

1. 実験自動化 AI ロボット

2023年度までの進捗状況

1. 概要

研究における仮説をもとに実験を着想した後に、その具体的な作業をサイバー空間で推定しつつフィジカル空間で実施する AI ロボットを開発します。

具体的には、(1)過去事例から実験を計画するための「論文の実験を理解する AI」、(2)実際に自動実験を進める「有機合成を行う AI ロボットの探究」、(3)その結果から仮説を検証する「実験予想と結果の XOR 発見 AI」の研究開発を行います。

2. これまでの主な成果

このプロジェクトでは科学技術文献を通じて人間の研究を理解する AI の実現を最初のマイルストーンに置いています。

実験自動化 AI ロボットとしては、まず既存の論文を研究者が追試する時の様に関連事例の論文から実験を計画し、その具体的な実験パラメータを推定して実行することが必要です。ただし論文等の文献には実験の大まかな設定が書かれているにとどまることが多いので、このプロジェクトでは、実際に実験するために別のトピックの文献などからも知識を収集したうえで推論を試みました。

また、実験結果のグラフから結果を考察して仮説の検証を進めることが必要となります。そこでこのプロジェクトでは、論文の実験結果図に対して考察を与えるような AI モデルを開発しています。

(1)論文の実験を理解する AI

実験内容の理解と比較のために、論文の表に記載されているタスク、データ、手法などの情報を抽出し、構造化する「表の意味解析」に取り組みました。表のテキストに関連する情報を大規模言語モデル(LLM)に入力し、合成文脈と呼ばれる補助的な説明文を生成しました。この合成文脈を機械学習モデル

の特徴量として利用することで、エンティティリンク精度が従来手法より 5 ポイント以上向上しました。また、引用文献のテキストも利用することで、論文自身に記述されていない補助知識を補完し、リンク精度の向上に寄与しました。

また、材料科学文献を対象とした材料の合成手順をデータとして収集・アノテーションし、BERT に基づいた初期モデルが合成手順を推定可能であることを確認しました。

(2)有機合成を行う AI ロボットの探究

化合物を表現するために、分子の合成経路をエッジ、分子をノードとするネットワーク型データベース(Molecular Reaction Graph)を構築するとともに、“Chemputer”を簡易化した京大式自動合成装置を製作しました(図1)。実験手順の自動入力を目指し、ChatGPT を用いて実験手順文をマーメイド記法に変換し、自動生成プログラムの実現に近づきました。また実際に 0.3mol のエステル化・アセタール化・アミド化実験を成功させました。今後は劇物・毒物を使った実験の後処理や洗浄の問題に取り組む予定です。



図1 データベース(左)と京大式自動合成装置(右)

(3)実験予想と結果の XOR 発見 AI

まず、論文の図を理解し、説明できる AI を構築し、研究者の知見を組み込んだ信頼性の高い AI を開発しました。既存モデルでは詳細な説明が難しかったため、研究者が強調したい領域をモデルに入力する方法を検討しました。Self-Attention 機構の Attention Weight を操作し、強調領域を詳細に説明するキャプ

ションを生成しました。実験では、強調領域に関連する単語を含むキャプションが生成されることを確認しました(図2)。

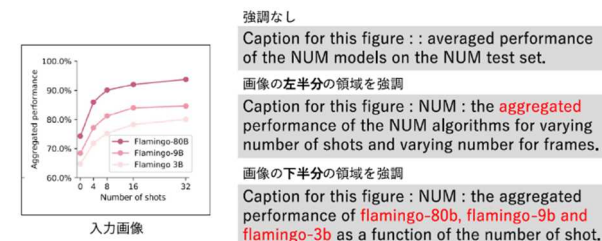


図2 グラフ図と強調領域を与えた場合の生成文

3. 今後の展開

2025年度までのマイルストーンとしては、研究の理解を継続するのみならず、仮説生成の実現が掲げられております。そのためにはフィジカル空間での実験が非常に重要になり、ここがボトルネックとならないように研究の加速が必要となります。

具体的にはまず、自動合成手段を拡充させることで、対象となる物質の探索空間を拡大します。フロー合成やメカノケミカル合成など、多様な合成手段を同時に探究します。

また、候補物質を提案する初期の仮説に対して、より合成しやすいもの・より反応が期待できるものにアップデートしながらの合成実行を取り入れることを計画しており、ここではシミュレーションも活用しながらの仮説更新を検討しております。

最後に、そうした候補物質の合成のためには、どのような順番でどのような材料を合成したらよいかという合成経路推定や、どういった温度で合成したらよいかなどの合成条件推定が必要となります。

