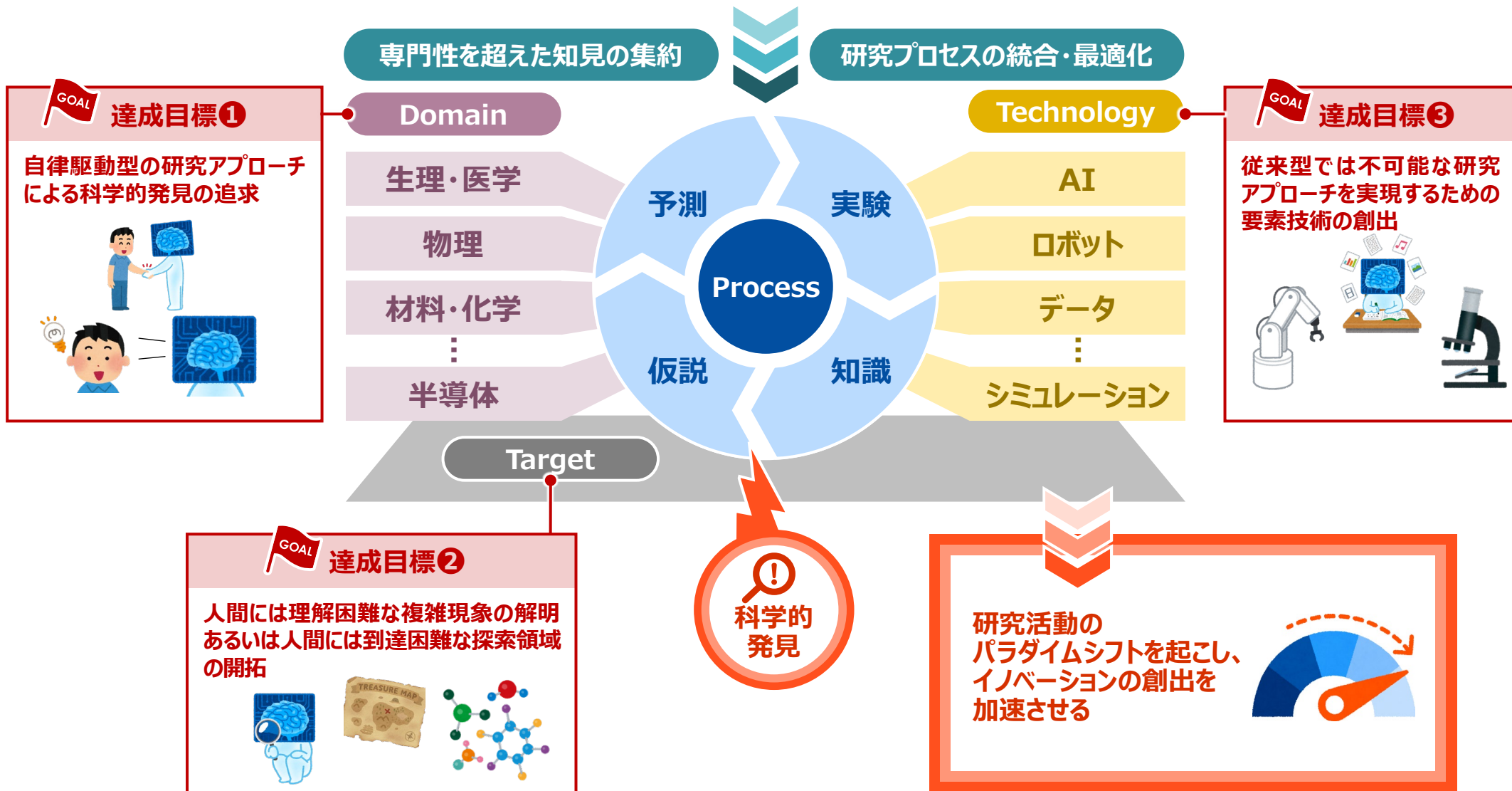


1 自律駆動による研究革新

- 研究プロセスそのものをAIやロボットで加速する自律駆動型の研究アプローチが世界的な潮流に
- 人の認知限界・認知バイアスを超えて複雑現象の解明や探索領域の開拓を可能に
- 本来の事象を紐解くための重要な鍵で、科学研究の方法論を革新させるゲームチェンジャーになり得る



