、活用される範囲が非常に広がり、使う人も増え、理論も整備されてきた。チューリング賞の受賞者である Judea Pearl は、因果推論を用いた研究を総称して Causal Science と名付け、このような研究を続けるべきであり、教育にも取り入れていくべきだと論じている。恐らくこの分野の研究者はそういったことには賛成すると思われる。

現在の課題として、第1にチョコとノーベル賞の例における GDP のように、分析に含まれていないような未観測の共通原因にいかに対処するのかということが挙げられる(図 2-4-6)。実際には、分析者が領域知識を使って共通原因を特定し、それをもとにデータを取るという対応が基本になっているが、このようなやり方を効率化するために、データでいかに支援するか、自動化するかといったことが重要になる。例えば、線形性が成り立っていて連続変数で分布が正規分布じゃないといった特定の場合については手順が分かっているが、それをどこまで拡張できるのか、非線形性だったらどうなのか、どのようなクラス非線形性だったらいけるのか、その非線形性というのはそれぞれの科学の応用分野で仮定してもいいような関数のクラスなのかといったあたりについては領域知識が使えるところだと思うが、議論がある。

2 科学を俯瞰する

課題1: 未観測共通原因をどう懐柔するか

- 現状: 領域知識により特定し観測する
- どこまでデータにより支援できるか?
 - 例: 線形性と非ガウス連続分布 (Hoyer et al., 2008; Salehkaleybar et al., 2020)
 - 信号処理の理論: 独立成分分析
 - 機械学習の理論: カーネル法

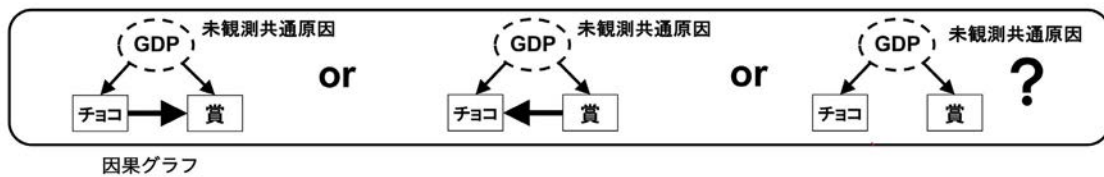
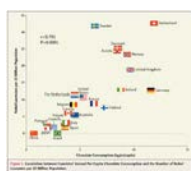


図2-4-6 課題1: 未観測共通原因をどう懐柔するか

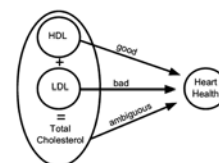
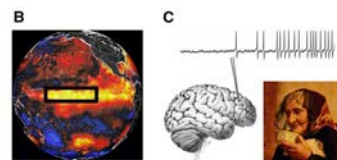
第2の課題として、変数をどうとるかという問題がある(図2-4-7)。マクロ変数とミクロ変数について、例えば、個人がチョコを食べると能力が上がるのかといったことを考える場合、国レベルでデータ解析した結果と個人レベルでデータ解析した結果が一致する保証はあるのかということについては議論があり、幾つかの具体的なモデルについて検証をする試みはあるものの、一般的にどうなのかまだ分かっていない。また、変数の取りかたをデータから支援できないかという問題もある。例えば、エルニーニョの発生を地球の海面温度のヒートマップから判定する場合、特定の領域での海面温度が一定以上になったかということを変数にしているが、どの範囲で判定するかによって結論は変わってくる。現状は領域知識を利用して対応しているが、判定基準とする範囲をどうとるかについて、データから支援できないかと考えられている。

課題2: 変数をどうとるか

- マクロ変数とミクロ変数
 - 国レベルと個人レベル
 - 結果は一致するのか
- 領域知識の利用
 - (論文)テキストデータ等から抽出
- より一般に、データによる支援は可能?
 - 介入によるアルゴリズム (Chalupka et al. 2017)



Messerli, (2012)



Chalupka et al. (2017)

図2-4-7 課題2: 変数をどうとるか

論文のテキストデータなどを解析して変数を考えるという領域知識の利用の仕方があるとは思いますが、その辺をいかに支援するかということが因果分析をする上で大事だと思っている。未観測共通原因の懐柔が実際にできると、そういうパーティションというか、分割を見つけられるんだというような研究はあるが、まだ一般的な理論構築には到達していない。

これまでの内容をまとめる。機械学習に加えて統計的因果推論が非常に注目を集めており、領域知識を用いて因果グラフが描けるという場合については、かなりのレベルにきていて、機械学習のように実際にビジネス応用もされている。一方、因果グラフが描けない場合が頻繁にあるが、そのような場合にデータで支援するということが、因果推論分野における今後の鍵だと思っている。また、未観測共通原因をどう懐柔するか、変数をどう取ってエルニーニョのような現象を解析するかといったことが、課題として挙げられる。このような取り組みを通じて、良い因果仮説ができると実験や調査が効率化でき、科学や工学の発展を加速することができるのではないかと考えている。

【質疑応答】

Q：科学研究において、因果と相関といった話は常に出てくると思うが、どの分野ではあまり浸透していないといった、分野の差のようなものはあるか。例えば物理学では、そのようなトレーニングはされていなかった。

A：全ての分野でトレーニングはされていないと思う。これから導入していきましょうということではないか。それは日本だけではなく米国においても同様であり、Causal Scienceを提唱したJudea Pearlは、やるべきだと論じている。

Q：自然科学の実験のセッティングをうまく見つけてくるための方策とかツールといったものはあるか。

A：実験上の条件を探すような研究はあまり見たことがないが、そのようなことができると役に立つと思う。今までの何もかも領域知識に依存するということから一歩進んで、データから言えることは言えるようにしていかなければならない。実験上の条件を探すといったテーマも含め、今後やっていくべきものだと思う。

Q：傾向スコアを用いたマッチングのように、データから対照実験になりそうなものをピックアップして、それを使って差を取るといった解析手法が、政策評価等で用いられているが、そのような手法は因果推論においても有効だろうか。

A：傾向スコアは、因果に関する強い仮説がある場合に有効だと証明されているものである。単に傾向スコアでマッチングすれば良いというふうな使い方もなくされており、機械学習を用いればデータで全部できると考えてしまう場合と同様に、仮定をはっきりさせずに因果推論を用いることは危険である。何を自分が仮定しているのか明確にし、こういうことを正しいと仮定したから、この傾向スコアでマッチングすることに意味がある、という流れをはっきり認識すべきである。

3 | 戦略についての提言・総合討論

3.1 科学と道具

丸山 宏 (Preferred Networks)

機械学習というのは道具だと思う。そして、科学は人の営みであり、当然、人の認知能力に束縛される面がある。その認知能力の足りない部分を道具で拡張することによって科学というのは進歩してきた。例えば紙もそうであるし、あるいは合理的推論をするための論理学、数学、統計など、人間の感覚を補うためのいろいろな機械がある。それから、道具というか、一つのプロトコルとして認知バイアスに捉われないような合意形成の仕組みとしてピアレビューというものが出てきている。

このような科学に大きな影響を与えた道具が過去に多数あり、その一つとして非常に高次元のパターン認識をやってくれる道具に機械学習というものが出てきたというふうに私は見ている。科学においては、できるだけ自分たちの主観やバイアスが入らないように、こういう道具を使いこなしてきたわけである。

