データ駆動・AI 駆動を中心としたデジタルトランスフォーメーションによる生命科学研究 の革新

研究総括: 岡田 康志 (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/東京大学 大学院医学系研究科 教授)

研究領域の概要

情報技術を、作業の単なる効率化ではなく、作業プロセスそのもののありかた、組織のありかた、そしてそれぞれの分野の文化にまで踏み込んだ包括的かつ革新的な飛躍を目的に導入することをデジタルトランスフォーメーション(DX)と呼びます。DX が革新すべき対象の一つに科学研究、特に生命科学分野があります。実際、ディープラーニングの登場以降、バイオ分野と AI 研究の融合は目覚ましく、画像解析、疾患リスク予測、新薬探索、タンパク質三次元構造予測などの研究が世界中で活発化しています。

生命科学において DX が特に期待される理由の一つには、生命システムがタンパク質分子 1 個から生態系にいたるまで、生命科学研究の対象は数千種類あるいはそれ以上の構成要素 が互いに相互作用する大規模複雑系であるという特性があります。計測・実験の自動化や計算機技術の進展により、このような複雑な系から膨大なデジタルデータがハイスループットに取得可能となりつつある一方で、すでに人間の思考能力ではもはや全てを解析しきれない状況となっています。

そこで本研究領域は、情報科学・工学・生命科学が三位一体となって生命科学研究における DX を推進する、いわば「データ駆動型・AI 駆動型」の研究によりこれまでは手が届かなかったような高度な科学的発見を目指します。

具体的には、(1)多様、大量のデータセットから AI などデジタル情報処理技術を活用することでデータ取得・解析の質的・量的限界を超えて、新しい生命現象とそのモデル化を可能とするための研究開発を行い、<u>次世代型生命科学研究のモデルケースを示す</u>ことを目指します。また、そのために必要な要素課題として(2)革新的なデータ駆動型研究手法や AI 駆動型研究の手法の確立に向けた研究開発もサポートします。

上記により、生命科学研究におけるパラダイムシフトの潮流を作ると共に、複雑な生命システムの解明が可能な社会、研究者が真に創造的な活動に取り組むことが出来る社会の実現を目指します。

なお、本研究領域は文部科学省の人工知能/ビッグデータ/IoT/サイバーセキュリティ統合プロジェクト(AIP プロジェクト)の一環として運営します。

募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

1. 本領域のねらいと具体的な研究開発例

本研究領域は、生命科学研究において大量のデータセット・質の高いデータセットを基に データ駆動型・AI 駆動型の研究を推進し、仮説・検証・解析という研究サイクルを回すことで、人間の認知能力では辿り着かなかったかも知れない科学的発見を創出すること、そしてそれにより次世代型生命科学研究のモデルケースを示すことを目的とします。また、そのために必要となるデジタルトランスフォーメーション (DX) に関わる技術や手法開発をサポートし、生命科学研究におけるパラダイムシフトの潮流を作るような技術を創出することも、上記目的の達成のために重要であると考えています。しかし、DX のための技術開発・手法開発そのものが本領域の目的ではありません。技術・手法の開発を主眼とする課題においては、上述の科学的発見を見据えた研究開発への貢献を明確に意識した研究提案を期待しています。

具体的な研究課題として以下に例を示しますが、この限りではありません。

(1) 多様、大量のデータセットを用いた新しい生命現象やその法則の発見

自動化機器や高度な分析機器等の活用により、均質、リアルタイム、マルチモーダルなデータを取得し、AIを活用することで、人間によるデータ取得・解析の質的・量的限界を超えた新たな生命現象の発見と、そのモデル化を可能とするための研究を推進します。

- ア 大規模反復試験により、偶然に起こる生命現象をモデル化する研究
- イ 細胞や組織の活動を、リアルタイム・自動で計測し、さらには摂動を加える等により、 疾病の数理的理解等、生命現象の解明につなげる研究
- ウ DBTL (設計 (Design) -構築 (Build) -試験 (Test) -学習 (Learn)) サイクルや DMTA (設計 (Design) -合成 (Make) -試験 (Test) -解析 (Analysis)) サイクル の自動化・高度化により、細胞内の代謝システムのモデリングや標的分子の探索など を通じて、物質生産や創薬の高度化等に資する研究
- エ イメージング情報とオミクス情報の融合解析等により、細胞や組織、個体から非侵襲 でリアルタイムのデータ取得を可能とする技術を開発し、多細胞生命システムの構 築原理など、生命現象の解明に繋げる研究