このように、このプロジェクトでは実験自動化 AI ロボットを今後も高度化することで、研究ループの高スループット化を目指します。

研究開発項目

2. 主張&解析 AI

2023年度までの進捗状況

1. 概要

この研究プロジェクトでは、研究におけるループを主張→実験→解析→記述&対話→主張…というループでモデル化しています。その中でも仮説の生成と検証を含む主張と解析のステップでは、マルチモーダルな科学データを理解し、言語などの根拠を伴って回答するような AI が必要となります。

そこで主張&解析 AI として「マルチモーダル XAI 基盤モデル」に取り組み、論文単体に記述されている主張や解析に相当するパートの関係性の理解や複数論文における要約や類似性の理解を実現する AI を開発します。

2. これまでの主な成果

本研究開発項目で開発するマルチモーダル XAI 基盤モデルの端緒として、論文を相互理解するマルチモーダル XAI の初期開発を進めています。プロジェクトとしての 2023 年度のマイルストーンである「AI ロボットが、文献を用いた知識探求を通じて既存論文に記載されている研究を相互理解できる」状態を目指して、その大元となる基盤モデルを論文の図表とテキストを合わせたマルチモーダルデータから学習するためのパイプラインを構築しました。

プロジェクト全体の 2023 マイルストーンである「論文の内部的な一貫性理解についての検証」、「論文間の相互理解についての検証」、「論文間の相互的な理解を含めたサーベイ生成についての検証」および「論文間の類似性理解についての検証」を実施しました。これらの検証は基盤モデルの後続タスクとして、ファインチューニングを経て行われました。

マルチモーダル XAI 基盤モデル

この研究では、マイルストーンの評価項目に基づき、技術目

標の達成に取り組みました。論文理解に関連するデータセットを手作業で作成するコストを削減するため、一般的なデータと論文の知識を利用するフレームワークを構築しました。生成 AI による仮説生成や法則性の発見に関する研究も実施しました。

論文の一貫性理解では、図 1 に示すように、BERT や GPT-4 を用いて論文の主張と実験結果の一貫性を検出し、説明するモデルを構築しました。これにより、論文の事前学習データセットを用いた一貫性検出の精度が向上しました。ユーザースタディでは、研究者による評価で高い満足度を得ました。

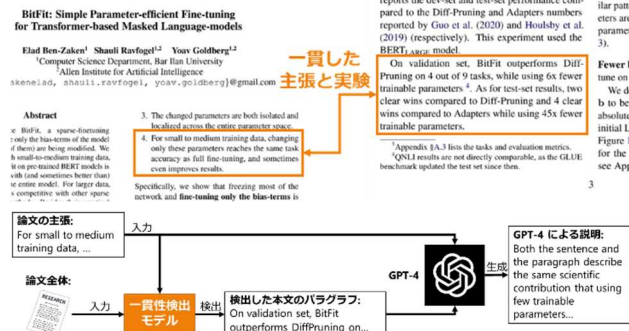


図1 論文の一貫性の例(上)と提案パイプライン(下)

論文間の相互理解では、論文の類似性を学習し、新しい論文間の類似部分を推定するモデルを開発しました。情報分野と化学分野で高い精度の類似性評価結果を得ました。

さらに、論文間の相互理解を含めたサーベイ生成を自動化しました。図 2 に示すようなパイプラインに基づいて、指定されたトピックに基づき、リトリバルモデルを用いて関連論文を選定し、図表を含むサーベイを作成しました。ユーザースタディでは、研究者から高い評価を得ました。

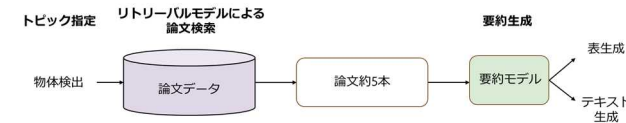


図2 指定されたトピックに基づいた複数論文要約生成

最後に、論文間の類似性理解では、類似する論文ペアを作成し、その類似性を説明するテキストを自動生成しました。これもユーザースタディで高い評価を受けました。

3. 今後の展開

引き続き文献からの研究理解を進めるとともに、仮説生成の実現を目指します。科学技術論文の知識を大規模言語モデルやマルチモーダル基盤モデルを使って連続的な空間に埋め込み、その空間内で知識の探索と推論を行い、新規性と妥当性のバランスを考慮した科学的仮説を生成します。

科学技術知識はニッチで誤情報生成(ハルシネーション)が生じやすいため、創造性を維持しつつ誤情報を抑制するリトリバル拡張や段階的推論が必要です。また、説明性を持つ XAI をマルチモーダルな論文理解モデル上にも実現することも重要です。

さらに、AI が科学技術の分野で新しい知識や仮説を作り出し、それを人間の研究者が利用できるようにするための基盤モデルの研究と開発が目標です。マルチモーダルな入出力と説明性を持つ AI を用いて研究の相互関係理解を実現し、他の研究開発課題と連携してマルチモーダルな仮説生成を実現します。