ところが、より高度で複雑な、あるいは自由度の高い道具を導入すると、どうしても科学者というのは自分の仮説を確かめたいと思って研究を進めるものなので、確認バイアスをもたらしやすい¹。データ分析の結果が自分の期待と異なるときは、データ分析のプログラムは丹念にデバッグするけれども、そうでないときはあまりやらないので、そういうものは見過ごされやすいというバイアスが入ったりする。

統計におけるp値の扱いも結構ルーズで、自分に都合のいいように扱った論文がたくさん出過ぎていることへの警鐘のような声明も出ている²。機械学習、特に深層学習というのはすごくたくさんの自由度があり、すごく強力な道具であるが、同時に科学にバイアスをもたらす可能性があるように思う。

例えば、得られたデータに対してn-fold cross validationでハイパーパラメーターを調整して、できるだけいいモデルを作ろうと考える。もしかしたら、それは過適合しているか、オーバーフィットしている可能性もあり、そうするとありもしないパターンを見いだしていることにもなりかねない。

こういう事情があるので、道具として機械学習を使っていく際には、少なくとも科学者の認知バイアスについて科学コミュニティに周知、教育するといったようなことをまず最初にやらなければならない。また、機械学習を使う際に、どういうやり方をすればできるだけそのバイアスに捉われないのかというようなガイドラインを作るとよいだろうというのが私からの提言である。

1 R. Nuzzo, "How scientists fool themselves - and how they can stop", Nature, 526, 182-185 (2015).

2 R. L. Wasserstein, N. A. Lazar, "The ASA Statement on p-Values: Context, Process, and Purpose", The American Statistician, 70, 129-133 (2016).

3.2 人工知能と科学の今後の展開

上田 正仁（東京大学）

人工知能と科学が今後、どういう方向に展開していくかということを見越した上で提言を考える必要がある。一つは、まず個別分野が今後も著しく自律的に発展と進化を遂げるということである。例えば情報科学、生命科学、数学、物理学、応用でいうと自動運転、ロボティクス、金融、サイバーセキュリティ、ゲーム理論、社会科学など。こういった既存の専門分野と機械学習の融合による新展開は非常に役に立っているため、今後も自律的に著しく発展していくと思われる。この面についての提案は、よく分野を見て、面白そうな芽が出てきたテーマを重点的にサポートということだろう。例えば、今日の話の中では高橋先生のプロジェクトがJST未来社会創造事業でサポートされているのは誠にふさわしいと感じた。

2番目として、機械学習や深層学習のもう一つの重要な利点は探索であり、ここから生まれる画期的な展開に期待したい。おそらく、我々が全く認識していないような面白い応用分野が大きく開けてくるだろう。各分野での応用は、その分野の専門家が既に認識しているので、異分野の境界から生まれる新しい応用に目を向けてはどうかと思う。

具体的には、情報、生命、物理、化学、経済、人文科学などを意図的に、政策的に融合させることだろう。ここはシナジー効果が極めて重要であり、CRESTなどのスキームを利用して政策誘導するのが有効ではないかと思う。「こういうプログラムがあったので初めてあの先生と協力して議論してみた結果、こんな面白い提案が出た」というのはCRESTなどではよくあることで、こここの分野でもそういったことが期待できるだろう。

3番目に、深層学習や強化学習などの基礎理論の更なる発展を期待したい。例えば汎化の本質は何かというのは、よく分かっていない。深層学習の汎化の本質は何かというのは極めて興味深い問題である。また、機械学習の研究者の間で汎化性能が向上したという論文が出たときには、ほとんどの同僚はこれをそのままは信用しない。なぜなら先程議論になった確証バイアスがそこにあるからである。

さらに個人的に非常に重要だと思うのは強化学習である。未知の環境が存在する中での強化学習など、実際にやると不安性などがあり、いろいろな工夫が必要になる。また、計算コストが発散するため、普通マルコフ過程などを仮定するが、現実問題では過去の履歴を考慮しながらみんな行動しているわけである。こういった問題の根本的解決が必要で、そのためには情報だけではたぶんダメだろう。数学の深い知識や、物理的な洞察などを統合した非常に学際的で深い学問的研究が必要である。もしこの本質的理解が得られると、応用分野へのインパクトは極めて大きいと考えられる。こういうものに対してはピンポイントでサポートしてはどうかというふうに思う。

3.3 「人工知能と科学」ワークショップ～論点と私見～

福島 俊一 (JST CRDS)

現状認識として、AIの活用が科学研究の国際競争力を左右する時代に向かっていると見ている。海外では米国DARPAや英国Alan Turing Instituteなどがこの方向に注力している中で、日本は何もしないでいると科学の国際競争力が低下する。何か手を打っていかねばいけないと考える。

図3-3-1のベン図に示すように、いろいろな科学的発見があり得る中で人間が認知できている部分の外側にリーチできる可能性が生まれている。今は、人間に認知限界や認知バイアスがあるために限られた範囲しか探せていないが、AIを使うともっと広いところにリーチできるようになる。ここには、AlphaGoが新しい手を見つけたように新しい科学的発見の可能性があって、これからの戦いの領域になるだろう。他のところも当然、国際的な競争はあるが、これからはこの新しい領域に対する武器とか環境の整備というのが必要だろう。では、そこで何をやる必要があるか、というのが主論点であり、我々のチームで検討した提言の骨子としては、人間の認知能力を超えた仮説生成や探索、そして仮説評価・検証のハイスループット化という二つが技術的に重要だと考えている。

それに加えて、科学コミュニティがみんな使っていけるように底上げと普及が必要である。そのためには、道具箱的にきちんと整備してデータも共有してというような環境整備が重要である。

そのための施策としてはMoonshotやMIRAI、CRESTなどの先行優位性を確保するための最先端研究への大型投資と、人や技術を集約・統合して共有できるような拠点を作り、分野別の拠点の間での強い連携を促進していくというのが打ち手となるだろう。

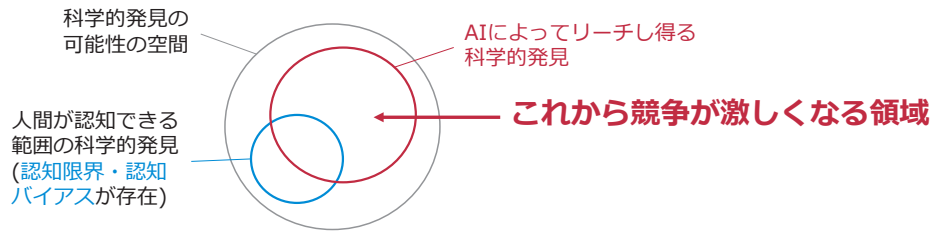
さらに、技術開発だけをやれば良いという話ではなく、科学コミュニティや社会における受容について考えておく必要がある。例えば、AIにより人間が認知できないところを取りに行ったときに、人間に理解できないものは科学と言えるのかといった問題である(図3-3-2)。

この点については今、2つの考え方があると思う。1つは超多次元の現象から規則性を見いだすのは人間の頭では非常に難しいが、一度発見されてしまえばその規則性を理解し得るかもしれない。つまり、その規則性を見つけることとその理解というのは、レベルが違うという考え方である。そのため、XAIのような解釈性を高める技術や、高次元を理解しやすくするような何らかの数学的枠組みなど、技術的なサポートが可能と思われる。