(2) データ駆動型研究に資する革新的なデータ取得・解析技術の開発

マルチモーダル解析や分析装置の自動化等、均質かつ大量のデータを取得するための革 新的技術開発により、データ駆動型研究の加速に資する基盤技術研究を行う。

ア 高度情報処理技術との組合せを前提とすることで従来の限界を超えて大規模な高次

元データの取得を可能とするインテリジェントな計測技術の開発

- イ 熟練した研究者の手作業を要していた実験・計測手法を自動化・ハイスループット化、 インテリジェント化することで従来は実現不可能であった大規模な高度データ取得 を可能とする技術の開発
- ウ マイクロ流路技術とロボット・AI の組み合わせにより、化合物合成からアッセイ、 評価までを一気通貫する新規基盤技術の開発
- (3) データ駆動型・AI 駆動型研究の手法の確立に向けたデータ処理・解釈、モデリング、 知識処理手法等の研究開発

生命科学における研究プロセスにおいて、人間の認知能力・バイアスを本質的に超えた発見に向けては、実験データに基づく解釈・モデリングの網羅性、およびそれらの妥当性の評価が重要となる。これらのアプローチには様々なAI技術の開発が不可欠であり、生命科学分野におけるこれまでの膨大な知の蓄積を踏まえた新たな科学的発見の在り方を確立する。

- ア 自然言語処理技術に基づいた、先行研究からの領域知識の抽出と、それらを利用した 研究方策策定を補助するシステムの開発
- イ 得られた実験データや文献データ等から、次に検証すべき仮説や施行すべき最適な 実験条件の生成を行う自動実験計画等の能動推論手法の研究
- ウ データベースに蓄積された領域知識と実験データとを融合し、新たな科学的発見に つながるようなモデルを自動的に組み立て・改善・評価を行うことが可能なシステム の開発

2. 領域の運営方針

本領域は以下の方針に基づいて運営していきますので、その趣旨を十分にご理解頂いた上で、ご提案をお願いします。

(1) チーム編成

本領域では次世代を担う若手研究者の挑戦を期待していることから、さきがけと CREST の中間的位置づけとなるミニ型 CREST を設置し、従来の通常型 CREST と並行して公募を行います。

ア 通常型 CREST

本領域が目標とする生命科学研究と AI 技術の融合とそれによる生命科学研究の革新を実現するために、情報科学・工学・生命科学の分野をカバーし、若手研究者が積極的に研究に参画できるようなチーム編成を推奨します。

イ ミニ型 CREST

各分野で卓越した若手研究者の挑戦を促すために、個人あるいは小グループによる 応募枠(以下ミニ CREST)も設置します。チーム規模に応じて、特定の技術課題の解 決を目指す研究も歓迎します。その場合も、本領域の趣旨に鑑み、データ駆動・AI 駆動を推進し、生命科学研究の革新を目指した技術開発提案を期待します。

(2) 研究成果の加速と進捗による見直し

- ア 研究費は年度ごとに見直しますので、研究の進捗状況に応じて増減があることを 予めご承知おきください。
- イ 優れた進捗を遂げている研究課題や領域に貢献する研究課題(技術提供やデータ解析等)に対しては、別途予算の追加措置を検討します。
- ウ 進捗状況や中間評価結果等に応じて研究体制や予算の見直し・組換え等を求めることがあります。研究体制の見直しに関しては、チーム内での体制見直しに留まらず、複数の研究チームに渡る組換えや外部からの研究者追加等を行う場合もあります。特に、ミニ CREST については、研究進展に応じて研究チームの融合などを行い、最終的には大きな成果をあげて頂くことを期待します。

(3) データや技術共有と領域内連携

- ア 本研究領域の参加者には、科学的知見(データ等)や技術、プロトコル等の領域内 共有を奨励します。そのため、領域内における積極的なデータ共有を進める場合は、 その活動を加速するための予算を追加で措置する場合があります。
- イ 研究成果を最大化するために、領域内におけるネットワークの形成を通じて、共同 研究等を推進します。そのため、領域会議におけるディスカッションに加えて、研 究総括やアドバイザーの助言の下、比較的少人数でのミーティングや勉強会なども 実施していきますので、積極的なご参加をお願いします。
- ウ 領域全体で効率的に研究費を使用する観点から、研究費で購入した大型機器等については、必要に応じて領域内の他の研究チームと共用することを求めます。

(4) 領域間連携

領域のみならず、戦略的創造研究推進事業としての成果を最大化するために、関連する CREST やさきがけの研究領域との連携を図り、必要に応じてワークショップやシンポジウム 等の開催を共同で行います。また、未来社会創造事業「共通基盤」領域「ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速」において生命科学実験の自動化に向けた取組が行われていることから、本領域との技術連携・研究交流等による効率的・効果的な研究推進を図ります。

