



## 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

# 実施状況報告書

## 2022年度版

---

人と融和して知の創造・越境をする

AI ロボット

---

**牛久 祥孝**

オムロンサイニクエクス株式会社



## 研究開発プロジェクト概要

イノベーションにおいて、持続的な性能向上には演繹的思考が、パラダイムの破壊には帰納的思考と創発による知の創造や、分野を回遊する知の越境が必要です。本研究では 2030 年までに、研究者の思考を論文から理解する AI を構築した後、人と対話しながら主張→実験→解析→記述のループを回して研究できる AI ロボットを実現します。2050 年には研究者と AI が融和し、ノーベル賞級の研究成果を生み出す世界を目指します。

[https://www.jst.go.jp/moonshot/program/goal3/36\\_ushiku.html](https://www.jst.go.jp/moonshot/program/goal3/36_ushiku.html)

## 課題推進者一覧

課題推進者	所属	役職
進藤 裕之	奈良先端科学技術大学院大学 データ駆動型サイエンス創造センター	特任准教授
松原 誠二郎	京都大学 大学院工学研究科	教授
藤吉 弘亘	中部大学 工学部	教授
牛久 祥孝	オムロンサイニクエックス株式会社	リサーチアドミニストレイティブディビジョン プリンシパルインベスティゲーター
馬場 雪乃	東京大学 大学院総合文化研究科	准教授
吉野 幸一郎	理化学研究所 情報統合本部	チームリーダー

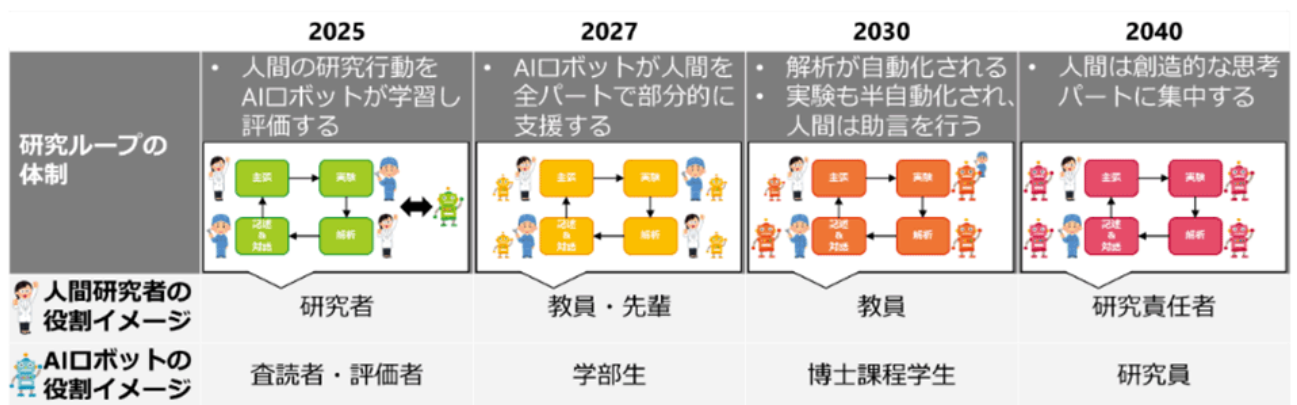
# 1. 当該年度における研究開発プロジェクトの実施概要

## (1) 研究開発プロジェクトの概要

イノベーションにおいて、持続的な性能向上には演繹的思考が、パラダイムの破壊には帰納的思考と創発による知の創造や、分野を回遊する知の越境が必要です。本研究では 2030 年までに、研究者の思考を論文から理解する AI を構築した後、人と対話しながら主張→実験→解析→記述のループを回して研究できる AI ロボットを実現します。2050 年には研究者と AI が融和し、ノーベル賞級の研究成果を生み出す世界を目指します。

2030 年までのマイルストーン:各分野の研究者の指示に基づいて AI ロボットがイノベーションを起こし、その成果としてまとめた論文がアクセプトされる。

2025 年までのマイルストーン:AI ロボットが、自身で研究を再現・説明できるくらいのレベルで研究者の行う研究を理解できる。



## (2) 研究開発プロジェクトの実施状況

今年度はステージゲートに向けてマルチモーダル XAI による論文の相互理解を実現するグループと、同 XAI をサイバー・フィジカル共進化に活用する別グループの 2 グループ体制で研究を進めた。

