

AIがノーベル賞を取る日

  牛久 祥孝

  losnuevetoros

牛久祥孝 (うしくよしたか)

2013.6~2013.8 Microsoft Research Intern
2014.3 博士(情報理工学)、東京大学
2014.4~2016.3 NTT CS研 研究員
2016.4~2018.9 東京大学 講師 (原田牛久研究室)
2016.9~ 産業技術総合研究所 協力研究員
2016.12~2018.9 国立国語研究所 共同研究員
2018.10~ オムロンサイニックエックス株式会社 Principal Investigator
2019.1~ 株式会社 Ridge-i Chief Research Officer
2020.4~2023.3 津田塾大学 非常勤講師
2021.7~ 東北大学 非常勤講師
2022.1~ 合同会社ナインブルズ 代表

主な学術団体活動

ACM・IEEE・情報処理学会・人工知能学会・日本ロボット学会・応用物理学会
コンピュータビジョン勉強会@関東
電子情報通信学会

日本ディープラーニング協会
共立出版 コンピュータビジョン最前線

主な研究プロジェクト

2022-2025 人と融和して知の創造・越境をするAIロボット JST Moonshot (PM:牛久祥孝)
2021-2025 マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築 JST 未来社会創造事業 (代表:長藤圭介)
2017-2020 多様なデータへのキャプションを自動で生成する技術の創出 JST ACT-I (代表:牛久祥孝)
2017-2021 機械可読時代における文字科学の創成と応用展開 JSPS 基盤研究(S) (代表:内田誠一)

画像キャプション生成

[Ushiku+, ACMMM 2012]

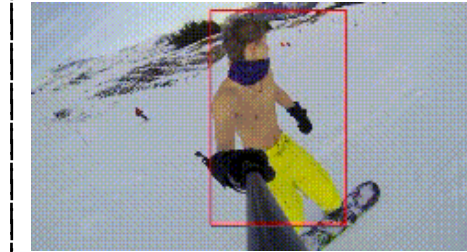
[Ushiku+, ICCV 2015]



A yellow train on the tracks near a train station.

動画の特定区間と キャプションの相互検索

[Yamaguchi+, ICCV 2017]



A guy is skiing with no shirt on and yellow snow pants.

一般会員
幹事
情報・システムソサイエティ 庶務幹事
著作権管理委員会 委員
有識者会員
編集

かつての理化学のように重要分野である情報学で 研究に、開発に、事業に熱狂して成功できる楽園をつくりたい

3年後の壱万円札に寄せて—どうすれば現代に研究者の楽園を確立できるか—

129

特 集 「企業における研究開発部門の役割と創出価値」

3年後の壱万円札に寄せて

—どうすれば現代に研究者の楽園を確立できるか—

On the 10,000 Yen Bill in Three Years:

How Can We Establish a Paradise for Researchers in the Modern Age?

牛久 祥孝

Yoshitaka Ushiku

オムロンサイニクエックス株式会社, 株式会社 Ridge-i

OMRON SINIC X / Ridge-i

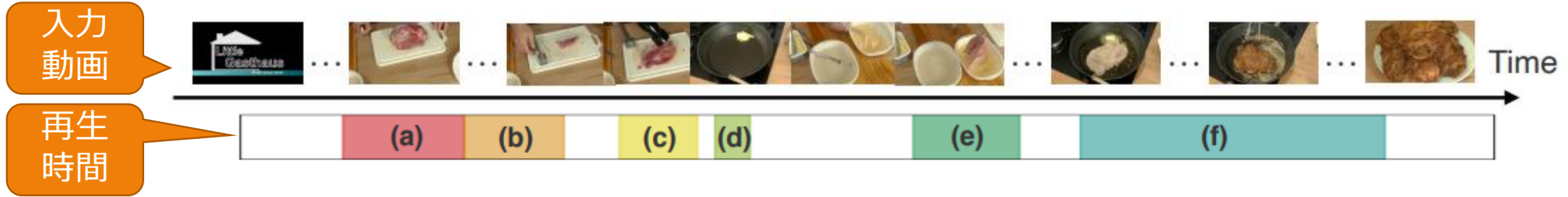
contact@yoshitakaushiku.net, <https://yoshitakaushiku.net/>

Keywords: SINIC theory, R&D.

[牛久, 人工知能36巻2号]

作業記録動画像からマニュアル自動生成

[Nishimura+, MTA 2023]



機械学習手法が生成した作業マニュアル（レシピ）

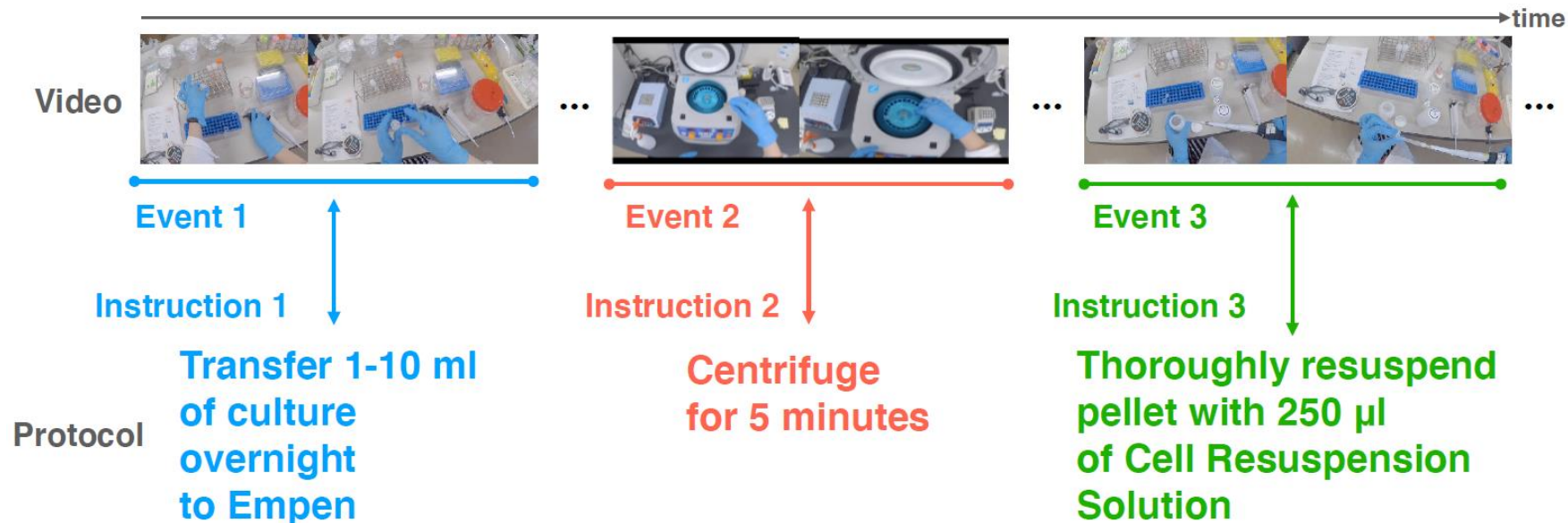
- (a) Cut the pork in half and remove the pork
豚肉を半分に切り、豚肉を取り出す
- (b) Season the pork with salt and pepper
豚肉に塩・胡椒をする
- (c) Season the pork with salt and pepper
豚肉に塩・胡椒をする
- (d) Heat some butter in a pan
フライパンでバターを熱する
- (e) Coat the pork in the break crumbs
豚肉にパン粉をまぶします
- (f) Fry the pork in a pan
フライパンで豚肉を炒めます



