

2023 年度 テイヤール・ド・シャルダン奨学金懸賞論文
生成 AI が私の学びと研究に及ぼす影響

構造生物学における生成 AI の活用 —技術的特異点の超越とオメガ点への近接—

A2176476 安藤 慎 (あんど う しん)
理工学部 物質生命理工学科

要約

私は構造生物学という分野の研究に携わっており、特に核酸の立体構造解析とそれを応用した医薬品の設計を行っている。また昨今、生成 AI の発達がめざましく、従来の AI に成し得なかった、自ら全く新しい文章や画像を生み出すということができる点で、大きなインパクトを持つ。このことから、構造生物学の分野でも生成 AI の活用が進んでいくことは想像に難くない。本論文では、生成 AI と構造生物学がどのような交わりを持つのかを考え、これまで人間に担われてきたタスクが AI によって加速化され、さらには、いずれ生成 AI がこれら人間の力と AI の力を統一化するという見通しに至った。

その上で、人間の進化を宇宙全体の流れの中で捉えるテイヤール・ド・シャルダンの思想が物事の展望を考える際の強力な羅針盤となることを鑑みて、生成 AI や構造生物学とテイヤール・ド・シャルダンの思想の交わりを考察した。テイヤール・ド・シャルダンは、人間は知性の進化によってバイオスフィアからヌースフィアに脱し、オメガ点に向かって歩んでいるとしている。私は、技術的特異点の概念を導入することで、ヌースフィアの始まりからオメガ点に到達するまでのプロセスをさらに二つの段階に分けて捉えることにした。第一段階は知識と AI が鍵になるレベルで、第二段階は知恵と生成 AI が鍵になるレベルである。そして、構造生物学において、低次の対象と高次の対象の互換性を生むものがまさに AI・生成 AI であり、このことを技術的特異点、ひいてはオメガ点へ向かう流れの中に位置付けた。

最後に、私が行っている核酸の構造解析と医薬品設計の研究は、不足している知識と知恵を提供するものであり、究極的には技術的特異点を超越し、オメガ点へ近接することが必然の目的であることを確認した上で、生成 AI が私の学びや研究に及ぼす具体的な影響を考察した。

1. はじめに

昨今 ChatGPT や Bard、DALL-E などの生成 AI の台頭が著しく、私の研究分野である構造生物学にも大きく影響を与えると容易に想像できる。そこで本論文では、構造生物学において生成 AI がどのような役割を担っていくのか考察し、そのことがテイヤール・ド・シャルダンの思想に照らしたときにどのような意味を持つのか検討する。その上で、私の学びや研究に対する具体的な影響を考える。まずは論考の前提として、生成 AI、構造生物学、テイヤール・ド・シャルダンの思想という各トピックについて簡単に総括する。

1-1. 生成 AI

AI (人工知能) は人間の知能活動を機械上に再現したものであり、それを支える技術の一つが機械学習である。機械学習は特定の作業をこなせるように人間が機械に学習をさせることであり、その形態の一つに深層学習がある。人間の脳は神経細胞が繋がってネットワークを形成しているが、深層学習では、この状態を数理モデル化してニューラルネットワークを構築する。最も典型的なのは畳み込みニューラルネットワークという方法で、従来から AI に用いられている。一方、生成 AI ではトランスフォーマーという深層学習の方法を用いている。これは、ニューラルネットワーク中のどの情報をどのように使うか自体を学習できるアテンションという機構を大規模に重ねた方法である。^[1] それによって、従来の AI が学習済みデータの中から答えを選択・予測するだけだったのに対し、生成 AI は学習済みデータから新たな答えを生み出せる、つまり 0 から 1 を生み出せるようになった。