マルチモーダル XAI による論文の相互関係理解グループでは、別グループの吉野 PI とも連動して基盤モデルとなるマルチモーダル XAI モデルの構築を進めるとともに、牛久 PI が論文のエンコード表現、進藤 PI が実験条件推定、藤吉 PI が図表理解に着手した。

サイバー・フィジカル共進化 AI グループでは、別グループの進藤 PI とも連動して、実験条件の推定を馬場 PI が Scientist-in-the-loop な機械学習で更に精緻化するためのデータ整備を進めるとともに、松原 PI の物質自動合成装置に対するプログラム自動生成に向けたアノテーションの検討を進めた。更に、吉野 PI は全体計画を先取りして仮説生成への着手を開始した。

## 1. マルチモーダルXAIによる論文の相互関係理解グループ

文献情報による基盤モデルで研究の知識を探求し、UAIへの端緒を構築

- 牛久 祥孝 (OSX・PI)
- 進藤 裕之 (NAIST・准教授)
- 藤吉 弘巨 (中部大学・教授)
- 山下 隆義 (中部大学・教授)



## 2. サイバー・フィジカル共進化AIグループ

研究者とのインタラクションAIによる知識探求

- 馬場 雪乃 (東京大学・准教授)
- 吉野 幸一郎 (理化学研究所・TL)



フィジカル空間との融合AIによる知識探求

- 松原 誠二郎 (京都大学・教授)



### (3) プロジェクトマネジメントの実施状況

PM 機関を拡充するとともに、ステージゲートに向けて緊密なコミュニケーション体制を構築した。同時に、プロジェクトマネジメントとして WBS とガントチャートの作成を開始した。

広報としては Web ページ構築を進めるとともに、JST ムーンショット型研究開発事業と JST 未来社会創造事業の中で AI ロボット駆動科学に関する 4 プロジェクト合同で AI ロボット駆動科学シンポジウムを開催することで合意し、将来的には団体として AI ロボット駆動科学イニシアティブを設立することを企図して、準備事務局をオムロンサイニックエックス株式会社内に設置した。

## 2. 当該年度の研究開発プロジェクトの実施内容

### (1) 研究開発項目1:実験自動化 AI ロボット

#### 研究開発課題1:論文の実験を理解する AI

##### 当該年度実施内容:

情報系論文の実験で用いられるデータ、モデル、手法について理解する AI を実現するため、Papers with Code に基づくデータセットの構築、既存研究の調査、およびモデルの検討を行った。

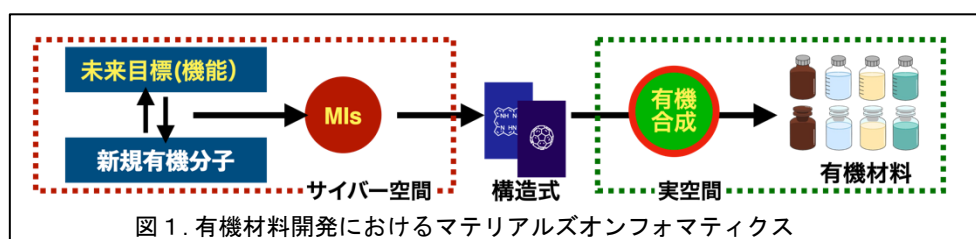
従来の取り組みでは、事前に定義された知識エンティティが与えられたという前提で、論文と知識エンティティとの関係性を推定しているが、例えば、新たなデータセットを提案した論文は、知識ベースと関連付けることができない。そこで、論文を新たな知識エンティティとして追加し、知識ベースを拡張することのできるモデルを検討する必要があると考え、Papers with Code から論文と論文との関係性(ex. 論文 A は論文 B をデータセットとして用いている)に関するデータセットを構築した。