作業理解の対象を実験科学へ

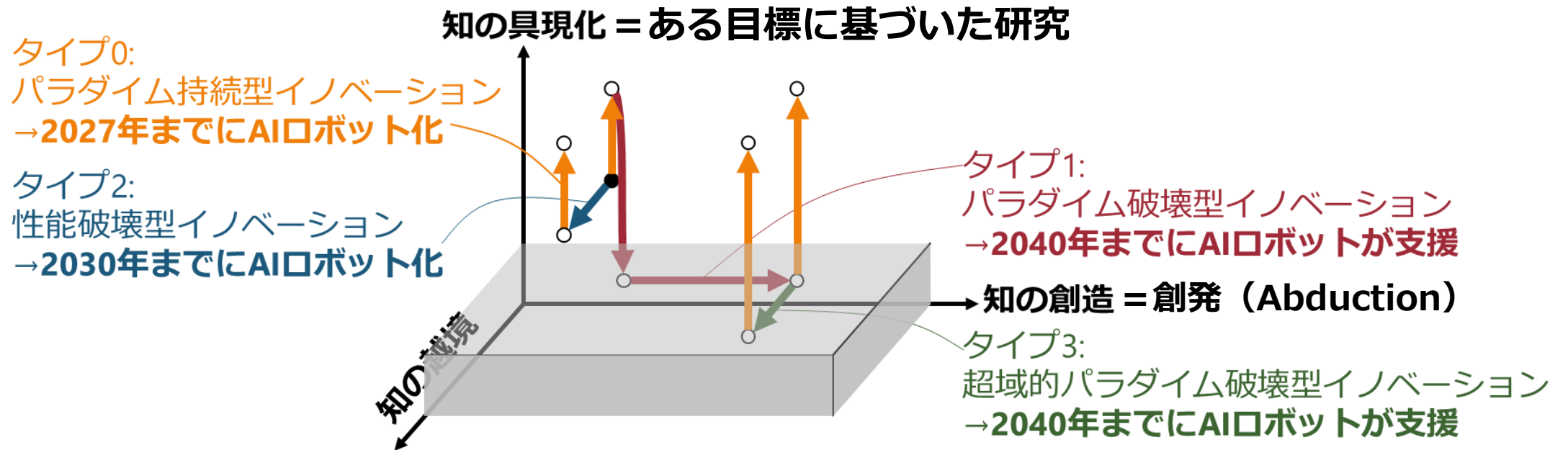
[Nishimura+, ICCV WS 2021]

- 調理以外の作業を理解する → 生化学実験
- 4種類の実験をそれぞれ4回撮影したデータセット
 - PCR, ミニプレップ, DNA抽出, アガノースゲル作成
 - DNA抽出は, フェノールクロロホルム抽出2回, エタノール抽出2回
 - 撮影後, 手順とvideoのイベントをアノテーション

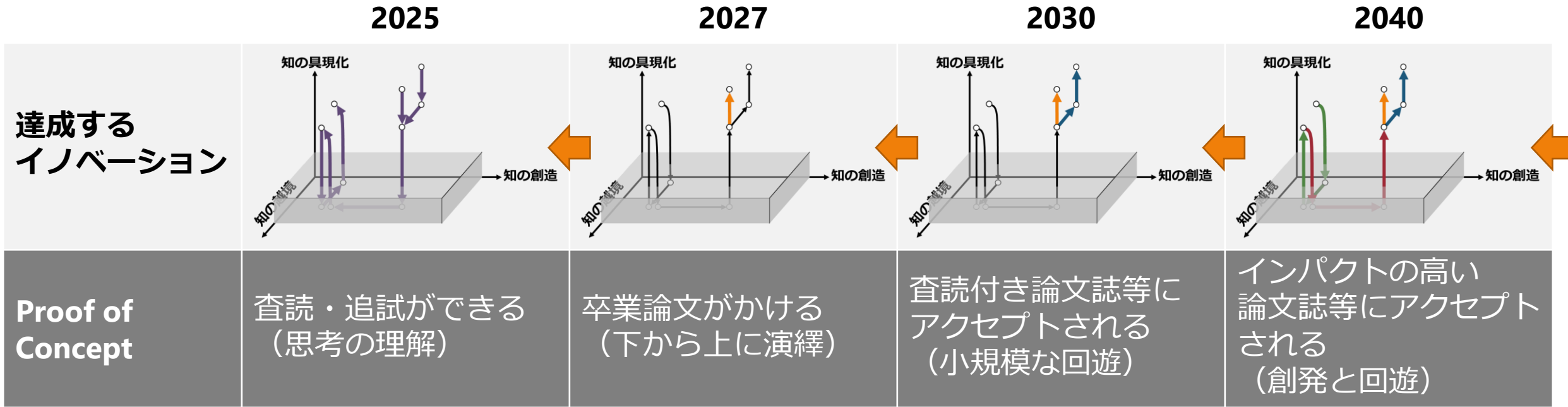


JST Moonshot 目標3 人と融和して知の創造・越境をするAIロボット

- **研究者とAIが融和し、2050年にノーベル賞級の研究成果を生み出す世界を目指す**
 - 研究や開発に従事する人材の生産性を、米中を超えるレベルに導く
 - 論文執筆のみならず、知財化やその審査を加速する基盤技術を開発する
- **イノベーションダイアグラム^[山口 2014]に基づいて、AIロボット駆動科学が生み出せる研究成果のマイルストーンを設定する**