もう1つの考え方は、理解しなくても受け入れるということはあるそうだとすること。例えば量子力学や相対論は必ずしも直感的に理解できているような気がしないが、反する現象がなければ受け入れるわけである。直感的理解が困難でも、その規則性に反するものが見付からなければ受容するというようなことがコミュニティとしてはあると思う。この場合には、与えられたデータから機械学習によりルールが見付かれればOKではなく、そのルールが常に成り立つかというのを能動的・網羅的に自動検証していくような技術があれば、サポートになると思う。技術的なチャレンジを作るだけでなく、科学的発見とは何か、その社会的受容を生むためには何をすればよいかなども含めて考えていくことが重要だろう。

主論点と私見

主論点：AI活用が科学の国際競争力を左右する時代に我が国の戦略・施策は？



戦うための武器と環境の整備

- ① 人間の認知能力を超えた仮説生成・探索のための技術開発
- ② 仮説評価・検証のハイスループット化
- ③ 底上げ・普及：道具箱とデータの共有

先行優位を確保するための最先端研究への投資

Moonshot, MIRAI, CREST等

技術を集約・統合する研究拠点の形成

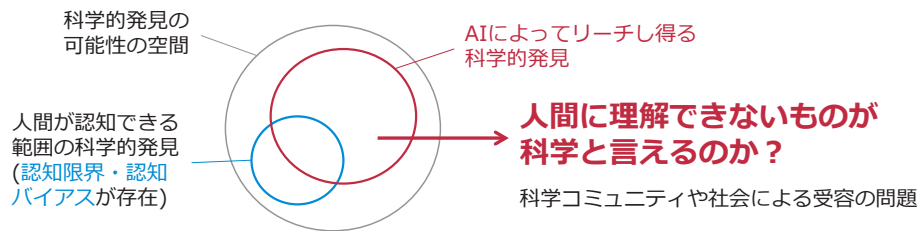
分野別拠点とその間の強い連携

© 2021 CRDS | 1



図 3-3-1 主論点と私見

もう一つの論点



科学としての受容の可能性

- ① 超多次元の現象に規則性を見いだすことは人間に困難であっても、発見されてしまえば、その規則性を人間は理解し得る
- ② 直感的理解が困難でも、その規則性に反するものが見つからなければ受容し得る

補強する技術的試み

- AIによる科学的発見の解釈性を高める技術
- 解釈を助ける数学的な枠組み
- 能動的検証を網羅的に自動実行する技術

科学的発見プロセスの理解、科学としての受容に関する考察

© 2021 CRDS | 2



図 3-3-2 もう一つの論点

3.4 総合討論（1）

モデレーター 嶋田 義皓（JST CRDS）

3.1～3.3の発表を受けて総合的に討論を行った。明らかになったポイントや重要な示唆を以下に示す。

教育・訓練

- ・既存の分野に捉われず、全く違う分野をくっつけるところでの新しい動きが発展していく可能性があるという話は非常に共感する。南方熊楠は南方曼荼羅の中で人間の知識を点と捉え、一見つながっていないようなものの間の隠れた関係性の重要性を指摘した。
- ・今後の施策として拠点的なものが必要であるとの提言に共感する。人材育成という面でも、ロボティクスやAIの技術開発にしても、ある程度のクリティカルマスがないと新しいものが突破できない。DXもそうであるが、新しいアプローチに関しては次世代の育成が非常に大事である。学部生レベルの講義を開講して、研究というものを知ったその日からロボットを使いこなして実験するような世代を育てていくと、ゆくゆくは大学院生、ポスドク、研究者になり、物事の考え方や捉え方自体を変えて行くと思う。
- ・今後サイエンスのやり方が結構変わってくるので、未来の世代を作るのは重要。システムバイオロジーについて学部と大学院と全く同じ講義をして学部学生のほうが理解度が高かったという経験がある。大学院になると、自分の専門という意識ができてくるが、学部の学生ならば生物学はこういうものだと柔軟に考えられるからだろう。知識量の差は出るが、考えさせる問題を出すと学部生のほうが面白い答えを出してきた人が多かった。「生命科学とは最初からこういうものなのだ」と考える未来の世代を作るのが重要である。
- ・義務教育でプログラミングが必修になっている。10年もすると彼らは大学生になる。大学生では遅いかもかもしれないので高校生ぐらいからということもあるかもしれない。サイバーフィジカルでプログラミングしてロボットを動かし、フィードバックを受けて学習するというような考え方をもっと早い世代からやっていくのが大事だろう。
- ・プログラマーも高校生ぐらいがピークになるという話がある。そういう人たちの頭脳に期待したいところもある。
- ・東京大学の物理学科でも新しいプログラムを導入した。今までは機械学習を学生は自分たちで勉強していたが、それをコースに入れた。機械学習を学部で教えるプログラム。最初の半年は機械学習を実際にPythonでいろいろなことを実際に手を動かして学ぶ。後半の半年は、それを例えば強化学習に結び付けて量子系に応用するといったようなことを実践的に学習するプログラムである。
- ・慶應SFCでも講義が始まる。筑波大学と一緒にロボット実験の標準教材を作っており、Opentrons社製の比較的安価な実験ロボットを使った実験計画を立て、普通のランダムな探索から始めてベイズ最適化までいく。こだわりポイントは学部向けの点。仮に全部頭に入らなかったとしても、最初に研究というものだということに触れた瞬間に何を見るかが大事である。海外ではカーネギーメロン大学で修士レベルの標準コースがある。これは学位になるプログラムである¹。

1 <http://msas.cbd.cmu.edu/curriculum/>

コミュニティー・場作り

- ・橋本先生の進めている勉強会シリーズ²のような草の根的な活動を、ぜひJSTからもサポートしていただけるといいかと思う。
- ・機械学習を使ってハイスループットの実験をやる話というのは、力業でたたくというような話だと思う。そうすると、ものすごくお金のかかる投資をしないといけないという話になるように思われる。ディープラーニングが出てきたときには、結局、NVIDIA一択となった経緯がある。今回も、そういったものに相当するようなキーテクノロジーを早く見つけて投資しないといけないだろう。
- ・機械学習に関しては、まずいろいろなことをやってみてそこで経験を積むというようなサンドボックス的な取り組みが必要なのではないか。そういうことが可能となるような、少し余裕のある拠点というのをぜひ作るべきだと感じる。
- ・勉強会として自発的に集まってやっているうちはよいが、それを継続的にコミュニティーに発展させ、更にそこから科学につなげていくというのは、なかなか難しい。草の根的に立ち上がっているネットワークはたくさんあるが、継続性というのが難しい。そういうところは国の支援があると素晴らしい。そこから、大きく拠点のようになっていけばいいと思う。

