



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

2023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



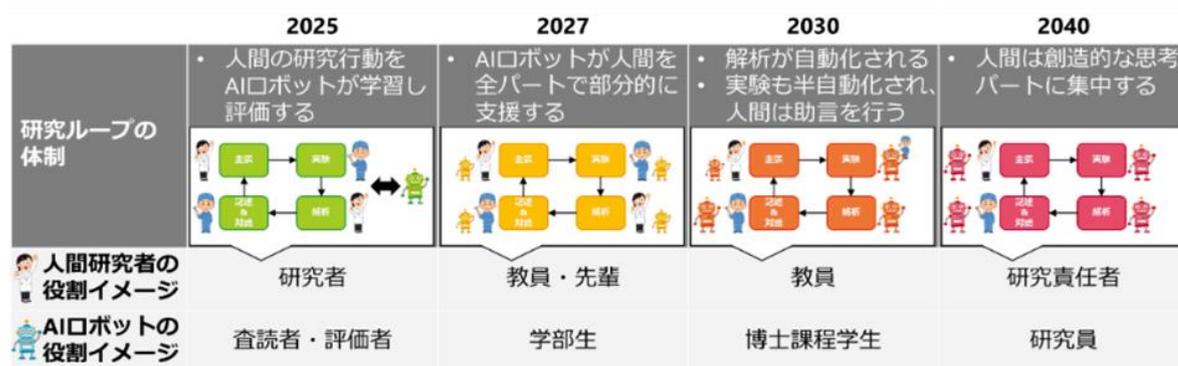
1. 当該年度における研究開発プロジェクトの実施概要

(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となる。本研究開発プロジェクトでは 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 ロボットを実現する。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。併せて、新規の仮説を生成できる。



(2) 研究開発プロジェクトの実施状況

当該年度では、Feasibility Study に向けて前年度に整理を進めた基盤技術を活用し、実際に論文理解のための Co-UAI を実証した。原田 PM が研究開発する、サイエンス開拓のために人と創造的共進化する AI ロボットの強化と加速を目的として、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 AI を試行した。対象ディシプリンを情報とバイオスティミュラント物質、およびその間を繋ぐマテリアルズインフォマティクスに絞り、研究開発項目 1~3 で以下の取り組みを行った。

- マルチモーダル XAI による論文の相互関係理解
 - 文献情報による基盤モデルで研究の知識を探求し、理解させる AI (UAI) への端緒を構築(研究開発項目 2)
- サイバー・フィジカル共進化 AI
 - 研究者とのインタラクションによる Co-UAI の PoC を用いた知識探求(研究開発項目 3)
 - ※ マルチモーダル XAI による論文の相互関係理解(研究開発項目 2)の課題推進者も参画
 - フィジカル空間との融合 AI による知識探求(研究開発項目 1)

※ 研究者とのインタラクション AI を取り入れた Co-UAI の PoC を活用

研究開発項目1(実験自動化 AI ロボット)では、①論文から実験内容を理解するデータベースの構築と②フィジカル空間での自動実験、③実験結果の説明性を有した理解の技術検証を達成して、来年度にフィジカル空間での知識探求を本格的に遂行する。

研究開発項目2(主張&解析 AI)では、研究開発項目3と協働して作成するマルチモーダル論文理解 Co-UAI モデルの PoC の基盤モデルを学習する。

研究開発項目3(記述&対話 AI)では、研究開発項目2が用意した基盤モデルに対して論文の相互関係理解を試行できる後続モデルを学習し、実際に評価を進める。

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 補佐、アシスタント、広報担当で構成された PM 機関を昨年度組成し、Feasibility Study に向けた研究開発を支援した。知財や法務に関しては、親会社のオムロン株式会社にアウトソーシングした。また、オンラインで週例のプロジェクト全体会議を実施した他、マイルストーンの評価項目ごとのミーティングも実施した。原田 PJ とも連携を進め、AI を使った実験計画推定や物質の自動合成を進めた。