バックキャストされたイノベーション達成シナリオ



2050



ノーベル賞級の研究を人とAIロボットが創出

自動的に科学的原理・解法を発見するAI ロボットのミッション

- 幅広い分野で

→マルチディシプリン

- 実験を行い

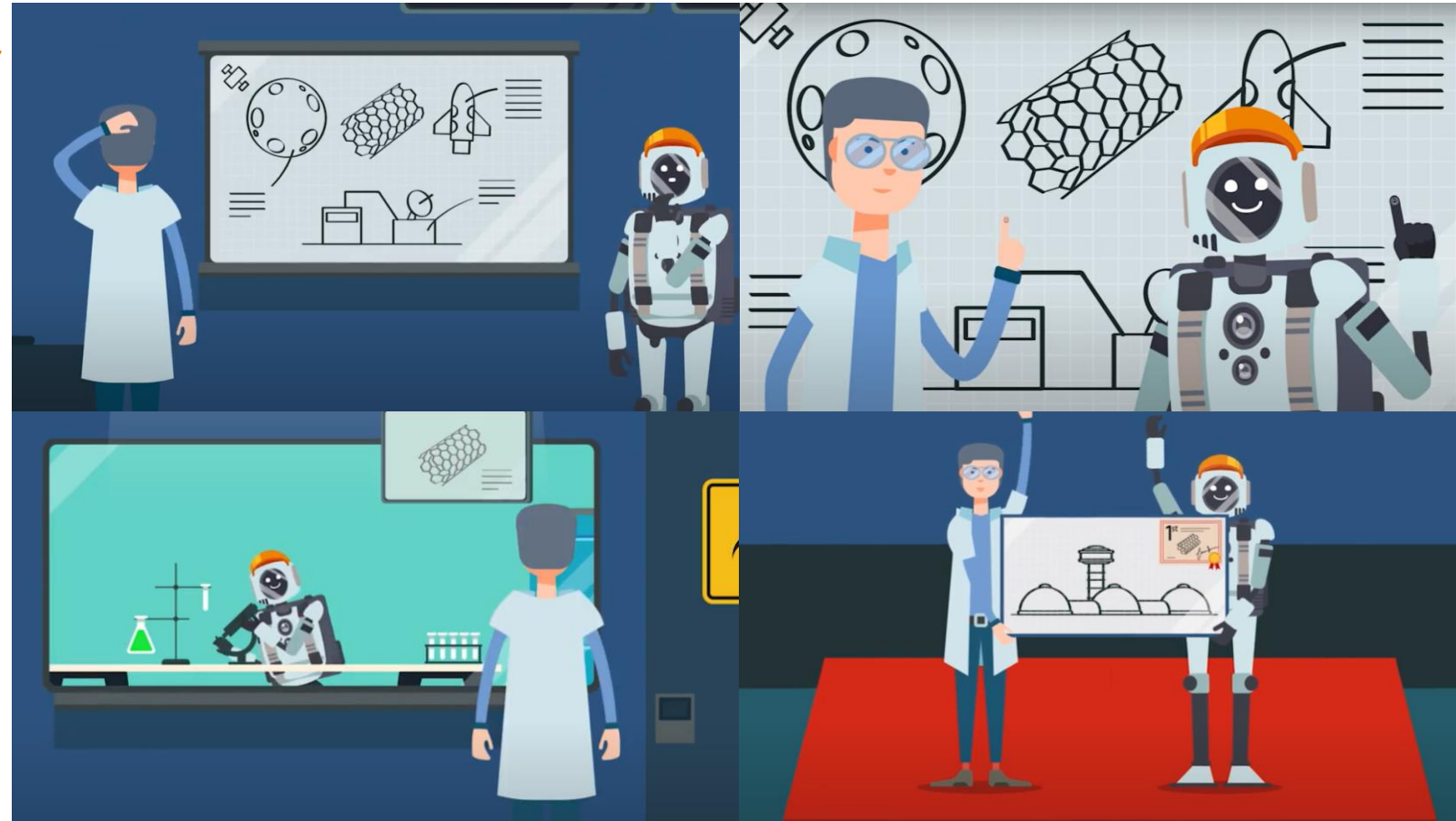
- 自ら計画
- 自律的に実行

→研究の主張と実験

- 法則を見つけ出す

- 実験結果の解析
- 仮説の検証

→研究の解析と記述&対話



論文：研究の主張と実験、その解析が記述されたデータセット

主張

- この論文の仮説
- この論文の貢献点
- 既存の論文との関係性

実験

- 提案する手法
- 実験フロー
- 実験パラメータ



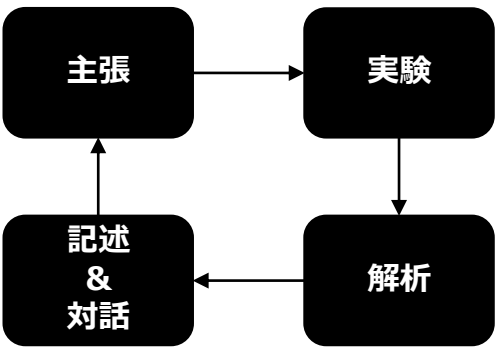
```
Experiment
Date: ※ここに実験日を書く※
Subject: ※ここに、実験名を書く※
Name: ※ここに名前を書く※
do
  [PUMP] move work
  from
  to
  volume [mL]
  at asp. speed [mL/min]
  disp. speed [mL/min]
```