1-2. 構造生物学

構造生物学は、タンパク質や核酸 (DNA や RNA) など生物の体を構成する分子の立体的な構造を調べることで、その分子が持つ機能を理解しようとする分野である。例えば、はさみに似た形のタンパク質が本当に標的となる物質を切断するように、分子の形と働きは密接に関連しており、形が分かれば働きが分かる。一方、ある働きを持つためにどのような形であれば良いか逆算することもでき、医薬品のデザインなどに応用される。このように医薬品を構造情報に基づいて設計する手法を Structure-Based Drug Design (SBDD) といい、効率的な創薬が可能になる。

1-3. テイヤール・ド・シャルダンの思想

自然科学における進化論では、生物は長い時間をかけて次第に変化 (進化) してきたと考え、ヒトはサルから進化したとされている。一方、キリスト教では、旧約聖書の創世記を文字通り解釈すると、あらゆる生物種と特別な存在である人間が神に創造されたとされている。^[2] これらは一見相容れない考え方であり、チャールズ・ダーウィンが進化論を提唱した頃、キリスト教の聖職者はこれを否定した。しかし現代では、聖書は信仰の真理を語るもので、生物の進化という自然科学的な真理とは矛盾しないと考えられている。このような自然科学とキリスト教を共存させる考え方の先駆けとなったのがテイヤール・ド・シャルダンである。彼はキリスト教の司祭であると同時に、古生物学・地質学を専門とする科学者でもあった。そのため、科学者の立場からは進化論を支持し、司祭の立場からは創造論を支持し、

進化の段階を三段階に分けることで、科学的な世界観とキリスト教的な世界観を弁証法的に統合し、独創的な世界観を提示した。その世界観は以下のようなものである。^{[3][4][5]}

はじめに素粒子や原子レベルでの物質の誕生や星の誕生という進化が起こった。つまり、宇宙全体の物質的な進化によって、地球が誕生する過程であり、この初期段階はジオスフィア（地圏）やフィジオスフィア（物理圏、物質圏）と呼ばれることがある。続いて起こった進化が進化論に基づく進化である。つまり、生物が単細胞性の共通祖先から膨大な年月をかけて徐々に変化し、複雑化していった過程であり、人間が登場した。この段階をバイオスフィア（生物圏）という。生物進化の過程では、特に脳などの神経組織の高度化が進み、人間は知性を持つようになった。そして、知性の一形態として思考力を獲得したことで、バイオスフィアを超え、新しい進化レベルであるヌースフィア（叡智圏、精神圏）へ上昇したとされている。現時点での人間は、思考力という唯一無二の能力を使い、技術を発達させ、ヌースフィアでの活動を拡大している中途であるが、その継続的な発展（進化）が極限まで達した状態をオメガ点という。オメガ点とは最上の叡智であり、この定められた最終到達地点へ向かうように、拒むことのできない力に導かれ、その帰結として人間がますます一体化していくとされている。拒むことのできない力とは、被造物の内に働く神のエネルギー、愛の力である。ゆえにオメガ点では、キリストの再臨による救済が起き、宇宙・人間が神そのものと一致するようになるのであり、そこに向かって人間は突き動かされている。

以上のように、テイヤール・ド・シャルダンとは、肉体的な進化のみを扱う進化論に宇宙全体での流れとオメガ点という精神世界を取り入れることで、対立的であった科学の世界観とキリスト教の世界観をアウフヘーベンし、キリスト教的進化論という思想を確立した。

2. 生成 AI と構造生物学の交わり

生命の根幹の化学反応の一つにセントラルドグマがある。これは、DNA に保存されている遺伝情報（塩基配列）が RNA に一旦コピーされた後、その情報を設計図としてアミノ酸が並べられ、タンパク質が合成されるという一連の反応である。このように、塩基の並び方が分子の形や働きを決める設計図となっており、構造生物学の研究にも欠かせない。さらに、塩基配列やアミノ酸配列は文字列、分子の形は画像として捉えられるので、文字や画像の出入力が得意な生成 AI と構造生物学の親和性は非常に高いと考えられる。そこで以下では、生成 AI と構造生物学の関係と研究の進展具合を構造生物学の二つの対象であるタンパク質と核酸のそれぞれについて述べる。