令和6年度戦略目標

1. 目標名

自律駆動による研究革新

2. 概要

AI やロボティクスなどの技術進展や高度化に伴い、研究プロセスそのものを AI やロボットで加速する自律駆動型の研究アプローチが世界的な潮流になりつつある。自律駆動型の研究アプローチは人の認知限界・認知バイアスを超えて複雑現象の解明や探索領域の開拓が可能であり、科学研究の方法論を革新させる可能性を持つ。本戦略目標では、特定の分野にとらわれず自律駆動型の研究アプローチを推進することにより、科学的発見プロセスへの理解を深めるとともに、自律駆動型の研究アプローチの活用環境の醸成を図る。これにより、研究活動のあり方そのもののパラダイムシフトが起こり、イノベーションの創出が加速されることを期待する。

3. 趣旨

自然科学の研究は、現象の解明と探索空間の拡張の両輪で進められており、その現象が人の理解を超えるほど複雑で、その探索空間が広く未開拓であるほど、インパクトが高い科学の発見と進展が見込める。この解明や拡張は主に勘・コツ・経験に基づいた仮説駆動型の研究アプローチで進められてきた。近年では、研究現場におけるデータやシミュレーション、AI、ロボットの活用が進み、蓄積されたデータによって研究を推進するデータ駆動型の研究アプローチに続いて、研究プロセスそのものを加速する自律駆動型の研究アプローチに移行する動きがある。日本が国際社会をリードしている物理、生理・医学、化学、材料などの分野においても、世界的に自律駆動型の研究アプローチに多くの研究者・資金が投入され、データや基盤設備を大規模に取り揃えた超ハイスループットな実験環境も構築されつつある。

これまでの仮説駆動型の研究アプローチは、本来複雑な世界の物理的な事象をより単純な要素に分割して理解する手法に基づいて進められ、これまで世界を紐解くのに大きく貢献してきた。一方で、分割してしまうと全体としての性質を失ってしまうような、非線形、非平衡、励起状態、動的変動などを含む複雑な事象の理解はあまり進んで来なかった。これに対して、自律駆動型の研究アプローチは、膨大な数のパラメータやデータを扱うことができるため、未開拓の探索領域で本来の複雑な事象を複雑なまま記述することが可能、すなわち、人には理解できなかった事象も捉えることができる可能性がある。ただし、自律駆動型の研究アプローチを用いて複雑な事象を探索するには、事象の全体を捉えて関係性を炙り出すことや、従来は困難であった調査や観測が必要で、専門性を超えた知見の集約が重要となる。また、全体を捉えるにあたっては、研究者が仮説を立てて実験を設計し大規模なデータを収集して解釈する、あるいは、観測された新たな事象からそれを説明する仮説を作って検証するなどの、研究プロセスを統合・最適化する必要もある。さらに、研究を加速するという観点で、文献やデータだけで

なくプラットフォームもオープン化するなど、多くの分野の研究者が参入しやすい環境の構築もまた重要である。

科学研究におけるAIやロボットとの融合、さらには計測・解析技術の高度化は本来の事象を紐解くための重要な鍵であり、100年に一度の科学研究の方法論を根本的に変革させるゲームチェンジャーになり得る。そこで、研究活動のあり方そのもののパラダイムシフトを目的として、AI、シミュレーション、ロボット、データ、各研究分野別の知見を融合させ、情報が不足した中でも適切に処理して自律的に研究プロセスを駆動させる方法論およびその活用環境の創出を目指す。