**課題推進者:**進藤 裕之(奈良先端科学技術大学院大学)

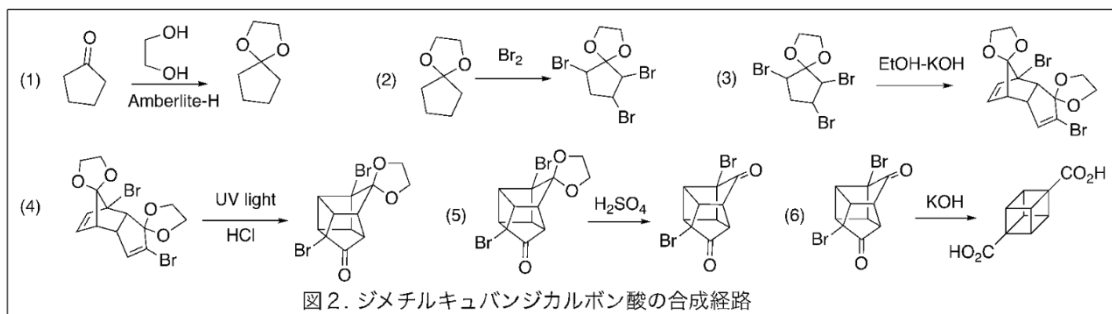
#### 研究開発課題2:有機合成を行う AI ロボットの探究

##### 当該年度実施内容:

今年度においては、課題推進者が構築している自動合成ロボット(図1)による有機合成の実証を行う。



令和4年度の達成目標は、図1に示す自動装置で、図2に示す反応経路により6反応7段階回(反応(4)は、2段階反応)からなるジメチルキュバンジカルボン酸を、反応(4)以外で自動合成することである。反応(1)の実施は、問題なく達成できた。反応(2)に関しては自動合成は行えたものの、大量の臭素の移動において機器のチューブ類の損傷が激しく、大きな課題となった。反応(3)に関しては、大量の塩(KBr)の生成が、攪拌の困難酸を引き起こした。大量スケールは、難しいことがわかった。反応(5)は、濃硫酸が反応容器に存在し、そのクエンチが危険を伴う可能性が懸念事項として残った。反応(6)は自動合成装置で実行できた。このように、非常に単純な有機合成反応でも課題が多く出てきた。反省点として、大量スケール(0.5 mol)を試みたのは、最初の自動合成のトライアルとしては、無理が生じたようにも思える。



課題推進者: 松原 誠二郎 (京都大学)

### 研究開発課題 3: 実験予想と結果の XOR 発見 AI

当該年度実施内容:

論文の図を理解し判断根拠を図で説明できる AI の構築として、Computer Vision, Machine Learning 関連の国際会議論文(CVPR, ICCV, NeurIPS)を約 5 万サンプルを収集し、収集した PDF から図とキャプションのセットからなる約 16 万個からなるデータセットを構築した。

課題推進者: 藤吉 弘亘 (中部大学)

### (2) 研究開発項目 2: (主張&解析 AI)

#### 研究開発課題 5: マルチモーダル XAI 基盤モデル

当該年度実施内容:

マルチモーダル論文理解 XAI の実現に向けて、論文の相互理解をダウンストリームタスクとするような基盤モデルとして、自己教師あり学習によって論文中の図や表、テキストからなるマルチモーダルデータから、Transformer に類するネットワークアーキテクチャのパラメータを学習する初期検討を実施した。また、自己教師あり学習の中でモデルが有すべき説明性についても検討を行い、他のデータ例による説明、パラメータによる説明、入力データへの注意の度合いによる説明、テキストによる説明などを比較した。

課題推進者: 牛久 祥孝 (オムロン サイニックス株式会社)

### (3) 研究開発項目 3: (記述&対話 AI)

#### 研究開発課題 8: Scientist-in-the-loop による論文理解・実験計画 AI

当該年度実施内容:

サイバー系の実験内容理解のベンチマークを設計するために、Papers with Code から物体検出に関する論文を収集した。arXiv に掲載されている論文に対する、アノテーションフレームワークを設計した。論文から、ハイパーパラメータや計算機環境、計算量に関する情報を抽出して、データセットを構築した。

**課題推進者:**馬場雪乃(東京大学)

**研究開発課題 9:**知識推論と対話を用いたマルチモーダル仮説生成

**当該年度実施内容:**

仮説生成を行うためには AI ロボットが既存の研究で行われている内容、その背景知識、そこから得られる一般的な知識構造を抽出・理解できるようになることが必要である。このため、近年盛んに研究が行われている大規模言語モデルを利用することで、対象となる研究ドメインでの背景知識を抽出するための検討を行った。