AI サイエнтиストの実現を目指し、プロジェクト内の意見交換と進捗管理を重視しながら実証研究と基礎研究を並行して推進した。社会実装やスピンアウトの検討も、技術動向と市場調査と並行で継続している。

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: 本研究では、論文に含まれるテキストから、実験手順や実験結果を理解し、それらを知識として構造化し、複数の論文から得られる知識を比較して関係性を理解することにより、新たな仮説および実験計画を生成する AI の実現を目指している。本年度は、実験結果の多くが論文の表として記述されることに着目し、表の構造化および意味解析に取り組んだ。表の構造化・意味解析とは、論文から表を同定し、表に含まれる文字や構造を推定し、表に含まれるテキストが何を表しているのか(データセット名、手法名、評価指標など)というエンティティを同定することである。ここまで実現できれば、表で記述されている実験結果について AI が理解することが可能となる。

表の同定および構造化を行う機械学習モデルと、構造化された表の意味解析を行うモデルをそれぞれ構築し、実験結果を理解する AI を実現した。また、上記のモデル構築に必要なデータセットを収集・整備し、定量的な評価が行える環境を整えた。

(1) 実験内容の理解と比較

AI が情報系論文の実験内容を理解し、タスク、データ、手法などを形式化された知識として生成し、複数の論文を比較して実験内容の違いを評価できるようにする取り組みを行った。表の意味解析を通じて情報を抽出し、構造化するモデルを構築し、既存手法より精度を向上させた。合成文脈を追加することで、エンティティリンキングの性能が向上し、幅広い文脈理解が必要な表の意味解析にも対応した。

(2) 実験手順の理解と比較

AI が論文の実験手順を理解し、形式的な構造として表現するためのテンプレート作成とデータ収集を行った。材料科学文献を対象に合成手順をカテゴリ分けし、関係を形式的に表現したテンプレートを構築した。BERT に基づく AI モデルを学習し、合成手順を推定可能とし、今後はデータセット拡大やモデル改善を進める。

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: 有機合成技術は極めて古い時代からその進化が検討され続けてきたが、その合成目標となる分子の選定に関して、近年ビッグデータを利用するサイバー空間での作業、すなわち機械学習的手法が近年急に注目されるようになった。本手法は、データ駆動に基づく機械学

習を利用するマテリアルズインフォマティクスが提案する候補分子群を実際に合成し、実分子として物性データを測定し新たなデータとし、再度機械学習を行い最終目的分子の構造に収斂させていく図式であるが、このサイバー空間の作業と実空間の合成作業は、二空間の作業進捗が全く異なり、有機合成での対応が全くできていないのが現状である。この解決策として考えられるのが、実空間技術である「有機合成」の自動化であり、言い換えるとデジタル化である。本研究開発においては、実験者の経験や技術が合成個々の「出来」に直接反映するアナログ技術の要素の強い有機合成を、自動化を軸に「デジタル技術」とし、有機材料開発・ものづくりの基幹技術としての手法として確立することを目的としている。このような背景の元に後述する研究を実施したが、実空間の有機合成を自動化するというデジタル化するだけで、本当にこの手法が実現するのか、疑問を持つに至った。その結果、分子の表現法を単に記述子を用いるだけでなく、データ群として処理できるような基幹整備も重要な課題であることがわかってきた。

このような状況で、次の4項目に関する研究を展開してきた。①新しい分子表現を指向するネットワーク型データベースの開発と構築、②自動合成装置の開発、③自動合成装置運転プログラムの自動生成、④新しい分子表現によるマテリアルズインフォマティクスの試み、である。

① ネットワーク型データベースの開発と構築:

化合物の分子表現の再考を進めるために、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) を構築した。これは、合成化学者が分子を合成経路として捉える視点を反映しており、実験ノートレベルでの使い方を目指している。

② 自動合成装置の開発:

Cronin の“Chemputor”を簡易化し、視覚的にプログラム可能な京大式自動合成装置を開発した。エステル化、アセタール化、アミド化実験が可能であるが、劇物・毒物の使用には未対応で、後処理や洗浄の課題を抱えている。