4. 達成目標

本戦略目標では、特定の分野にとらわれず自律駆動型の研究アプローチを推進し、研究者あるいは自律駆動による科学的発見プロセスへの理解を深めるとともに、自律駆動型の研究アプローチの活用環境の醸成を図る。具体的には、以下の達成を目指す。

(1) 自律駆動型の研究アプローチによる科学的発見の追求

予測、実験、知識の獲得、仮説生成といった一連の研究プロセスを自律的に駆動させる方法論を用いた研究活動を推進し、特定の分野にとらわれることなく自律駆動型の研究アプローチによる新たな科学的発見の追求を図る。

(2) 人には理解困難な複雑現象の解明あるいは人には到達困難な探索領域の開拓

自律駆動型の研究アプローチを用いて、人には理解困難な複雑現象の解明あるいは人間には到達困難な探索領域の開拓を行うための手法およびその周辺システムの構築を図る。

(3) 従来型では不可能な研究アプローチを実現するための要素技術の創出

自律駆動型の研究アプローチにより、新たな科学的発見を追求する、あるいは複雑現象の解明や探索領域の開拓を行うにあたって、ボトルネックとなる課題を解決する要素技術の創出を図る。

※ 自律駆動型の研究アプローチの構成要素については、プラットフォームを含めてオープン化を見据えて取り組むものとする。

5. 見据えるべき将来の社会像

4. 「達成目標」の実現を通じ、自律駆動型の研究アプローチを一般化させ、研究者が行う研究活動のあり方そのもののパラダイムシフトを起こし、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- ・ 研究活動の中での仮説の発見や予測、実験の計画、具体的な作業、結果の解析、論文の読解ないし執筆等を自律駆動させることで、研究者がより創造性の必要な作業に注力できるようになり、よりインパクトの高い科学的発見が誘起される。
- ・ 自律駆動型の研究アプローチを介して研究内容の比較が容易になることで、科学コミュニティにおける研究の位置付けが把握し易くなり、共同研究の円滑化や研究ネットワーク

の構築が促進される。

- ・自律駆動型の研究アプローチの発展により、過酷な環境下での実験、特定用途の機能性材料の研究、希少疾患に対する特効薬の開発など、多大な投資が必要であるがリターンが小さいため見送られてきた研究開発が一気に進み、様々な研究領域の発展が加速される。
- ・自律駆動型の研究アプローチが産業界にも波及することで、化学、材料、創薬などの開発や改良が効率化され、新規化合物や新材料などの発明が加速されるなど、社会課題の解決や生活の豊かさにつながるイノベーション創出が加速される。

6. 参考

6-1. 国内外の研究動向

AI やロボティクスの進展、IT 化やデジタル化の普及、さらには計測・解析技術やコンピューティング技術の高度化に伴い、研究プロセスを刷新しようという試みが世界的な潮流になりつつある。特に ChatGPT をはじめとする様々な処理を行うことができる大規模言語モデルの出現で「研究活動における AI 活用」が急激に進んでおり、これらの技術は最先端の研究競争における強力な支援ツールになるものと認識されている。

（国内動向）

令和3年度戦略目標「『バイオ DX』による科学的発見の追究」に紐づく CREST 領域等において、生命科学研究における DX が推進されている他、ムーンショット目標3において、人と対話しながら自律的に研究できる AI ロボットの開発が進められている。また、未来社会創造事業探索研究において、データ駆動型の研究アプローチによる研究生産性の飛躍的向上を目指した課題に取り組んでいる。さらに、材料分野では、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクトが進められている。その他、自律駆動型の研究アプローチを実施する上で重要となる要素技術への支援として、研究データ基盤の活用に資する環境整備や科学基盤モデルの研究開発及び利活用、AI 研究開発力の底上げ、計算環境の構築、若手研究者に対する人材育成などを推進している。