研究開発項目

3. 記述 & 対話 AI

2023年度までの進捗状況

1. 概要

研究者も普段は実験結果をまとめて他の研究者と議論し、さらなる仮説を立てて次の実験に入っていきます。このように結果を記述し、対話的に議論することで仮説をアップデートできるような AI が必要となります。

このプロジェクトでは、(1)仮説として実験をデザインする「Scientist-in-the-loop による論理解・実験計画 AI」と(2)対話的に仮説を立てていく「知識推論と対話を用いたマルチモーダル仮説生成」の研究開発を進め、上記のような記述 & 対話 AI を実現します。

2. これまでの主な成果

論文中の図表と文から実験内容を理解するマルチモーダル XAI の開発を目指し、研究者の経験を反映させる技術を導入しました。研究者のフィードバックを活用し、大規模データセットなしで LLM の性能を向上させ、専門性に応じたタスク割り当てとプロンプト信頼性を高める技術を開発しました。

さらに、マルチモーダル仮説生成の基盤として大規模言語モデルを用いた論理解と仮説生成モデルの構築に取り組みました。

(1)論理解・実験計画 AI

まず、マルチモーダル XAI の実現に向けて、LLM に研究者の暗黙知を反映させる技術を開発しました。研究者の具体的な出力例を使い、プロンプトを通じて知識を取り入れる In-context learning を活用し、関連記述の抽出とその根拠の出力を行う技術を開発しました。これにより、大規模データセットを必要とせずに LLM の性能向上を実現しました。

次に、研究者の知識理解 AI を開発し、専門性に応じたフィードバックタスクの最適な割り当てとプロンプトの信頼性を推定

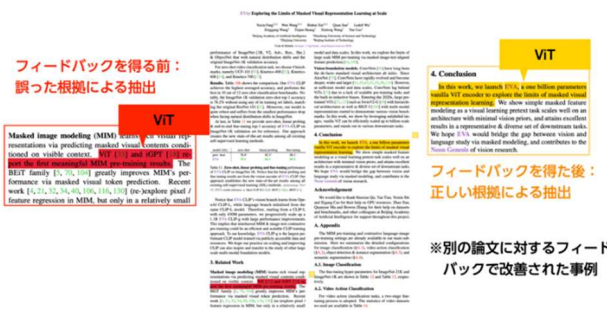


図1 研究者からの知識理解 AI

する技術を開発しました。これにより、複数の研究者が協力して LLM のプロンプトを設計する際に、質の高い出力を得ることができました(図1)。

さらに、研究者からの知識獲得 AI と知識理解 AI による実験内容理解に取り組みました。物体検知技術に関する論文を対象に、タグの抽出と検証を行い、LLM を単純に利用する場合と比べて精度が向上しました。研究者の知見を取り入れることで、実験内容の理解が効率化されることを確認しました(図2)。



図2 実験内容理解に基づいたタグ抽出と関連文献の提示

最後に、分子合成 AI への研究者の知見を埋め込むためのインターフェースとして、分子編集のウェブアプリを開発しました。RLHF 技術を利用し、研究者が基盤モデルの出力を評価するだけでなく、改善案を提案することで、研究者の思考をモデルに反映させることができるようになりました。

(2)マルチモーダル仮説生成

この研究では、知識推論と対話を用いたマルチモーダル仮説生成の課題に取り組みました。まず、大規模言語モデルを用いた論理解枠組みの構築に注力し、特許庁から取得した論文データベースを用いて、既存の open-calm と T5 モデルをベースに調整しました。目的関数には一般的なマスクランゲージモデルを使用しました。ファインチューニングされたモデルにプロンプトを与え、仮説生成を行いました。特許データから因果関係に関わる 10 万件の仮説生成データを作成しました。

仮説生成に必要なデータ整備も行い、言語学に精通したアナデータを雇用して、特許データ 10,000 件に対してアノテーション標準を構築し、選択した特許に 300 以上のアノテーションを行いました。

知識推論モデルの構築では、因果関係に焦点を当て、生成した仮説データと外部の因果関係辞書を用いて妥当な仮説を選別する方法を検討しました。仮説について研究者と対話する AI の構築に向けて、強化学習を用いた AI 発話修正方法(RL-AIF)の検討を行いました。今後、この手法の評価を行う予定です。

3. 今後の展開

引き続き研究者の対話から研究者のフィードバックを通じて AI の性能を向上させる共進化型人工知能技術を開発し、仮説生成にむけた研究者のインスピレーションの AI への埋め込みを目指します。仮説インスピレーション AI が知識を獲得・推論し、人間と協調して対話を行うことで、革新的な発見とイノベーションを引き起こします。