

研究デジタルトランスフォーメーション の実現に向けて

文部科学省大臣官房審議官
(研究振興局及び高等教育政策連携担当)

坂本修一
さかもと しゅういち



研究DXを巡る現状と課題

デジタルトランスフォーメーション(DX)が急速に進む中、研究の世界においても、大量かつ高品質な研究データを軸にAI解析やシミュレーション等を通じて解釈・推論するAI・データ駆動型への変革が起ころうとしている。これは、研究設備・機器の遠隔化や自動化により、大量かつ高品質な研究データが効率的に創出・収集できる環境が現出したこと、および論文のオープンアクセス化や研究成果の迅速な公開の場の一つとしてのプレプリントの活用が一層加速されたこと等がもたらした事象である。その帰結として、研究データを含めた世界的な知の共有が進みつつある。このようなAI・データ駆動型の新しい研究アプローチ、研究DXは、人の能力を超えた新たな科学的発見、時間・場所・人手といった制約からの解放、専門領域や組織の枠を超えた共創を可能とし、パフォーマンスの向上とハイインパクトな研究成果を生み出すことにつながる。例えば、我が国の事例として、

約6600万通りの作製プロセス条件からAI解析により提案された最適な実験計画を立てることで、僅か40回程度の実験でネオジウム磁石の材料性能を1.5倍向上させることに成功している。しかし、世界に目を向ければ、英国の研究グループが開発したロボットサイエンティストは、1日1万化合物のスクリーニングを行うとともに、実験結果を統計学・機械学習により解析し、さらに高い活性を持つ新たな化合物の構造を予測したうえで、次の実験・検証・仮説修正を繰り返す、仮説主導のハイスループット研究の自動化に成功するなど、さらに進化した取り組みに移行しつつある。

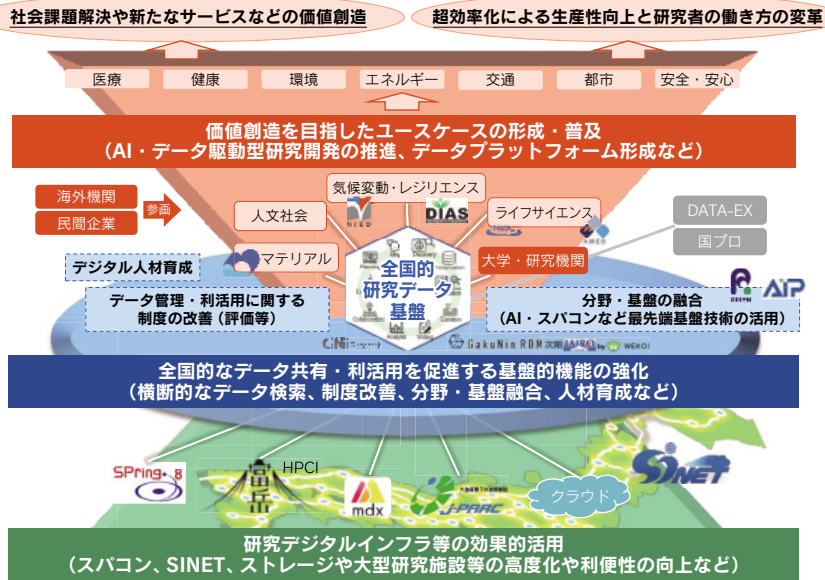
我が国では、第6期科学技術・イノベーション基本計画(2021年3月26日閣議決定)において、「新たな研究システムの構築(オープンサイエンスとデータ駆動型研究等の推進)」を掲げ、研究DXの推進を謳っているが、「研究DXの理解が浸透していない」「研究データのオープンアクセスの難しさ」「計算資源やストレージの確保」「各分野とデ

ータ・解析基盤の研究者の連携」といった課題がある。これらを解決し世界に後れを取ることなく研究DXの流れを全国規模に発展させることで、Society 5.0にふさわしい新たな研究システムの構築を目指す。

研究DXの実現を目指す 3つのアプローチ

研究DXの実現に向けては、前述の課題に対応しつつ、大学や研究者の行動変容を促すことが肝となる。つまりは、AI・データ駆動型の新たな研究アプローチに挑戦する研究者層を増やすとともに、データの取得・保管・解析、共有、利活用といった一連のデータマネジメントに大学や研究者が自発的に取り組むことが重要となる。そのためには、具体的な成功事例を生み出し、その成果や過程で得られる仕組みや経験・ノウハウをモデル化して普及するとともに、大学や研究者がモチベーションを持ちながら、過度な負担を感じずに研究データマネジメントに取り組むことができる環境整備が求められる。そこで、文部科学

図表 研究DX実現に向けた取り組み(研究DXプラットフォーム概念図)



省では以下の3つの施策を一体的に推進する。
 (1) 価値創造を目指した研究DXユースケースの形成、普及
 マテリアル、ライフサイエンス、気候変動・レジリエンス、人文社会の各分野において、中核機関が全国の大学等と連携し、研究データの創出・統合・利活用を一体的に進め、

研究データのオープンアンドクローズのルールづくりやハイインパクトな研究成果創出を含むユースケースを形成、普及する。
 (2) データ共有・利活用を促進する基盤的機能の強化
 全国の大学や研究者の研究データの共有・利活用を促進する全国的な研究データ基盤の構築を推進する。また、各分野とデータ・解析基盤の研究者の融合による革新的なAI・データ駆動型手法を開発し、研究DXのさらなる可能性を開拓する。その他、データ管理・利活用に関する制度改善やデジタル人材育成を進める。
 (3) 研究デジタルインフラ等の効果的活用

産学官の多様なユーザーが必要な計算資源やストレージ、計測機器等を確保できる環境を目指し、研究デジタルインフラや先端共用設備群、大型研究施設の活用・高度化を進めるとともに、将来に必要な計算資源の確保に向けて、ポスト「富岳」の開発・整備の調査研究を進める。

研究データエコシステムと産業界との連携

研究DXが目指すのは、大学や研究開発法人だけではなく、産業界を含めた多種多様なデータが流通し、産学官連携による新たな価値創造に向けたAI・データ駆動型研究開発

が行われる姿である。

文部科学省では、研究データの創出・共有・利活用の好循環を生み出すシステムである「研究データエコシステム」を構築するため、分野・機関の研究データをつなぐ全国的な研究データ基盤の構築と、効率的なAI活用のためのガイドライン整備、データマネジメント人材育成支援等を行う「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」を2022年度から開始した。

また、2023年度から、物質・材料研究機構が整備を進めるデータプラットフォームの試行運転や、データ利活用を加速する研究事業を開始するなど、全国でマテリアル分野の研究データ駆動型研究を本格化させる予定である。さらに、量子コンピュータの開発が世界的に進む中で、量子コンピュータの計算能力を活かした、地球規模の課題や、複雑な社会情勢の変化に対する予測、さらに、その予測に基づく制御を可能とする新たなプラットフォームを国内外へ広く提供するために、量子古典ハイブリッドコンピューティングの導入や数理科学の融合による次世代の研究DXにかかる取り組みを、理化学研究所が中核となって進めるべく検討を行っている。

このような研究データエコシステムの実現に向けた取り組みは、世界に先駆けたAI・データ駆動型のイノベーション創出とSociety 5.0にふさわしい研究システムの構築を目指すものであり、文部科学省としては企業との連携を深めながら進めていきたい。

(2022年8月25日脱稿、肩書は執筆当時のもの)