③ 自動合成装置運転プログラムの自動生成:

実験手順の自動入力を目指し、Supporting Information (SI) をマーマイド記法に変換し、デバイスプログラムへ変換する機械学習を進藤 PI および馬場 PI との連携の元で進めている。しかし、特定の実験手順がない場合の対応は未解決であり、類似手順の自動検索も今後の課

題である。

④ 新しい分子表現によるマテリアルズインフォマティクスの試み:

分子構造をスカラー量に変換する従来の方法に疑問を持ち、分子を合成経路の一状態として表す新しい手法を導入した。SYNTHIA™で逆合成解析し、原料の組み合わせをBERTで数値化する試みを進めており、今後の検討課題としている。

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: 本研究開発課題では、実験計画時に予想される結果と実際に得られた結果の XOR を発見して研究者に理解できるように報告し、新たな仮説(主張)の素を創出する AI についての研究を行う。これを実現するために、既存論文を視覚的に読み解く論文理解 AI と実験データから予想する AI を構築し、その両者の結果の XOR を発見することを試みる。研究開発計画は、以下の3課題に分割して推進する。

- (1) 論文の図を理解し判断根拠を図で説明できる AI の構築
- (2) 研究者の知見を組み込んだ信頼性の高い AI の構築
- (3) 実験データの推論及び XOR の発見 AI の構築と検証

本年度は、(1)論文の図を理解し判断根拠を図で説明できる AI の構築、(2)研究者の知見を組み込んだ信頼性の高い AI の構築に取り組んだ。

(1) 論文の図を理解し判断根拠を図で説明できる AI の構築

視覚言語推論を行う MatCha モデルをファインチューニングし、グラフ図のキャプション生成モデルを構築した。画像エンコーダを凍結し、言語デコーダのみをチューニングすることで、精度の向上を確認した。さらに、注目領域の可視化を実現し、AI がキャプション生成時に着目している領域を示すことが可能となった。

(2) 研究者の知見を組み込んだ信頼性の高い AI の構築

研究者が詳細に説明してほしい領域を強調領域としてモデルに入力し、その領域を強調したキャプション生成を行う方法を検討した。Attention Weight を操作することで、強調領域に含まれる単語をキャプションに反映する精度を向上させた。実験では、強調領域を入力することで生成文にその領域の単語をより多く含むことを確認した。

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4:主張・解析のマルチモーダル理解

本年度は研究開発課題4を実施しない。

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: 本研究開発課題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 の初期開発を実施した。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た。後述するように、全体の 2023 マイルストーンである(ア)論文の内部的な一貫性理解についての検証、(イ)論文間の相互理解についての検証、(ウ)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(オ)論文間の類似性理解についての検証のための後続タスクのファインチューニングに利用し、実際の論文理解性能を評価した。またそれ以外の実施内容として基盤モデルのモダリティ増強を行い、仮説生成 AI の Nature Communications Materials 掲載、自動実験 AI の ICRA 2024 発表、法則性発見 AI の NeurIPS 2023 Workshop 口頭発表に至った。

(ア)論文の内部的な一貫性理解

論文の一貫性とは、前半で主張された事項が後半で実験等を通じて示されているかどうかを指す。一貫性検出モデルによる LLM (GPT-4)の制御を提案し、論文の主張と全文を入力して検出した本文のパラグラフを GPT-4 で評価することで、一貫性を説明する。この手法により、論文の事前学習を通じて一貫性検出精度が向上し、ゼロショット検出性能も評価した。ユーザースタディでは、情報・化学分野の計 22 論文を対象に評価を行い、平均値 3.57(目標値 3)を達成した。

(イ)論文間の相互理解についての検証

複数の観点から実施し、馬場 PI は論文全体を対象に抽象的な類似性を扱い、牛久 PI は論文の一部(アブストラクト)を対象に具体的な類似性を扱った。我々は言語モデルに対する類似度の追加学習を行い、新規の論文間で類似部分を推定した。評価結果として、情報 20 グループ、化学 16 グループの計 167 点の論文ペアリングを行