解析

- 実験結果の解釈
- 主張との関係性

研究のループと研究者・AIロボットの融和の変化シナリオ

研究 = 主張 → 実験 → 解析 → 記述 & 対話 → ... というループ



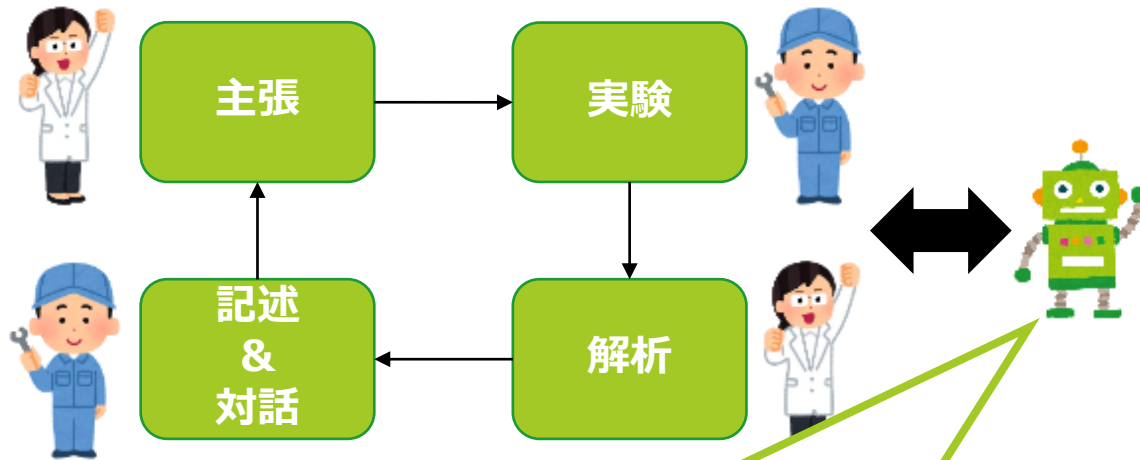
AIサイエンティストの担う役割についてもマイルストーンを設定

	2025	2027	2030	2040
研究ループの体制	<ul style="list-style-type: none"> 人間の研究行動をAIロボットが学習し評価する 	<ul style="list-style-type: none"> AIロボットが人間を全パートで部分的に支援する 	<ul style="list-style-type: none"> 解析が自動化される 実験も半自動化され、人間は助言を行う 	<ul style="list-style-type: none"> 人間は創造的な思考パートに集中する
人間研究者の役割イメージ	研究者	教員・先輩	教員	研究責任者
AIロボットの役割イメージ	査読者・評価者	学部生	博士課程学生	研究員