論文理解の目標と連携し、ドメイン論文データとして Paper with Code の内容を利用すべく整備を進めた。また、大規模言語モデルとして vicuna13b (llama-13b) の利用整備をはじめた。

**課題推進者:**吉野 幸一郎(理化学研究所)

### 3. 当該年度のプロジェクトマネジメント実施内容

#### (1) 研究開発プロジェクトのガバナンス

##### 進捗状況の把握

PM 機関内に PM 補佐複数名とアシスタント、広報担当を配置した。知財や法務については、PM 機関であるオムロンサイニクエックス株式会社の親会社であるオムロン株式会社に業務をアウトソーシングした。

柔軟かつ緊密なコミュニケーションを実現するために、課題推進者および参加者と Slack 等のオンラインコミュニケーションサービスを用いて情報共有を進める体制を構築した。会議としてはまず、オンラインでの会議を毎週で実施し始めた。来年度からはオンサイトでも半年ごとにキックオフを含めた全体会議とサイトビジットを実施する計画であり、報告書作成時点ではキックオフを実施済みである。

原田 PJ とは、ロボットを主に担当する原田 PJ に対して AI を主に担当する本研究開発 PJ と緊密に連携する。具体的には、形式知(材料、配合、手順)のなかで材料のみを扱う原田 PJ に対して配合・手順からなる実験計画推定 AI を開発するとともに、原田 PJ の有澤先生とフィジカル AI グループの連携においては、発見された仮説に基づくステイミュラント物質をフィジカル AI グループと自動合成する。また原田 PJ と牛久 PJ で「サイエンス AI 研究会」を設立する予定であり、他の AI 研究者との連携も含めて AI サイエнтиストの研究を牽引することを目指す。

また、ステージゲートに向けた目標は複数の課題推進者による共同作業を必要とするものが多いので、作業分解構造図 (WBS) を PM 機関内で作成し、ガントチャートとともにマネジメント時の情報としての整備を開始した。

##### 研究開発プロジェクトの展開

本研究開発プロジェクトで実現を目指す AI サイエнтиストは、実際に科学研究の現場での実証研究を進めながら基礎研究も両輪で進めるような体制が必要である。したがって、連携体制とリスクマネジメントが極めて重要となる。研究プロジェクト間での意見交換を週例で緊密に実施し、全体の進捗を常に把握する体制を初年度から構築した。併せて、課題推進者への一方的なマイクロマネジメントを引き起こして創造性を潰してしまわないように、slack を活用して開かれた議論の維持に努めた。

#### (2) 研究成果の展開

PM 機関内で技術動向調査や市場調査を実施し、研究の加速・自律化の各種技術を社会に還元するベンチャー企業等の設立を検討した。

本研究開発プロジェクトでは、既に Cambridge 大や Stanford 大と意見交換を開始しており、引き続き連携の可能性を探っている。

#### (3) 広報、アウトリーチ

Web サイトの構築を進めた。(なお、2023 年 5 月現在は <https://harmonious-ai-scientist.com/>にて公開済み。) 今後は更に SNS アカウントを設けて積極的な情報発信を進め、