い、情報分野では F-1 Score が 0.80、化学分野では 0.73 という成果を得た。

(ウ) 論文間の相互的な理解を含めたサーベイ生成

当初の目標は指定された論文を対象に図表を伴うサーベイを作成してユーザスタディを実施することだったが、どの論文をサーベイの対象とすべきかが不明という課題があった。目標を強化し、指定された研究分野を対象に自動で論文を選定し、図表を伴うサーベイを作成することとした。リトリバルモデルにより論文を選定し、要約モデルで表生成やテキスト生成を行い、情報・化学分野の計 20 トピック 100 論文からサーベイを生成して評価を行った。評価は平均値 3.69 (目標値 3 以上)を達成し、今後は検索・要約生成モジュールの精緻化と要約項目自体の自動推定手法を開発する予定である。

(オ) 論文間の類似性理解

論文集合の相互理解と同時に着手し、類似していると考えられる論文のペアを情報、化学で各 10 ペアずつ作成した。情報・化学 論文 20 点について類似性を説明するテキストを自動生成し、外部の研究職・技術職 24 名に評価を依頼した。評価は同意レベルを 5 段階で行い、平均値は 4.04 (目標値 3 以上)を達成した。

課題推進者：牛久祥孝(オムロンサイニックエックス)

研究開発課題6:インパクト最大化解析 AI

本年度は研究開発課題6を実施しない。

(3) 研究開発項目3:記述&対話 AI

研究開発課題7:科学的根拠に基づく文生成

本年度は研究開発課題7を実施しない。

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：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 の実現に向けて、研究者が持つ経験的な暗黙知を与えることで、AI の性能を効率的に向上させる技術を開発した。具体的には、研究者が持つ暗黙知を LLM に反映させる技術を開発し、大規模データセットを構築することなく、研究者からの逐次的なフィードバックによって LLM の性能向上を実現した。また、研究者自身の背景知識を理解する AI として、研究者の専門性に応じてフィードバックタスクを最適に割

り当てる技術と、プロンプトの信頼性を推定し融合する技術を開発することで、LLM からより質の高い出力を獲得できるようにした。さらに、物体検知技術に関する論文を対象とした実験では、提案技術により LLM を活用することで、研究者の実験内容理解が効率化されることを確認した。加えて、研究者が候補分子の生成に対してフィードバックを与える際の思考を基盤モデルに取り込むために、分子編集のウェブアプリを開発した。

(1) マルチモーダル XAI の実現に向けた、研究者からの知識獲得 AI
LLM に研究者の暗黙知を与えて、論文理解 AI の性能を向上させる技術を開発した。In-context learning を活用し、研究者の知識を反映したプロンプトを通じて、LLM に対して知識を取り入れた。抽出結果の根拠を出力させ、研究者のフィードバックをプロンプトに反映することで、大規模データセットなしで LLM の挙動を改善することができた。

(2) マルチモーダル Co-UAI の実現に向けた、研究者の知識理解 AI
研究者の専門性に応じたフィードバックタスクを割り当てる技術を開発した。フィードバックの品質を高めるために、研究者とタスクの相性を推定し、最適に割り当てる最適化技術を導入した。複数の研究者がプロンプトを設計する際に、専門性に基づいてプロンプトの信頼性を推定し、質の高い出力を LLM から得ることができた。

(3) 研究者からの知識獲得 AI と研究者の知識理解 AI による実験内容理解の支援の実証実験

論文の実験内容理解を支援するために、コンピュータビジョンに関する論文 25 本を対象にタグ抽出と検証を行った。提案技術により、LLM(GPT-3)の精度を 0.15 ポイント向上させた。研究者の実験内容理解が効率化することを確認し、論文の発見も効率的に行えることが示された。