(5) 国際連携等

本研究領域と関連性の高い国内外の研究機関や研究プロジェクトと連携し、技術やデータ等の連携・交流を実施します。これらの活動を通じて、日本発の技術の海外展開や若手人材の育成を進めます。また、各チームが海外と積極的に接点を持ち、国際プロジェクトと領

域の橋渡し役等となることも期待します。

3. 提案に関する留意事項

本領域への研究課題の提案に際しては、以下の点にご留意ください。

(1)対象について

本領域は生命現象の解明を目指した研究を対象とし、該当する研究であれば分野や扱う種別は問いません。基礎的な生命科学研究だけでなく、医療や産業などへの応用・社会実装を視野に入れた提案も歓迎します。また、上記の目標を達成するために必要となる、DX に資するデータ取得技術・解析技術の開発についても対象とします。研究のパラダイムシフトに繋がる技術の創出も本領域の評価の観点となりますが、あくまで生命現象の解明を目指すための手段とし、手段が目的化した提案とならないよう注意してください。また、従来型の生命科学研究でアプローチできる目標や単にビッグデータを取得するだけといった研究提案も望ましくありません。

ミニ CREST の場合は、自由な発想に基づく一点突破型の技術開発に特化した提案も歓迎します。ただし、本領域の趣旨を理解し、その技術が実現した場合、どのようにバイオ DX の実現に貢献できるのかという展望を明らかにしてください。

以上を前提に、独創的・革新的な研究提案が多く集まることを期待しています。

(2) チーム体制について

通常型 CREST では、提案内容の実現に向けて、研究分野や専門性、技術等の観点から、適切なチームを構成してください。特に生命科学・工学・情報科学分野の連携を推奨します。提案内容の達成に向けた必要十分なメンバーから成るチームづくりをしてください。研究代表者には、本領域の目標達成のために応募時点で欠けている要素を補うことが出来る分野横断・学際的なマインド、および自身の提案が新しい生命科学研究スタイルの一端をどのように担っていくのかという明確なビジョンを持っていることを期待します。研究代表者のリーダシップが十分に発揮され、チーム内での実効的なシナジーが期待できるかどうかも重視します。

また、AI・ビッグデータの活用を中心としたDXの研究を強力に推進するためには、今後中長期的に当該領域を先導できる研究人材が育成する必要があります。その点を踏まえ、実績のある研究者のみならず、若手研究者を中心とした構成のチームからの応募を奨励いたします。

ミニ CREST の場合は、提案内容の実現に向けて必要となる個人あるいは小グループというチーム構成を想定しているので、必ずしも生命科学・工学・情報科学の3分野をカバーする必要はありません。しかし、将来的に3分野の融合でどのように本領域の目標に貢献するのか、具体的なビジョンを持っていることを期待します。

(3)研究期間と研究費

研究期間は5年半以内とします。研究費(直接経費)は提案内容の達成に必要な額を申請することとし、上限は3億円とします。ミニ CREST は上限1.5億円とします。但し、チーム規模や提案内容に見合った予算計画となるようにご留意ください。また、総括による精査の結果、採択にあたっては研究費の調整を行う場合がございますので、予めご了承ください。研究開始3年程度経過後に中間評価を実施します。評価結果により、研究費の見直し、研究チームの再編を指示することがあります。

4. その他

- (1) CREST の社会的・経済的ニーズの実現を見据えたトップダウン型の研究開発プログラムという観点から、成果のインパクトや波及効果についても重視します。
- (2) 若手研究者、女性研究者による独創的かつ野心的な提案を歓迎します。
- (3) 生命科学、工学、情報科学の融合的な提案を推奨します。また、それ以外の分野との融合的な提案も歓迎します。
- (4) 先行研究や類似・競合技術に対する優位性を具体的に提示してください。
- (5) 本研究領域は文部科学省の人工知能/ビッグデータ/IoT/サイバーセキュリティ統合プロジェクト (AIP プロジェクト) を構成する「AIP ネットワークラボ」の 1 研究領域として、理化学研究所革新知能統合研究センターをはじめとした関係研究機関等と連携しつつ研究課題に取り組むなど、AIP プロジェクトの一体的な運営にも貢献していきます。
- (6) 本研究領域は健康・医療戦略本部下の医薬品開発協議会等からも対応が求められている健康・医療分野のデータサイエンティストの育成・受皿確保に向けた取組の一環として、チーム構成に際し、将来的に生命科学への応用を視野に入れたデータ駆動・AI 駆動研究の推進に貢献が期待できる研究者が研究代表者あるいは主たる共同研究者としてチームに参加することを要件とします。