



# 研究の自動化と情報共有が生み出す 新たな世界



Kazuhiro HAYASHI **林 和弘** 文部科学省科学技術・学術政策研究所 (NISTEP)

## 国際的コンセンサスが深まるオープンサイエンスと 高まる科学の変容への期待

前回の論説<sup>1)</sup>にて、オープンサイエンスとその政策あるいはデータ駆動型科学が切り開く科学と社会の変革について述べた。なぜこの変革が起こりうるのか、その背景や要因について、学術情報流通のデジタルトランスフォーメーション (DX)、COVID-19の影響や17世紀頃の歴史的な経緯などを踏まえて解説した。幸いなことに再び筆を執る機会をいただいたので、さらに議論を進めてみる。多少の繰り返しになるが、現在、世界はデータ (駆動型) 社会に向けた変革の中にあり、データ流通が今後のイノベーションの鍵を握るとされる。ICT (Information and Communication Technology) の進展に合わせてデータや情報の流通の仕組みが変わることによって、多量で多様な知識をよりオープンにすることが可能となり、また、ネットワーク化された情報は瞬時に双方向に行き来する時代となった。このような変容は科学研究の姿そのものを変え始めており、ICTで飛躍的に開かれた情報 (知識) を活用した科学の進展を目指すオープンサイエンスとして活動が進展している。オープンサイエンスは新たな科学や研究スタイル (科学のDX) を生み出し、これまでの科学を否定することなく、むしろその効率化を進め、その上に新たな科学研究が付加されていくような相補的な関係にある。そして、これまでどおり科学の進展により産業を含む社会が変わり、科学と社会が変容していく。あるいは、人工知能 (AI) 研究などは産業や社会の現場から新たな知識を生み出し科学を発展させつつもある。

このオープンサイエンスの潮流とそれに伴う科学と社会の変容は世界のアジェンダとなった。具体的には、UNESCOのオープンサイエンス勧告<sup>2)</sup>が193カ国の賛意を得て2021年11月に採択された。この採択の過程においては、世界学術会議 (ISC)、国連などの支持も得ており、1つの国際機関の範疇を超えた世界の

包括的な課題と認識されている。この勧告自体には法的な拘束力はないが、4年おきに各国が進捗を報告することになっており、インフラ整備、インセンティブ付与、人材育成等、7つの実践項目に国として取り組むことになる。ここで注目すべき点は、どの国もオープンサイエンスによって変わる科学と社会の姿を明確には把握していない点であり、まずは知識の共有、主に論文のオープンアクセスと研究データ、ソフトウェアなどの共有を進めて変革を促進していこうとしている。筆者はこの勧告策定の諮問委員会にアジア選出の委員として加わったが、各国の事例や議論を拝聴しながら、先進国を含め、依然暗中模索、試行錯誤の状況を知ることができた。その上で、日本は文部科学省が進めるAI等の活用を推進する研究データエコシステム構築事業等<sup>3)</sup>ほかにおいて具体的な取り組みを進めている状況にある。また、総合科学技術・イノベーション会議から日本学術会議に行われたオープンサイエンスと研究データ利活用に関する審議依頼の回答が公開された<sup>4)</sup>。

## Automated Research Workflow (ARW) に見る 科学のDXと学術コミュニティ・出版のDX

DXにはいろいろな捉え方があり、DXとは何かということ自体をも命題に含めながら、研究者が独創的な取り組みを進めている。そのような中で、今最も注目されているものの1つがAutomated Research Workflow (ARW)<sup>5)</sup>であり、先の日本学術会議の審議依頼回答においても取り上げられている。研究者は現在、AIと科学機器の自動化を研究ワークフローに組み込んでおり、AIや機械学習 (Machine Learning: ML) の手法をワークフローの構成要素として利用するだけでなく、これらの手法を実験設計や実験の自動制御に利用する。加えて実験や観測データを使ってモデルのテストや学習を行い、次のデータ収集のための設計をAIやMLの手法で生成するという、反復的なループを繰り返して新しい発見に繋げる。例えば、日本では理化学

研究所や、産業技術総合研究所、物質・材料科学研究機構（NIMS）などが取り組んでいる。このARWにおいては再現性の高い実験が行えるロボットが重要な役割を果たしており、ロボットに命令する“コード”が重要な役割を果たし、そのコードが未来の共有メディアとして有望視される。すなわち、科学が“コード化”し、ロボットが学術コミュニティの一員（パートナー）となりうる。また、論文という、人が理解しやすいが、ときに解釈が曖昧になるメディアを共有するより、機械が一意に解釈するコードを共有することが重要視される可能性が高まる。そして、そのコードによって生成された研究データが成果物となり、新たな価値を生み出す源となる。このコードとデータを蓄積するプラットフォームが、今で言う学術ジャーナルと論文を多数擁する商業出版社とは別の新たな役割を果たすことになる可能性に着目している。理化学研究所の高橋恒一氏はこれらのAI・ロボットによる研究プロセスの統合と自動化を、第5の科学：AI駆動型科学と呼んでおり<sup>6)</sup>、筆者自身もこの新しい科学が生み出した知識の共有の在り方、先に述べたコードとデータを要するプラットフォームを誰がどのように担うのが、学術出版のDXに相当するとして高い関心を寄せている。