実現したいもの

2025年

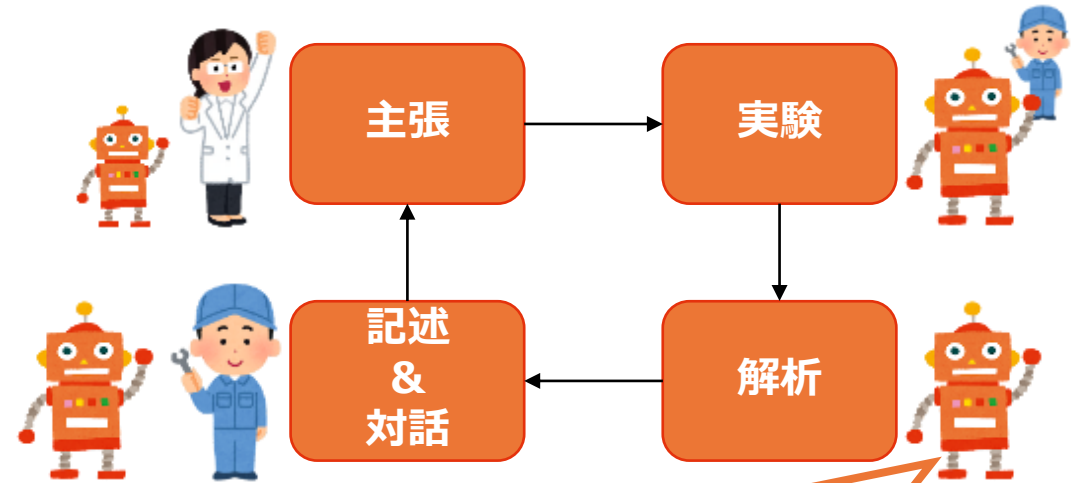
研究を理解するAIサイエンティスト



既存の**主張**から**実験計画**と**実験結果の解析**、**論文全体の記述**との関係を理解

2030年

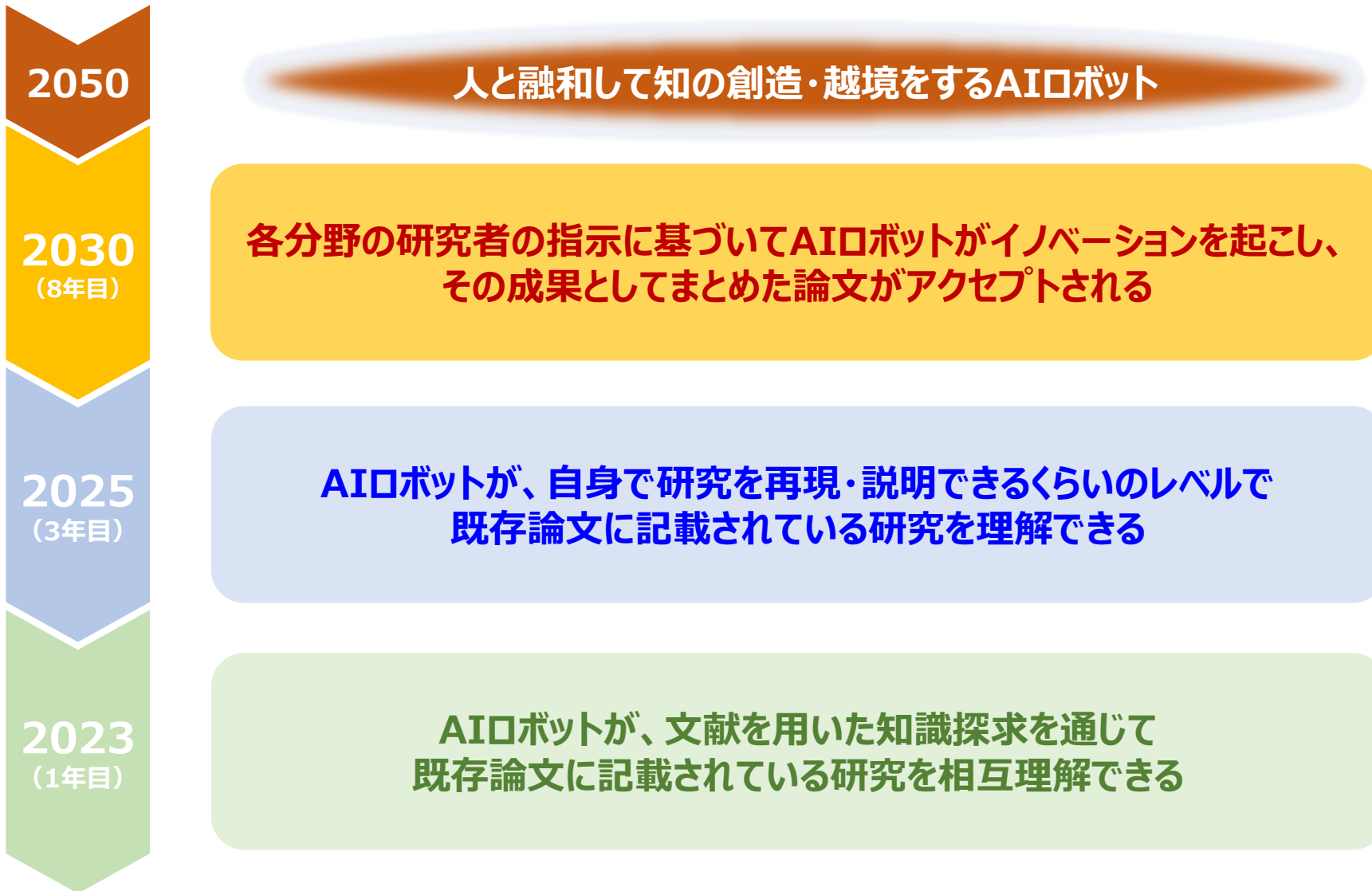
科学者と研究するAIサイエンティスト



新たな**主張**を科学者と議論し、**実験を計画・実行して結果を解析**、**主張に沿う論文を記述**

マイルストーンまとめ

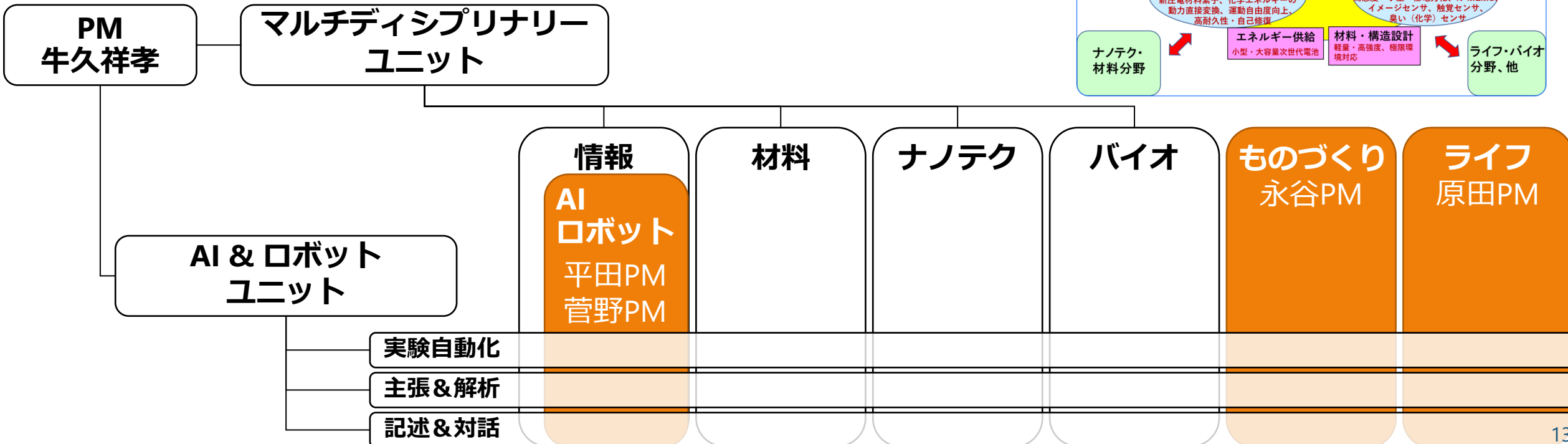
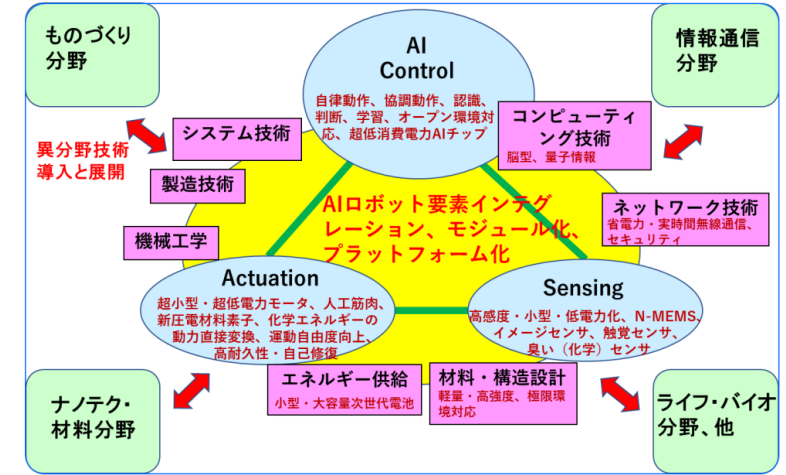
- 2025論文理解→2030研究実行