分野融合

- ・工学的な視点では、機械学習はスパコンとすごく似ていると思う。道具であり、かつ人間の直感を越えたような結果を出してくれるという意味でよく似ている。スパコンの側では、計算機、アルゴリズム、ソフトなどを演算と通信という切り口で考える。どういうタイプの演算がどのぐらいあるか、どういうタイプのデータ転送がどのぐらいあるかという二軸の中で計算機やアルゴリズム、アプリケーションが仕分されて最適な議論がされる。機械学習でもそのようなことができないかと思っている。計算機でいうところの演算とデータ転送のようなメタな軸で、機械学習及びそのデータセットを議論できると進むのではないか。
- ・機械学習というのは、ちょうど蒸気機関が出てきたところで、これから熱力学が現れるというような時期だろう。これから基礎理論というものは出てくると思われる。
- ・上田先生の発表の2番目で探索から生まれる画期的な展開と触れられたが、まさにこの分野融合の思いも寄らない展開というのが、科学の一番重要なところだと思う。情報、物理、化学など様々な分野があり、それらを融合させて、そこに人工知能や機械学習を加えて発展させるという芽を見つけて育てることが大事である。
- ・今、機械学習はあまりにも役に立っているので、それぞれの人がそれぞれの専門分野で夢中になるのに十分な応用がある。これは大きな科学が生まれるときの特徴だが、数年後に我々は全く別の機械学習に夢中になっている可能性が大いにある。そういう可能性を強く感じる分野である。各分野での直感、インスピレーションをぶつけ合うと更に面白い可能性が出てくると思う。
- ・拠点を作ったときのディレクターシップが重要だろう。ビジョンを持ったディレクターシップの下に多くの優れた人が集まって自由に研究する。これはフランスやドイツなどが得意なシステム。そういうことをすると花が開くような気がする。日本はいろいろな小さなアイデアを花開かせるのは得意な人たちが結構いっぱいいるので、GPUに相当するようなコアテクノロジーなども出てくる可能性は十分あると思う。更に半導体を復活させるキラーテクノロジーも生まれると楽しい。

2 <https://cometscome.github.io/DLAP2020/>

3.5 科学哲学から見た科学の自動化

呉羽 真 (大阪大学)

私は専門が哲学で、今日の話は書籍「人工知能と人間・社会」(勁草書房、2020年)に書いた内容から取り出してお話する。

科学の自動化に興味を持つ理由として、科学の自動化がもつ二つの可能性が挙げられる。一つは自動化によって人間の科学とは異なる仕方世界を理解する「alien science (異質な科学)」というものが出てくるのではないかと、という点である。これによって科学哲学における「N=1」問題の解決というような、人間のものと異なる種類の科学が出てくることで科学とは何なのかの理解が進むだろうと考えられる。一方で、それをどうやって実現できるかということ、特に科学的発見のような創造的なタスクをどう実現したらよいかということについて、いろいろと面白い問題があるだろう。

もう一つの可能性として、科学の自動化が進むことで科学が本来の目的あるいは価値というものを失ってしまう可能性もあり得ると考えている。これを「alienation of science (科学の疎外)」と呼んでいる。例えば、科学が人間に理解できないもの、あるいは理解を目指さないものになってしまうかもしれない。また現状では、AIはデータの分析を行い人間は創造的なタスクに集中できるというようなメリットが強調されているが、今後、技術が進んでいく過程でもしかしたら科学において人間が創造性を発揮する余地がなくなってしまうのではないかと懸念もある。

これがどれほどシリアスな懸念なのかはまだ分からないところがあるが、そういったことを考えるのが面白くて研究を進めている。理解と創造性、あるいは理解と科学的発見について科学哲学の議論がある。今日は、理解ということに関して既にいろいろ議論が出ている中で、ブラックボックス問題について紹介したい。

ブラックボックス問題は機械学習のいろいろな応用分野で問題になっている(図3-5-1)。科学の場合には特に世界の理解というのを中心的目的にしてきたので、深刻な問題になり得る。例えばScience誌の2017年の特集号の中で、あるコンピュータサイエンティストが「私たちは理解可能な科学の時代を終えつつあるのではないかと指摘していた¹。ここで当然、問題になるのが、理解をもたらさない科学というのは本当に科学の名に値するのか、ということである。機械学習を用いて正確な予測を生み出すということが仮にできるようになったとして、それは科学というよりも単によく当たるお告げみたいなものではないのかといった点が、哲学的に興味深い問題としてある。

これに関してはいろいろな論点があり、ブラックボックス問題が解決可能であるかということに加えて、それが本当に解決すべき問題なのかということに関しても様々な議論がある。まず、理解可能性の基準は、そもそも時代とともに変化してきたし、これからも変化していく可能性がある。また人間の思考過程もブラックボックスだと言う人もいる。とはいえ、コンピュータを用いた数学の証明に関する議論を見ると、程度の差はあると思われる。XAIの研究も進められているがどれほど有効なのかは未知数であり、予測性能と説明可能性の間にトレードオフがあるということも指摘されている。

これらに加えて重要だと思うのは、理解の価値に関して科学分野の間でも見解が異なるという点である。私が科学の疎外に関して学会発表をしたときのアブストがTwitterで話題になったことがあり、それに関していろんな人が意見を言っていた。その中で、科学はそもそも理解を重視しない方向に進んできたのではないかと、いった意見があった。一方で、人工知能学会と日本物理学会の共同セッションに呼ばれて科学の疎外の話をしたら、ある物理学者から、「物理学の立場としては機械学習を使っても、あくまで世界の理解ということを目指していくのだ。そのスタンスは今後も変わらない」といった力強いご意見をもらい感銘を受けたこともある。

1 J. Bohannon, "The cyberscientist", Science, 357, 6346, 18-21 (2017).

そのように理解に対する意見は科学分野ごとにも違う。そういった議論を集約していくことで理解がなぜ重要なのか、どれくらい重要なのかということも今後、明らかになってくるのではないかと。

そういった分野を越えた議論が必要で、市民がどう思っているかということも考慮する必要がある。これに関して、日本人はあまり気にしていないのではないと思われるが、おそらく誰も調べていないので、取りあえず調べてみたらよいと感じている。

科学的発見に関わる創造性についても触れたい(図3-5-2)。じつは、科学哲学は科学的発見についてあまり議論してこなかった。有名どころではカール・ポパー「探求の論理」(1934)があり、ポパーはアイデアを考案する「発見」とアイデアを検証する「正当化」の過程とをはっきりと区別した上で、前者に論理はなく、論理的に分析不可能な不合理なものだとして科学哲学の主題から完全に切り捨ててしまった。

このようなポパーの立場がこれまで主流であったが、もちろん例外もあった。特に、科学者が科学哲学者として科学的発見の方法を分析した場合というのがあり、その中で様々な提案が行われてきた。例えばパースの「アブダクション」(1878)、ポアンカレによる「美的判断に基づくアイデアの結合」(1908)、サイモンの「ヒューリスティックスを用いた問題空間の探索」(1977)などがある。認知科学ではアナロジーの役割が非常に強調されていたりする。このあたりも参考にするとよいだろう。

また、創造性の哲学という分野では、創造性とはそもそも何なのかという定義や分類の議論が行われている。力づくの探索による科学的発見というのは本当に創造的なのか、人間の場合には創造的とは言われないけれど、人間とは別種の創造性もあり得るのか、など。こういった点は哲学的に興味深いところである。

2点提言する。まず科学の自動化は、「科学的理解とは何か」「科学的発見・創造性とは何か」という問題や、「そもそも科学とは何なのか」といった問題を改めて考え直す機会を提供する非常に興味深いものである。その中で哲学、心理学、認知科学など使える議論がいろいろあり、知見を取り入れると面白いのではないと思う。

また、科学の自動化は、科学の価値の問題あるいは科学と社会の関係性をめぐる課題を生み出すので、そういった問題に対処していく上で、様々な分野の科学研究者の方の意見の集約が必要だろう。さらに、市民がどう考えているのか調査することも重要である。その上で、そういった意見がある程度分かってきた段階で、科学政策、科学教育、科学コミュニケーション、哲学など、いろいろな分野の研究者を集めた具体的な対策の段階に移っていけばよいと思う。

AI駆動科学と理解

機械学習技術の利用に伴う「ブラックボックス問題」

- 例) トウルイユ「1つの興味深い可能性は、私たちは「理解可能な科学」の時代を終えつつある、ということだ」(Bohannon 2017)
- 理解をもたらさない科学は、「科学」の名に値するか? よく当たるお告げと何が違うのか?