(4) 分子合成 AI への研究者の知見埋め込みに向けたインターフェース開発

RLHF を利用して、研究者が基盤モデルの出力にフィードバックを与える技術を開発した。研究者の思考を基盤モデルに反映させるため、単純な評価ではなく、改善案を提案する枠組みを導入した。基盤モデルと連結して利用できる分子編集のウェブアプリを開発し、改善前後の比較を通じて研究者の思考を捉えることができるようにした。

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: 本課題推進者が取り組む「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」において、まずは「大規模言語モデルを用いた論文理解枠組みの構築」について取り組む。この点は、研究開発項目2「主張&解析」と研究開発項目3「記述&対話AI」に関連する。最終的な目標は研究開発課題3「対話的マルチモーダル仮説生成」にあるが、仮説生成を行うための基盤としてまず、該当分野における論文等から知識を取り込み、その内容について理解する枠組みを構築する必要がある。そこで当該年度では、大規模言語モデルの fine-tuning を用いた論文理解の枠組み構築と、Prompting と知識推論を用いた仮説生成モデルの構築について取り組んだ。

① 大規模言語モデルのファインチューニングを用いた論文理解の枠組み構築

特許庁から取得した論文データベースを整備し、open-calmとT5のモデルをベースにファインチューニングを行った。一般的な masked language model を目的関数として使用し、今後は知識推論モデルや対話モデルの構築に関連する議論を進める予定である。

② Prompting と知識推論を用いた仮説生成モデルの構築

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、因果関係に関する 100,000 件の仮説生成シルバーデータを作成した。知識推論モデルの構築を先行して行い、敵対的学習を用いて妥当な仮説を蒸留する方法を検討した。今後はこの手法についての評価を進める予定である。

課題推進者: 吉野幸一郎(理化学研究所)

(4) 研究開発項目4:本年度の実施予定なし

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

前年度で組成した PM 補佐複数名とアシスタント、広報担当からなる PM 機関内で、Feasibility Study 期間の研究開発を支えた。知財や法務については、PM 機関であるオムロンサイニッ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は引

引き続き 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ている。会議としても、オンラインでマイルストーンの評価項目ごとの会議とプロジェクト全体の会議をそれぞれ週例や隔週例で実施した。今年度からは、新たにオンサイトで半年ごとの全体会議を実施した。

原田 PJ とは、緊密に連携している。具体的には、形式知(材料、配合、手順)のなかで材料を主に扱う原田 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ことに関して連携をしている。

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。前年度から引き続き、研究プロジェクト間での意見交換を緊密に実施し、全体の進捗を把握する。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、相互の敬意と開かれた議論の維持に努めている。本研究開発プロジェクトの方向性とことなる方向で研究が進んだ課題推進者については、別研究プロジェクトとして発展的にスピナウトすることも支援している。

(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継続し、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。研究成果の戦略的かつグローバルな知財化を継続し、日本の技術優位性を向上させる。

研究成果のコアの部分と周辺課題を整理し、コアの部分以外は積極的にオープンソース化やコンペティション開催などを進めてプロジェクト外の産・学からの参加を呼びかける。AI サイエнтиストの研究を主体的に盛り上げることで、更にそうした AI サイエнтиストを活用する市場自体も醸成する。

(3) 広報、アウトリーチ

Web サイトを開設し、積極的な情報発信を進めた。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のみならず、プロジェクト自体でも国内外で研究会やシンポジウムを開催し、発信と意見集約を進めた。この中で、昨年度発足させた原田 PJ と牛久 PJ による「サイエンス AI 研究会」については、JST 未来社会創造事業で同種の研究開発に取り組む高橋課題(理研)と長藤課題(東大)とも更に連携し、シンポジウム開催を行った。今年度は更に国際連携を深化させるために、欧米の大学との情報交換と連携議論も進めた。既に Cambridge 大や Stanford 大、MIT と意見交換を開始しているが、エディンバラ大からも情報交換の打診があり、継続的に議論を拡大する予定である。