マルチディシプリン/AIロボット専門家のマトリクス型体制

- AI&ロボットユニット：研究開発の自動化を目指したAI・ロボットの基礎的研究
- マルチディシプリナリーユニット：AI・ロボットに関連する分野で研究を自動化

- ✓ ボトルネックの発生や停滞を避ける
- ✓ 研究AIロボットを同時に展開できる

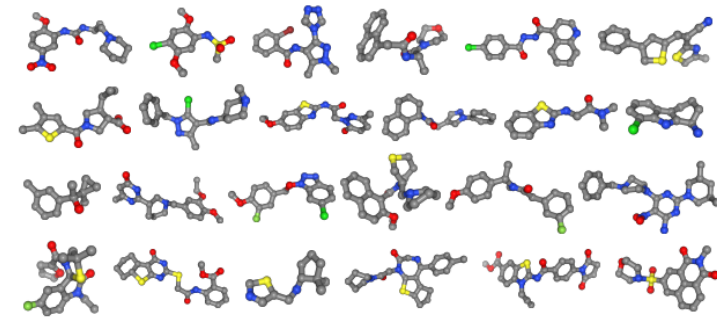
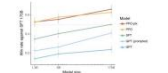


ChatGPTによるAI駆動科学の試み

GPTは論文を読んで要約し、
図の内容について回答できる
[OpenAI, 2023]

Training language models to follow instructions with human feedback

Lang (Prompt)	LLM (No. of)	Model (Size)	Model (Type)	Model (Name)	Model (URL)
OpenAI GPT-3	175	175	LLM	GPT-3	https://openai.com/research/language-model-research
Anthropic Claude	1	1	LLM	Claude	https://openai.com/research/language-model-research
Google Gemini	1	1	LLM	Gemini	https://openai.com/research/language-model-research
Meta LLaMA	1	1	LLM	LLaMA	https://openai.com/research/language-model-research
Microsoft Copilot	1	1	LLM	Copilot	https://openai.com/research/language-model-research
OpenAI GPT-4	1	1	LLM	GPT-4	https://openai.com/research/language-model-research



GPTは分子や結晶、タンパク質
3次元構造を生成できる
[Flam-Shepherd&Aspuru-Guzik, 2023]

You need to perform Suzuki and Sonogashira reactions using available reagents...

User prompt

First, let's find the appropriate conditions for both Suzuki and Sonogashira reactions...

Planner's output

GOOGLE Suzuki reaction conditions optimal

An optimal set of conditions for Suzuki-Miyaura cross-coupling reactions can be obtained...

GOOGLE Sonogashira reaction conditions optimal

The optimal conditions for the Sonogashira reaction, a cross-coupling reaction of a vinyl or aryl halide with a terminal...

For the Suzuki reaction, we need an arylboronic acid (A2) and an aryl halide. Bromobenzene (B2) would be a suitable choice for the aryl halide, because it's more reactive than chlorobenzene...

```
Generated protocol
1 from opentrons import protocol_api
2
3 metadata = (
4     'Method
5     metadata
6 )
7
8 def run(protocol: protocol_api.ProtocolContext):
9     # Load labware
10    hs_mod = protocol.load_labware('heaterShakerModuleV1', 10)
11    reagents = protocol.load_labware('nest_96_wellplate_2ml_deep', 5)
12    reaction_plate = hs_mod.load_labware('nest_96_wellplate_2ml_deep')
13    tiprack20 = protocol.load_labware('opentrons_96_tiprack_20ul', 1)
14    tiprack300 = protocol.load_labware('opentrons_96_tiprack_300ul', 2)
15
16    # Load pipettes
17    p20 = protocol.load_instrument('p20_single_gen2', 'left', tip_racks=[tiprack20])
18    p300 = protocol.load_instrument('p300_single_gen2', 'right', tip_racks=[tiprack300])
19
20    # Close labware latch
21    hs_mod.close_labware_latch()
22
23    # Transfer reagents for Suzuki reaction (0.025 mmol scale)
24    ...
25
26    # Transfer reagents for Sonogashira reaction (0.025 mmol scale)
27    p20.pick_up_tip()
28    p20.aspirate(10.5, reagents['A1'])
```

GPTは文献から実験用の
プログラムを生成できる
[Boiko et al., 2023]

Yann LeCun (深層学習の御三家)

「ChatGPTなどの大規模言語モデルは、その広大な連想記憶に類似した質問がある場合には正しく回答できる」



Yann LeCun 
@ylecun

...

LLMs have no physical intuition as they are trained exclusively on text. They may correctly answer physical intuition questions *if* they can retrieve answers to similar questions from their vast associative memory.

**ChatGPTで
AIサイエンティストの研究は終了するのか？**

**ChatGPTだけでは
AIサイエンティストは実現できない**



Yann LeCun ✓
@ylecun



LLMs have no physical intuition as they are trained exclusively on text. They may correctly answer physical intuition questions *if* they can retrieve answers to similar questions from their vast associative memory.



Yann LeCun ✓
@ylecun

...

LLMs have no physical intuition as they are trained exclusively on text. They may correctly answer physical intuition questions *if* they can retrieve answers to similar questions from their vast associative memory. But they may get the answer *completely* wrong

1/

[ツイートを翻訳](#)

紙切れを両手で水平に持っ
てから、片手を離すとどん
なことが起こる？

ChatGPT Hallucinates



What happens if I hold a piece of paper horizontally with two hands and I let go of one hand?