疑問: ブラックボックス問題は解決可能か? 本当に解決すべき問題か? ➔ 関連する論点

- 理解可能性の基準は時代とともに変化してきた (例: 遠隔作用)
- 人間の思考過程もブラックボックス? (と言われるが、程度の差はある。コンピューターを用いた数学の証明に関する議論を参照)
- ブラックボックスを開けるXAIの研究も進められている (ただし予測性能と説明可能性の間にトレードオフがある?)

図3-5-1 AI 駆動科学と理解

科学的発見の科学哲学

科学的発見…科学研究の最も創造的なフェーズ

➔ これまで科学哲学はあまり論じてこなかった

- 「(狭義の) 発見の文脈」と「正当化の文脈」を区別し、前者を科学哲学の主題から除外
 - 例) ポパー『探究の論理』(Popper 1934): 科学的発見に論理はない



- 例外) 科学哲学者兼科学者による科学的発見の方法の分析
 - アブダクション (Peirce 1878)
 - 美的判断に基づくアイデアの結合 (Poincare 1908)
 - ヒューリスティクスを用いた問題空間の探索 (Simon 1977)
 - アナロジー (Holvoak & Thaaard 1994)

図3-5-2 科学的発見の科学哲学

3.6 Nobel Turing Challenge

北野 宏明 (ソニー・コンピューターサイエンス研究所)

Nobel Turing Challengeはロボカップと似ている。ロボカップは非常にアジリティの高いインテリジェンスだったが、Nobel Turing Challengeはもう少しよく考えるインテリジェンスをと思って提案してきた。これは2050年までにノーベル賞をAIで取ろうというようなことで、分野としては私がずっとやっているのがシステムバイオロジーなので生理学・医学賞としているが、もちろん物理でも化学でもよいだろう。

科学的発見というのは産業革命以前の状態だと認識している。測定などは相当自動化も進んでおり、オミックスでかなりできている。しかし非常に家内制手工業的な実験が多い。ハイスループット化もできており高精度なものもあるが、それは全工程のごく一部である。また、データがたくさん出るがインフォマティクスで解析して、最後は「これは一体何だ」とか言いながら人手で解析をしており、全然自動化にもなっていない。また、発見やセレンディピティなどの実態は何なのかというのはよく分かっていない。

科学哲学では人間の科学の発見のプロセスやパラダイムシフトなどは議論されてきたが、コンピューショナルにという議論は無かった¹。唯一あるのはユーロ・シャピーロのModel Inference System²で、これはPrologベースのシステムで帰納的推論を行うものであった。

システムバイオロジーは私が20年ほど前に言い出し、学会を作るなど活動をしてきた。20年経って分かったのは、これは人間のための学問ではないということ。これを学会で発表したところ皆どん引きしていたが、システムバイオロジーはすごく発展し、様々な発見があったのも事実である。システムバイオロジーの教授³のホワイトハウス入りも果たした。そういうところまで来たが、比較的小さなモデルを非常に精密にメカニズムベースでやるのか、大きなオミックスをインフォマティクス・統計的にネットワーク推論でやるかというアプローチに二分化されている。大規模スケールの高精度モデルはできていない。

何故かという、もちろん対象の複雑性もあるが、現実問題としては、大規模な高精度モデルをやるだけのマンパワーがなく、精度を保ったアッセイや実験ができないためである。したがって、大規模スケールならオミックスでアプローチするしかない。細かいモデルだったら丁寧にやれるというところのトレードオフが解消されていない。そこが解消されると随分変わるだろう。Science for AIかAI-Human Hybrid Systemというのがシステムバイオロジーの本当の姿ではないかと思っている。

同時に、科学的発見の形態というのをもう少し考えなければいけない。仮説空間の探索と検証をどれだけやるかということだが、これはブルートフォース、力づくである。ノーベル賞の発見もすごく単純化するとSearch & Optimizationとして理解できる。例えば、山中先生の場合では、FANTOMデータベースなどから24の遺伝子でリプログラミング可能ということが分かって、それから、Leave-one-outで4つの山中ファクターまで煮詰めている。白川先生の場合にもあるとき、インターンの人が1000倍ぐらい触媒の濃度を濃くしてしまってポリアセチレン薄膜ができ、それから今度は導電性ポリマーという目標への二段階の最適化をやっている。もちろん、全ての科学的発見がこのプロセスというわけではないが、かなりの部分はSearch & Optimizationだと考えられる。

そういうふうと考えていくと、AIがやるサイエンスというのは我々の知識の外縁を拡張すると同時に、我々が発見しやすいものの発見という部分から行くだらう (図3-6-1)。それをベースに広げるとするのが、おそら

- 1 ワークショップ終了後、参加者の1人からPaul Thagard, "Computational Philosophy of Science" (The MIT Press, 1988) で議論されていたとの指摘があった。
- 2 <https://www.ijcai.org/Proceedings/81-2/Papers/100.pdf>
- 3 Eric Lander。米バイデン政権下で科学技術担当大統領補佐官を務める。

く最初にやるべきことだろう。それに加えて、AlphaGo Zeroの例に見るような、我々が見つけられないようなことを見つけてくるのはAIがないとなかなかできない部分であり、そこを加速することが重要だろう。