### 化学とDXの親和性

話が一旦それるが、化学は元から“データ”に強いことは会員の皆さんには自明のことであろう。それは化合物を取り扱う上で必須だからであり、ケミカル・アブストラクトは1900年代からその情報収集に取り組んできた。化学は化合物データや物性データのデータベースの構築と共に進展してきた。あるいは近年、再現性や透明性の観点から論文の根拠データが求められる中、NMR（Nuclear Magnetic Resonance）のデータ等、早い段階から査読においてその提出が求められてきた。もし結晶学に限ってよければ、1960年代よりX線構造解析のCIF（Crystallographic Information File）データを共有する文化を育み、CIFデータを中心とした情報流通システムが出来上がっている。このCIFデータの中に、論文のタイトル、要旨や本文などを書き加えて、論文として投稿することも可能になっており、根拠となるデータの方が半ば主役の扱いにも見えるのは、大変興味深く、データ駆動型科学を先取りしているようにさえ見える。このように、化学者あるいは化学領域によっては研究データには慣れ親しんでいるものの、その一方で、化学はいわゆるスモール&クロー

ズドサイエンスとしてなかなかデータを共有しづらい側面も持っている。そのこと自体を否定するつもりはなく、比較的小さな単位で、人による再現性の高い実験と局所的な情報共有と議論を重ねて生まれてきた科学知によってこれまでの化学が発展し、これからも新しい価値が発見され続ける限りそのスタイルは生き続けるだろう。

### 化学者コミュニティができることと学会のDX

オープンサイエンスは、まず、そのスモール&クローズドサイエンスの本質をそのままに、その研究単位（研究室や研究機関）の間の情報流通をより効率化するなどして化学を進展させる可能性を持ち、さらに、ARWのような、研究手法そのもののDXや関連の学術出版のDXを生み出す可能性を持つ。そして、その両方において研究データとAI・ロボットを中心としたネットワークやプラットフォームが果たす役割が加速度的に大きくなると考えている。そして、データに慣れ親しんできた化学者はちょっとした意識の転換によって、これらの可能性を飛躍的に生かせるだろう。例えば、マテリアルDXのプラットフォーム<sup>7)</sup>などの政策の取り組みはすでに進んでおり、日本化学会でも本年になってDXに関する各種のイベント<sup>8)</sup>が開かれている。これらの取り組みの先に見える、研究の姿と、AI・ロボットと共存してデータやコードを含む情報を共有する新たなコミュニティのあり方は学会のDXの1つの可能性として大いに検討に値すると考える。

- 1) 本格的に変わり始めた科学と社会、化学と工業 2021, 74, 719.
- 2) UNESCO Open Science, <https://www.unesco.org/en/natural-sciences/open-science>
- 3) AI等の活用を推進する研究データエコシステム構築事業, [https://www.nii.ac.jp/creded/nii\\_ac\\_jp\\_creded.html](https://www.nii.ac.jp/creded/nii_ac_jp_creded.html)
- 4) <https://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-25-k335.pdf>
- 5) Automated Research Workflows for Accelerated Discovery : Closing the Knowledge Discovery Loop 2022. <https://nap.nationalacademies.org/catalog/26532/>
- 6) DXとAIが新しい科学の世界を切り開く, [https://www.riken.jp/pr/closeup/2022/20221104\\_1/](https://www.riken.jp/pr/closeup/2022/20221104_1/)
- 7) データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト, [https://www.mext.go.jp/b\\_menu/boshu/detail/data-driven\\_fullscale\\_results\\_00001.html](https://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/detail/data-driven_fullscale_results_00001.html)
- 8) (例として) 化学分野におけるDX（デジタルトランスフォーメーション）の現状ならびに今後の展望, <https://www.chemistry.or.jp/event/calendar/2022/07/post2207-21.html>

© 2023 The Chemical Society of Japan

ここに載せた論説は、日本化学会の論説委員会が依頼した執筆者によるもので、文責は基本的には執筆者にあります。日本化学会では、この内容が当会にとって重要な意見として掲載するものです。ご意見、ご感想を下記へお寄せ下さい。  
論説委員会 E-mail: [ronsetsu@chemistry.or.jp](mailto:ronsetsu@chemistry.or.jp)