If you were holding a piece of paper horizontally with two hands and let go of one hand, the paper would likely tilt or rotate in the direction of the hand that you let go of. This is because the paper is no longer being held evenly on both sides, and the weight

その紙は、離した方の手に
向かって傾くか回転する場
合が多いです

ChatGPTの欠点

- × 嘘を言ってしまう・データを誤解する (Hallucination)
- × 根拠を伴わない文の生成
- × 実世界と繋がっていないサイバー空間の存在

先ほどのYann LeCunのサンプル以外にも多数のレポートが存在

例：ChatGPTでは時系列的な現象の理解は難しい [Chan et al., 2023]

本プロジェクトでも：

- × GPTでは**実験条件の推定は難しい** (馬場先生) 
- × GPTは**知識推論に特化されたものではない** (吉野先生) 
- × GPTで**文献からの自動実験スクリプト生成は難しい** (松原先生) 

基盤モデル/大規模言語モデル (Large Language Model) とは

従来のAI

- × **タスクの数**だけAIモデルが必要
- × タスクごとに**大量の例示**が必要

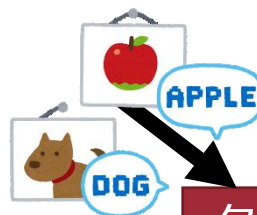
大量の例示



基盤モデルを活用したAI

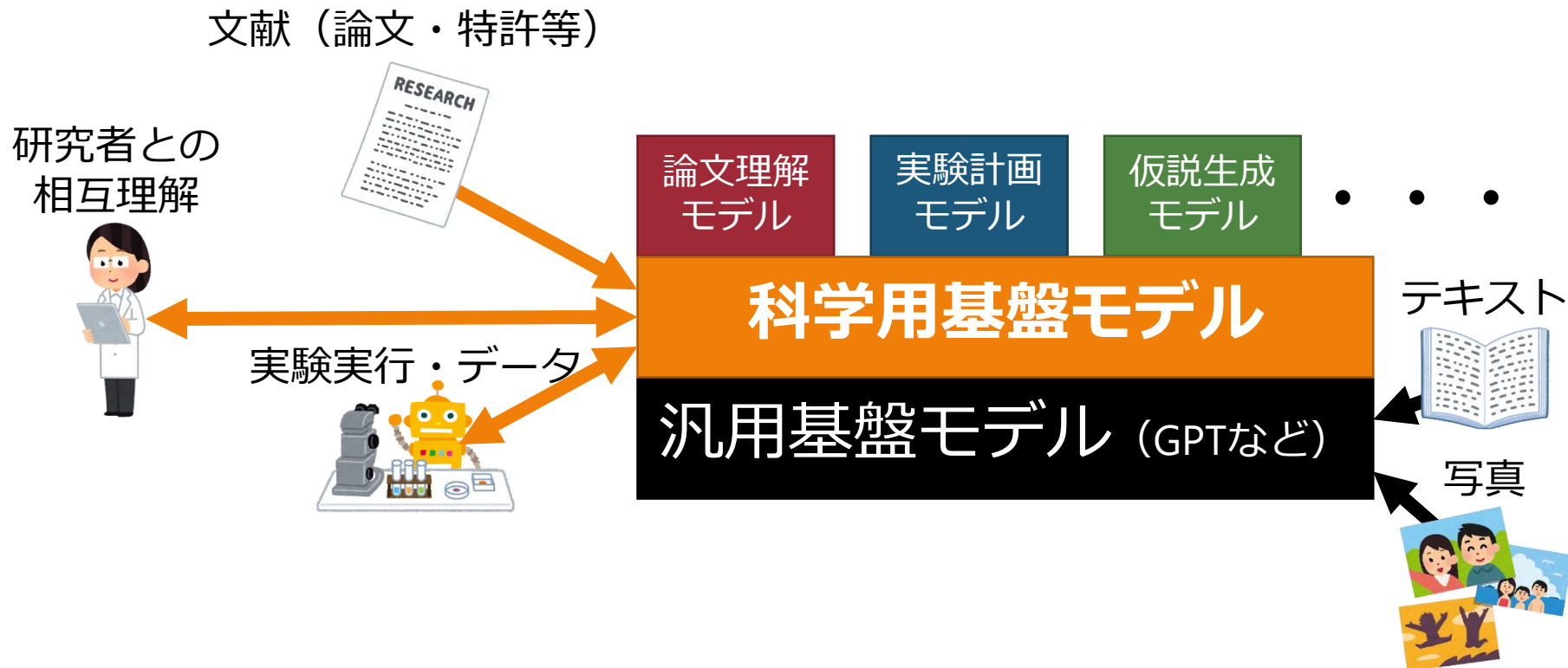
- ✓ **基盤モデル1つ** + α でよい
- ✓ タスクごとに**少量の例示**でよい

少量の例示



AI駆動ロボット科学のための基盤モデル

- 正しい文献を図表ごとと理解し（マルチモーダル）
- 研究者の理解を得られる説明を行い、研究者の教示を賢く学んで（共進化AI; Co-Understandable AI）
- 実際の実験を実行して結果のデータを学ぶ**科学用基盤モデル**を構築



科学用基盤モデルに向けた動き

- 国産汎用基盤モデル

 - JST CRDS分野別委員会委員として川原圭博教授（東大）らと議論

- 科学用基盤モデル

 - MS・未来の4課題で
AIロボット駆動科学イニシアティブを
立ち上げ、科学用基盤モデル構築



解決すべき課題： 三つの限界

• プロセスの断絶

- 現代の科学研究では、本来一つのサイクルとして統合されているべき実験、データ処理、法則発見、仮説やモデルの構築、計算による予測などの各プロセスが断絶し、漸次的進化のいきづまが見られる。

➡ AIロボットにより一つのサイクルとして統合し、科学的発見や科学研究の進展を加速

• 分野の断絶

- 近代科学は分野の専門分化の歴史。
- しかし、現代科学の主要な対象は生命や高分子、生態系などの複雑なシステム。複雑に絡み合った全体を俯瞰しないと理解が難しい。