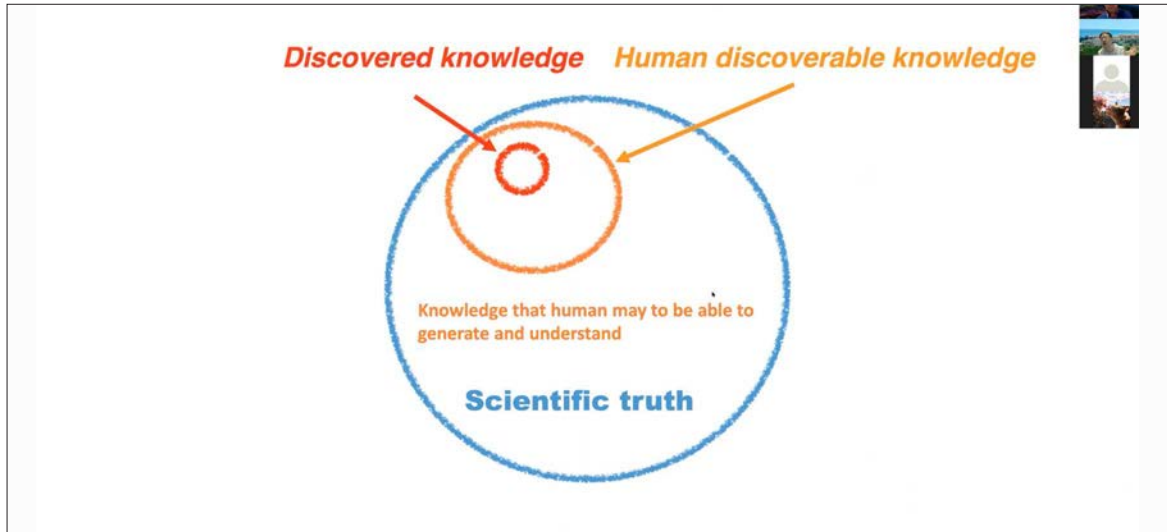


図3-6-1 AIによる科学的発見

仮説空間のUnbiasedな探索が重要である。オミックスが出てくる前は「この遺伝子が重要であろう」とかいうふうにして、そこにある意味で賭けて、それを実験していたわけである。しかしオミックスでやったことは、Unbiasedな測定だった。人間の「何が重要か」というア・プリオリな期待値ではなく、とにかく全部を見るということをした。そうすることで、今まで見えなかった風景が出てきて、発見できないことが発見できたわけである。今、サイエンスのやり方というのはア・プリオリにこれが重要だというふうに行われているが、そうではなくUnbiasedに探索することが重要だろう。したがって、全ての仮説を生成して検証するというプロセスというのが、次のサイエンスの在り方の変革だと思う。

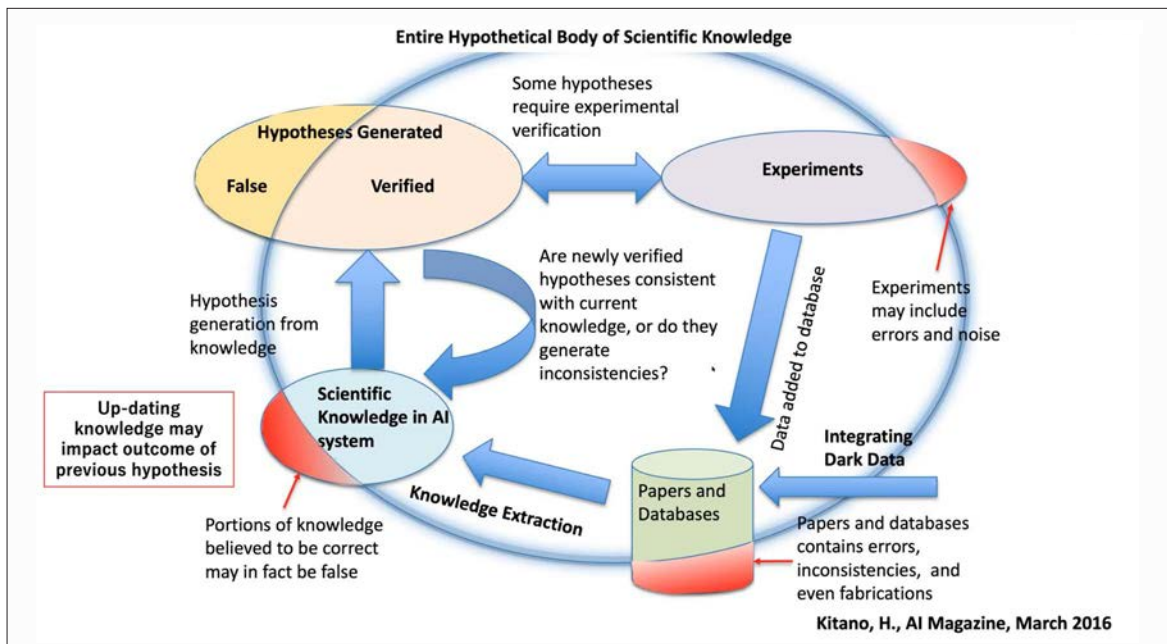


図3-6-2 仮説生成・検証プロセス

3 戦略的議論
提言・総合的議論

それをやるとすると、今の知識からスタートするにしても、論文やデータベースなどから仮説を生成して実験して、それを検証するというサイクルになる（図3-6-2）。情報系での議論ではこれで十分だが、メディカルの専門分野の人との議論となると、実験の再現性やデータの信頼性などの懸念が出てくる。本当にでたらめだったらサイエンスは進まないはずなので、いいかげんと言いつつも大数の法則のようなものが働いていて、統計的に見るとまあまあのところにとまっているというのが実情ではないか。どれが間違っただけなのかはア・プリオリには分からないということもある。

特に注目されていることであればすぐに検証されるが、そうではないところは放置される。しかし、そこで何が重要なことも分からない。そうすると、どのくらい正確なのか分からない知識やデータから仮説を出して検証し、少しずつ間違っているものを排除して純度を上げていくようなことが必要だろう。これを「トワイライトゾーンリーズニング」と呼ぶ。本当に何が正しいか分からないようなところから、何か仮説を作って、それを検証して、だんだん、それをクリーンにしていくというプロセスである。

またデータの取り方も変えなければいけない。今は当てようとして実験をして論文として発表するわけだが、機械学習を前提とするなら、当たっていないところ、ネガティブデータをいかに効率的に集めるか、そのプランニングが重要になってくる。ネガティブデータを出さないようにバイアスしているような現在の考え方から、大きく変わるだろう。

実際にはまずコネクティド・ラボを使って実験室の自動化をどんどん進め、その後、並行して進めておいた仮説生成の研究につなげていくという形になるかと思う。

我々のところの研究例として、人が論文を読み込んでキュレーションして描いたある免疫系のカスケードのうち、同じ論文セットから機械学習で知識抽出すると97%位まで抽出できた。できないところは人間の記述のくせがあることも分かり、これをどうカバーするかということも大体分かってきた。

このときに面白いのは、ここに「ない」相互作用がどんどん生成されているということである。間違いも入っているが、その相互作用はその後の論文で検証されているものが多いことに気がついた。これはもしかしたら予測能力があるマシンを作ったのではないかと考え、実際に確かめてみた。