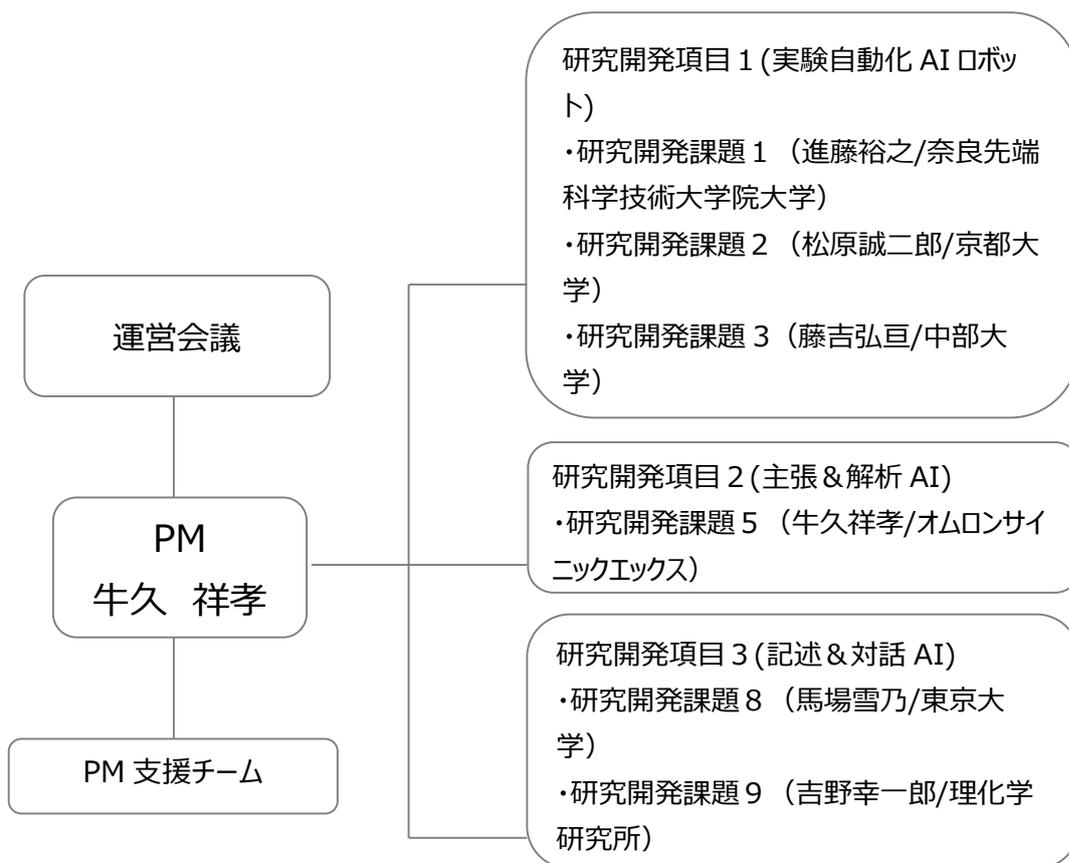
(4) データマネジメントに関する取り組み

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の管理を行っている。

AI 分野では、AI の学習に用いるデータと学習した結果の AI の挙動を規定するモデルパラメータからなるデータが存在する。特に後者の公開は研究の再現性を大きく向上させる一方で、その内部構造を詳らかにするものでもある。適切に知財化を進めた後でのデータ公開を原則としつつ、公開・共有・非共有非公開を判断していく予定である。

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週例の会議によって進捗を共有する。
- 併せて、オンサイトでの全体会議および、他のPJとの共同イベント開催を進めた。
- 昨年度の議論に基づき、まずは知財運用の議論は運営会議内で実施することとし、別会議体としての設置は2024年度に再度検討する。

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	10	0	10
口頭発表	3	1	4
ポスター発表	4	3	7
合計	17	4	21

原著論文数(※proceedingsを含む)			
	国内	国際	総数
件数	0	11	11
(うち、査読有)	0	11	11

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	1	1

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