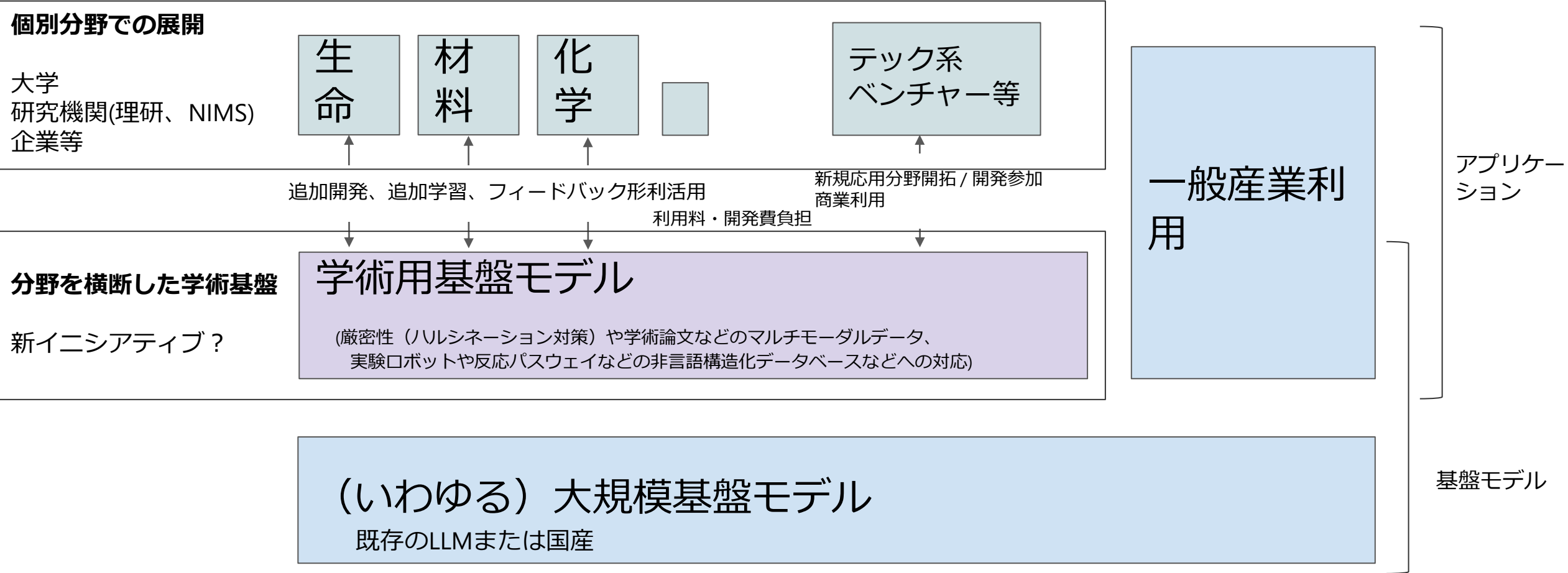
➡ 基盤モデルで知識を集約・統合し、個別細分化した科学分野を再統合

• 人間の能力の限界

- 人間の実験手技や認知能力には限界がある。これまで実験的に探索出来たのはごく一部。

➡ 実験ロボティクスの発展でこの限界を超越し、より幅広いサイエンスを実現

学術基盤モデルの位置付けとエコシステム



注意点 1 : AI学術利用の最大インパクトは近代以降個別細分化した学問分野を再統一することにあるため、学術用基盤モデル開発は一つに集約すべき。

注意点 2 : 従来の学術機関、行政機関はミッション型の大規模開発に向かないため、アジャイル開発が可能な新イニシアティブの立ち上げが適当。

AI、ノーベル賞めざす「研究者」に 論文読み自ら仮説

Next Tech 2050

2022/10/31 2:00 | 日本経済新聞 電子版

人間の研究者のように、イノベーションの原動力となる画期的成果を生み出せる人工知能（AI）を開発する動きが広がってきた。オムロン子会社のオムロンサイニックエックス（東京・文京）の牛久祥孝氏らの研究チームは、科学論文をAIに理解させる取り組みを始める。2050年にはAIがノーベル賞級の成果を上げることを目指す。



AIを組み込んだロボットが自律的に実験できるようにする（イメージ）

2023年に達成を目指すマイルストーン

情報・物質分野の文献から知識探求→既存論文に記載されている研究を相互理解

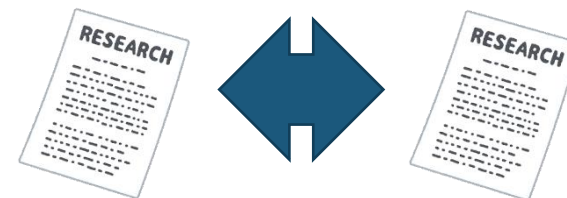
論文単体の理解

- 主張→解析・議論の一貫性を記述
- AIによる記述を主観評価



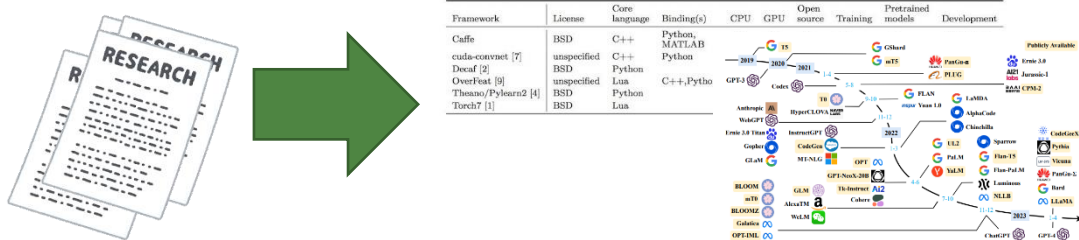
論文集合の相互理解

- 論文全体/一部の間で類似度を算出
- AIによる算出結果を定量評価



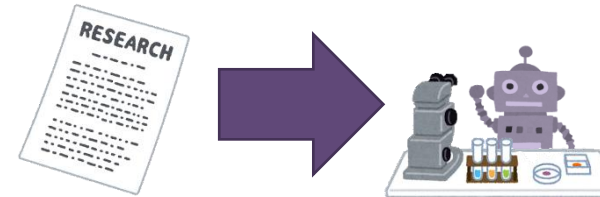
論文集合のサーベイ生成

- 複数論文を比較する図表を生成
- AIによる図表を主観評価



物質自動合成

- 有機物の論文から自動合成
- 自動合成の成功率を定量評価

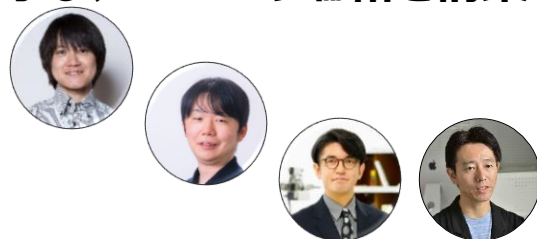


研究体制と主な分担

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 弘亘 (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)