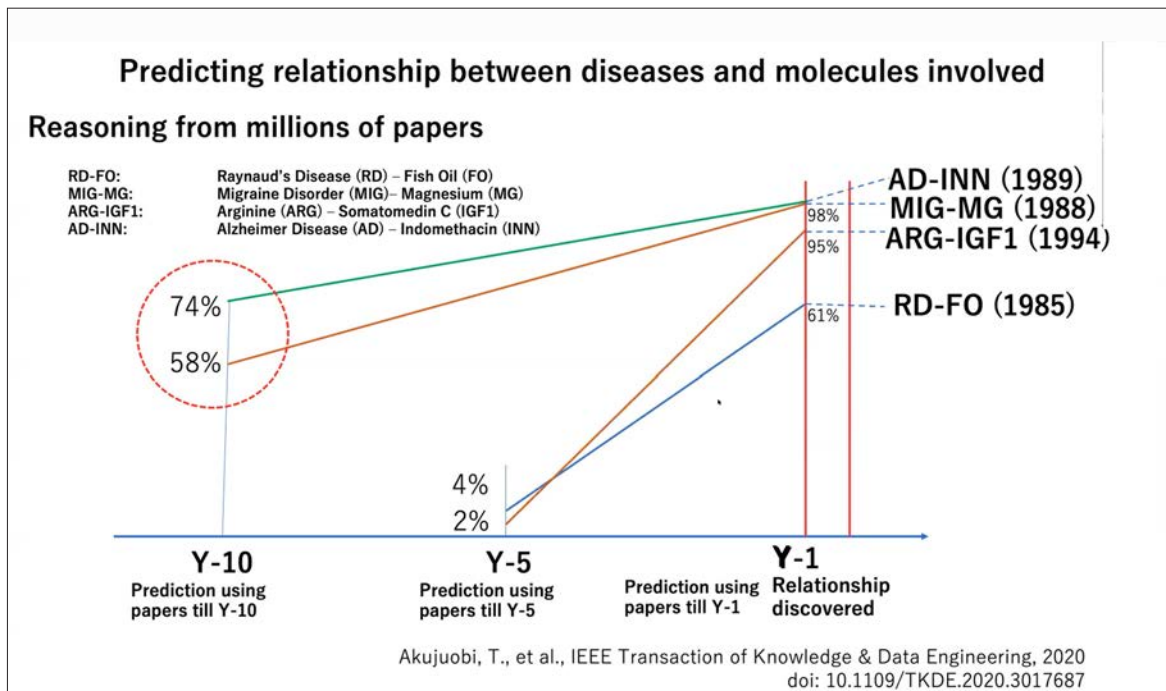


図3-6-3 論文データによる病気・分子の関係予測

幾つかの疾病とそれに関連する相互作用がある年（Y年）に確認されているときに、その前の年までの論文からそれが高信頼度で出てくるかどうか調べた。すると、Y-1年までだと結構出てくるだけでなく、Y-10年でも結構な信頼度で出てくるものもあると分かった。逆にY-5年でも全然出てこないものもあったりするので、中がどうなっているかというのは注意深く見なければいけない（図3-6-3）。こういうことが分かってくると、これは年単位で発見を早められる可能性が見えてくる。高信頼度でこういう相互作用があると分かったら、それを確認する実験を自動生成するわけである。このような実験はマウスなどを使った動物実験だとなかなか自動化できないが、培養細胞やiPS細胞を使った細胞レベルの実験であれば自動化してどんどん確認できるので、年単位でのスピードアップが可能だろうと考えている。希望の持てる結果である。

我々は今、OISTなどでラボを大規模に自動化するというを行っている（図3-6-4）。データフローマネジメントだけでなく、完全ロボットだけの場所と人とハイブリッドになる場所が出てくるのでフィジカルフローマネジメントも必要で、さらに細胞やサンプル、試薬などのマテリアルのマネジメント、制御フローのマネジメントなどをきちんとやらなければいけない。こういうプロジェクトは総合力が要るので、グローバルなプロジェクトを立ち上げたほうがいいだろう。Alan Turing InstituteでNobel Turing Challengeをやることになり、私がCo-PIとなりRoss KingとYolanda Gilと一緒にプロジェクトを立ち上げフィジビリティスタディを行っている。

こういったことの重要性は特にアメリカはもう気が付いているので、これから順次、お金が入ってくるようになるだろう。日本もシステムティックに対応していく必要がある。

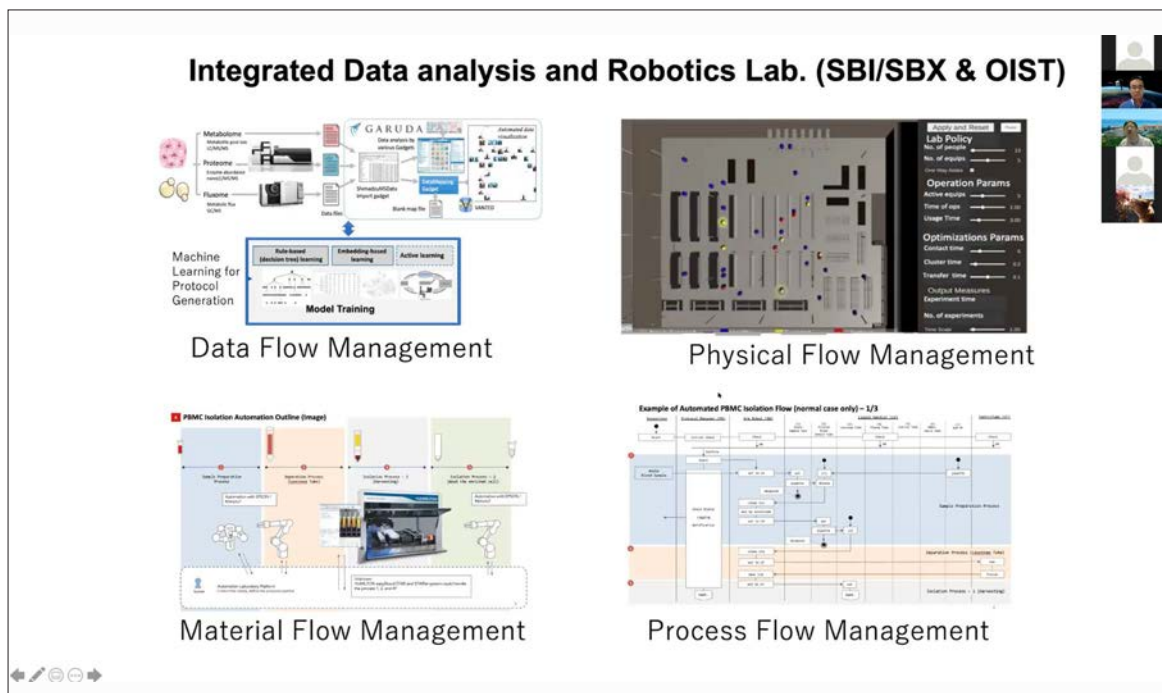


図3-6-4 統合データ解析とロボット実験室

3.7 総合討論 (2)

モデレーター 嶋田 義皓 (JST CRDS)