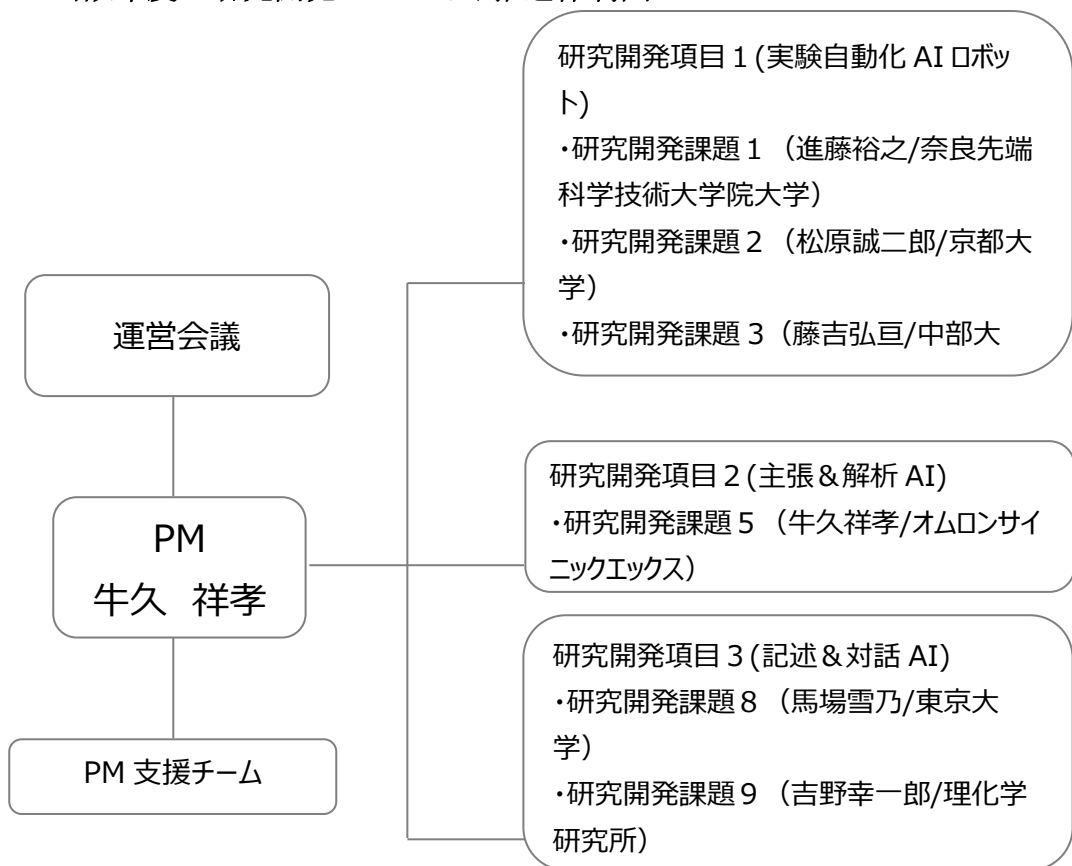


AAAI や IJCAI、ICML や ICLR ならびに NeurIPS など、AI 分野や科学分野の学会での周知を検討する。更に、プロジェクト自体でも JST ムーンショット型研究開発事業の原田 PJ や JST 未来社会創造事業の高橋課題・長藤課題と連携して AI ロボット駆動科学のシンポジウム開催を議論し、2023 年度 7 月開催で合意した。

(4) データマネジメントに関する取り組み

PM 機関が中心となってデータマネジメントの方針を具体化し、課題推進者およびその機関との合意を得ながらデータ管理を開始した。実験データおよび計算データ/モジュールのレベル 1 公開に向けて、プロジェクト内でデータを共有するためのファイルサーバを導入した。

4. 当該年度の研究開発プロジェクト推進体制図



運営会議 実施内容

- 本研究開発プロジェクトでは、オンラインを主体とした毎週の会議によって進捗を共有するとともに、PM 機関としても週例のプロジェクトマネジメント会議を開催している。
- 併せて、オンサイトでの全体会議・サイトビジットおよび、他の PJ との共同イベント開催に向けた準備を会議体として進める。
- 本年度は知財運用会議を別会議体として設置しないが、来年度以降に別会議体として発足することを目指した体制の議論を運営会議内で実施する。

## 5. 当該年度の成果データ集計

知的財産権件数				
	特許		その他産業財産権	
	国内	国際(PCT含む)	国内	国際
未登録件数	0	0	0	0
登録件数	0	0	0	0
合計(出願件数)	0	0	0	0

会議発表数			
	国内	国際	総数
招待講演	0	0	0
口頭発表	0	0	0
ポスター発表	0	0	0
合計	0	0	0

原著論文数(※proceedingsを含む)			
	国内	国際	総数
件数	0	2	2
(うち、査読有)	0	2	2

その他著作物数(総説、書籍など)			
	国内	国際	総数
総説	0	0	0
書籍	0	0	0
その他	0	0	0
合計	0	0	0

受賞件数		
国内	国際	総数
0	0	0

プレスリリース件数
0

報道件数
0

ワークショップ等、アウトリーチ件数
0