（国外動向）

米国ではAI やロボットを導入して材料研究のペースを100倍に加速させることに成功した他、中国では文献読解や実験設計等を可能とする「ロボット化学者」を開発、韓国の Samsung は自動粉体合成・評価ラボを構築、英国ではAI ロボットのイノベーション工場に150億円の投資を決め、加国ではトロント大学の「self-driving labs」の研究に年2億ドルを7年間助成する動きが見られている。

6-2. 検討の経緯

「戦略目標の策定の指針」（令和元年7月科学技術・学術審議会基礎研究振興部会決定）に基

づき、以下のとおり検討を行った。

1. 科学研究費助成事業データベース等を用いた国内の研究動向に関する分析及び研究論文データベースの分析資料を基に、科学技術・学術政策研究所科学技術予測センターの専門家ネットワークに参画している専門家や科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）の各分野ユニット、日本医療研究開発機構（AMED）のプログラムディレクター等を対象として、注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。
2. 上記アンケートの結果及び JST-CRDS 戦略プロポーザル「人工知能と科学」、専門家へのヒアリング結果等を参考にして分析を進めた結果、AI やロボット等の技術を駆使した研究プロセスの刷新が重要であるとの認識を得て、注目すべき研究動向「自律駆動型の研究活動に向けた技術革新」を特定した。
3. 令和 5 年 11 月に、文部科学省と JST は共催で、注目すべき研究動向「自律駆動型の研究活動に向けた技術革新」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、研究領域の軸とするべき観点や期待される成果、多くの研究者に裨益させるための仕組み等について議論を行い、ワークショップにおける議論や有識者へのインタビュー等を踏まえ、本戦略目標を作成した。

6-3. 閣議決定文書等における関係記載

「第 6 期科学技術・イノベーション基本計画」（令和 3 年 3 月 26 日閣議決定）

第 2 章 2. 知のフロンティアを開拓し価値創造の源泉となる研究力の強化

（2）新たな研究システムの構築（オープンサイエンスとデータ駆動型研究等の推進）

(b) あるべき姿とその実現に向けた方向性

社会全体のデジタル化や世界的なオープンサイエンスの潮流を捉えた研究そのもののDXを通じて、より付加価値の高い研究成果を創出し、我が国が存在感を発揮することを目指す。

（中略）

以上の質の高い研究データの適切な管理・利活用や、AI を含めた積極的なデータサイエンスの活用、そして先進的なインフラ環境の整備は、単に研究プロセスの効率化だけではなく、研究の探索範囲の劇的な拡大、新たな仮説の発見や定時といった研究者の知的活動そのものにも踏み込んだプロセスを変革し、従前、個人の勤や経験に頼っていた活動の一部が代替されていくことになる。これにより、データを用いたインパクトの高い研究成果の創出につなげるほか、研究者の貴重な時間を、研究ビジョンの構想や仮説の設定など、より付加価値の高い知的活動へと充当させていく。同時に、グローバルな視点からも、オープンサイエンスの発展に貢献する。

7. その他

自律駆動型の研究アプローチを実現するにあたっては、大きな投資が必要な大型・専用の設備やシステムを用いるのではなく、大学や企業などでも現実的に導入可能な予算規模で活用できるプラットフォームを様々な工夫で自律化させることを主眼とする。必然的に複数のプラットフォームを連携させることが必要になるため、それに適した方法論の構築や研究領域内での連携・協力を期待する。また、各種機器メーカーと連携・協力するなど、産業基盤の強化につながることを期待する。さらに、CREST「バイオ DX」領域やムーンショット目標3の他、AIPセンター、TRIP-AGIS、DxMT などの文科省で実施されている関連事業とも連携されることを期待する。

最後に、自律駆動型の研究アプローチには、得られた情報から研究者が刺激を受けて画期的な発見を目指す考え方もあれば、研究者が介在することなく目標の達成を目指す考え方や、自律的に自然の原理を発見し続けるシステムを生み出す考え方もある。本戦略目標の推進に併せて、自律駆動型の研究アプローチにおける研究者のあり方に対する議論が進むことを期待する。