3.5～3.6の発表を受けて総合的に討論を行った。明らかになったポイントや重要な示唆を以下に示す。

科学的な理解、科学の疎外

- ・機械学習により、そこにある原理というのは分かるかもしれない。ただし、原理が分かったとしても複雑なニューラルネットワークが「これは猫である」というような結果を出したときに、それはなぜかと説明しようと思えば人に理解できる説明にはならないだろうとも思う。
- ・現代科学では、線形でよく定義されたクローズドな問題、閉鎖系の問題に関しては大体研究し尽くされている。残ったフロンティアは、生命、認知、社会システム、生態系、気候変動など、大自由度の非平衡でかつ非線形の問題である。例えば蔵本-Sivashinsky方程式についてリザーバー計算では、系が記憶を失う時間スケールよりも1桁大きい時間の予測ができています。このように、理解なしでも予測が当たることは工学的には有用だが、それは本当に理解を伴う科学なのかという問題が現実突き付けられている。科学と技術というものの分岐がほぼ確実に起きつつある。
- ・非常に複雑で非平衡的な自然界というものを、我々の身体的な構造、脳の構造に合わせてコンパクトな表現に書き直すという試みとしての科学は残るだろう。今は形式性や論理性が重視され物理や数学がコアにあるが、将来的には理解はそもそも何なのか、理解自体を研究する認知科学のようなものを中心にくると思われる。
- ・機械学習の発展やAIのモデル駆動の発展と融合して取り組んでいくべきだろう。様々な分野を糾合するための一つの軸として複雑性へのアプローチ、非平衡系の熱力学へのアプローチがある。ただし、複雑性にも2種類ある。一つは非常に単純な物体と物体の間の相互作用に非線形が含まれていて、創発的に立ち現れてくる複雑性、例えば重力多体問題のようなもの。もうひとつは、生物学の場合に顕著で、系自体が存在論的、オントロジカルに複雑性を持っている場合である。存在論的に複雑で、それが動作すると立ち現れてくる表現型も複雑。この組み合わせは科学のフロンティアになっていて、ほぼアプローチできていないと思う。
- ・「科学の疎外」のような懸念は懸念としてある。しかし、多分、技術としてブラックボックス的なAIサイエンスが発展したら、更にそれは道具としてパッケージングされて人間の科学に使われていくと思う。
- ・生命科学の場合、対象とする問題はかなり複雑で、対象の数のスケールも大きい。したがって、心配する前にやれないことがあまりにも多過ぎて、それをやるだけでも非常にうれしいというのがあると思う。Ross Kingのロボット科学者の例でも実験そのものは簡単なジェネティクスである。やれる実験と作っている仮説の範囲があまり広くないので成果としては限定的だが、あのような実験をやろうと思っても普通はできない。では、ポスドクを1000人呼んでくるのもできないし、それを次々に実験することでどれだけその人のキャリアにプラスになるかも分からない。
- ・分野にもよるが、生命科学の場合は自動化するほうのベネフィットが当面ははるかに大きく、インパクトがあるというふう思う。
- ・今回のワークショップでは科学の目的としての理解を捨てるかどうかや、理解なき科学の拒否感をどうするかという視点の議論があったが、むしろ、理解が科学の手段であるという側面もあるかと思う。理解がどのような機能を果たしているのか、機械学習が科学的な理解をどう変えていくのかというような可能性をポジティブに捉える視点も、プロポーザルにあってもいいと思う。
- ・理解の部分はXAIであるとか、いろいろな法則を発見したときに、それがなぜかというところにつなげるような研究が必ず行われるだろう。すぐに理解できるかどうかは分からないが。

- ・何か法則が見つかって、それが実際に現象にグラウンディングされているとすると、実験すれば、その現象が起きるわけである。我々が見ていない現象というのがあって、それをやってみたら本当に起きたというふうな発見が多分、行われるだろう、今でも、現実問題として原理は分からないが現象は知られていて、それを使っているという例はたくさんある。それよりはもう少しましな状況になるのではないかと期待している。

計算・データ・モデル

- ・生命科学分野だけでなく、機械学習、特に深層学習一般でいうと自然言語処理などでは非常に重いモデルを計算パワーをたくさん使って回さなければいけない。ある意味で力業の勝負になってきているように思われる。コンピューティングパワーがボトルネックになることを危惧する。
- ・論文から学習するというだけでもまず論文に対するアクセスをどうするかという問題と、それを今度はどう計算するかということを考えなければいけないので、結構大がかりになる。
- ・自然言語処理での例が顕著だが、言語モデルが発展したことで幾らでも計算力を突っ込めば性能が上がるスケールリング則があると指摘されている。生命科学ではシーケンスデータを突っ込んで、そこから表現型までつながるかもしれないという期待は皆持っている。そこは本当に力業の領域になると思う。計算量が莫大なところをどうやって計算量のオーダーを落とすかというところは、神経科学とAIとの境界領域であり、何かブレークスルーが起きるとい歴史も繰り返されてきている。
- ・オープンにシェアするカルチャーもあったりする。研究室の学生がGithubにあるAlphaFoldを動かして、いろいろな検証を始めている。そのようにサイエンティフィックな部分に関しては、結構オープンにいろいろなことを協力しようという動きもある。何も無いところから全部をみんながゼロから作り上げるという話でもないのではないか。
- ・持てるものだけしか計算できないというような懸念もあるだろう。
- ・モデルを自分で作るのではなく、使うのだったら、そこまでの計算量は要らない。
- ・問題は、一番いいモデルはまず出す前に自分で使うことになるので、時差がある。米国DoDなどが興味を持っているのは、これが国家安全保障に関わるからである。先に高性能な発見マシンを作った者がどんどん発見して特許を取れるわけである。ここは決定的に差がつく。それがマシンレベルでのパフォーマンスの差に依存すると、人間が頑張っ追いつける領域ではなくなってきて、そこはWinner-take-all的になり、かなり深刻な話になる。皆あまり直接的には言わないが、頭の中で完全に認識しながらやっているの、そういう方向になる前提で我々はどうするべきかを考える必要がある。
- ・産業界の一つの貢献はデータなのではないかという気がする。どうデータを共有していくかは重要な課題だろう。今回のAIブームはある意味、産業応用が結構進んでビジネスシナリオのようなものが結構出てきたことで盛り上がったわけである。科学と技術の離婚が起こると、その先にある産業はもっと離れていくようにも思われる。だから、産業界の人たちはこの話についていけるのだろうかという危惧はある。
- ・企業は結構データは持っているのだがなかなか出さない。例えば化学会社はNGデータも含めて結構持っているだろう。それを出す仕組みが必要になってくるが、それを国として考えるのか、その他の手段なのか、そこから考える必要がある。

付録1 プログラム

14:00～14:10	趣旨説明	
14:10～15:30	科学を俯瞰する	
	橋本 幸士（大阪大学）	（15分発表+質疑5分）
	高橋 恒一（理化学研究所）	（15分発表+質疑5分）
	徐 一斌（物質・材料研究機構）	（15分発表+質疑5分）
	清水 昌平（滋賀大学／理化学研究所）	（15分発表+質疑5分）
15:40～16:45	戦略についての提言・総合討論	
	丸山 宏（Preferred Networks）	（5分発表）
	上田 正仁（東京大学）	（5分発表）
	福島 俊一（JST CRDS）	（5分発表）
	総合討論（1）	（20分）
	呉羽 真（大阪大学）	（5分発表）
	北野 宏明（ソニーコンピュータサイエンス研究所）	（5分発表）
	総合討論（2）	（20分）
16:45～17:00	ラップアップ	

付録2 参加者リスト

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

コメンテーター

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

CRDS「機械学習と科学」調査チームメンバー

東 良太、木村 康則、嶋田 義皓、島津 博基、相馬 りか、福島 俊一、的場 正憲、眞子 隆志、宮藺 侑也、若山 正人

関係府省・機関

文部科学省研究振興局参事官（情報担当）付

出口 夏子、上村 理、齊藤 修啓、高山 正行、柴田 絵美

文部科学省研究振興局参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）付

小川 浩司

新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO） ロボット・AI部

吉田 准一、後藤 哲也、柳瀬 大祐、仙洞 田充

新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO） 技術戦略研究センター（TSC）

伊藤 智、多田 達也、紋川 亮、吉野 順也、松下 努、高梨 伸彰

JST

赤木 浩、石井 加代子、上野 伸子、住田 朋久、高島 洋典、舘澤 博子、沼澤 修平、馬場 寿夫、林部 尚、日江井 純一郎、平野 徹之、丸山 隆一、宮下 哲、吉脇 理雄

（敬称略、所属・役職はワークショップ開催時点）

ワークショップ企画・報告書編集メンバー

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

科学技術未来戦略ワークショップ報告書

CRDS-FY2021-WR-01

人工知能と科学

令和 3 年 8 月 August 2021

ISBN 978-4-88890-752-1

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/>