2-1. タンパク質

タンパク質はアミノ酸が多数結合した分子で、一次構造、二次構造、三次構造、四次構造という四階層の構造を取る。一次構造はアミノ酸配列、二次構造は部分的な立体構造、三次構造は全体的な立体構造、四次構造は三次構造を形成したタンパク質分子同士の複合体である。タンパク質を対象とする構造生物学の研究の目的は、二次構造や三次構造のような立体構造を明らかにすることである。そして SBDD においては、例えば、病気の原因のタンパク質がくぼんだ形だと分かれば、そのくぼみに作用する低分子化合物の医薬品を設計

するといったように、形から様々な情報を読み取る。この形から働きを見出す過程は現在は人間の手で行われている。

しかし近年、AIによる立体構造予測プログラム AlphaFold2 が開発された。これは、アミノ酸配列（一次構造）を入力するだけで、その文字情報からタンパク質の立体構造（二次構造や三次構造）を高い精度で予測するプログラムである。^[6] 人間にはアミノ酸配列からそのタンパク質の形を想像することは不可能だが、AI では膨大なデータの学習によって可能になったのである。従来の構造生物学の手法で立体構造を調べるには、場合によっては数年かかるが、AlphaFold2 を使えばものの数分で形を予測できる。

以上のように、従来型 AI の一種である AlphaFold2 がアミノ酸配列という文字列だけで形を提示し、人間がその形を基に働きを判断するという一連の流れが確立しつつある。その上で私は、生成 AI がこの流れをより簡略にするだろうと考えている。生成 AI は答えの予測だけでなく、自ら新しい答えを作り出せるため、生成 AI が応用されれば、アミノ酸配列を入力しただけで、タンパク質の形もそのタンパク質の性質もそのタンパク質にある医薬品の標的となりそうな部位もその標的部位に結合しそうな化合物の設計もすぐに示してくれるようになるのではないか。つまり、人間にしかできなかったことも AI が担えるようになり、人間の負担が減り、生成 AI が提示した結果を検証するだけで良くなると考えられる。

なお、以下の図 1 は生成 AI とタンパク質の構造生物学の関係をまとめたものである。

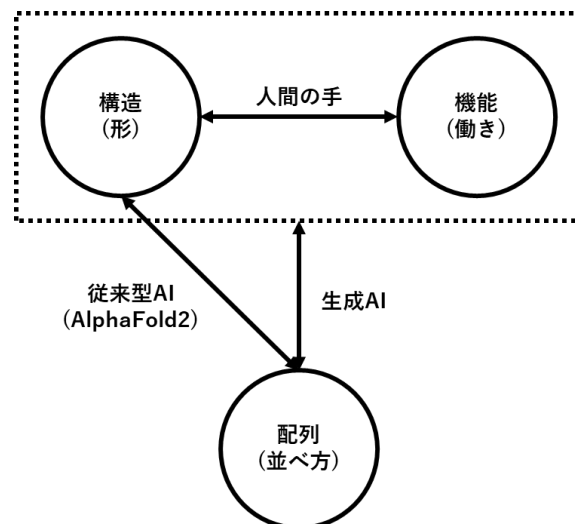


図 1. 生成 AI と構造生物学

2-2. 核酸

タンパク質や核酸の立体構造が解明されると、Protein Data Bank (PDB) というウェブサイトに登録・保存される。^[7] このサイトに登録されている分子は、タンパク質が 92.1%、タンパク質と核酸の複合体が 5.8%、核酸が 2.1%であり、核酸の構造解析がタンパク質よりも圧倒的に遅れているのが現状である。その背景には、生体内での反応を引き起こすのがタ

ンパク質であるため、そちらに主眼が置かれ、核酸に目が向けられてこなかったことが挙げられる。

しかし、低分子化合物を中心とする従来の医薬品は古くから研究が行われてきたため、新薬の開発件数が頭打ちになりつつあり、次世代の医薬品として、核酸でできた医薬品（核酸医薬品）が注目を集め始めている。このことは、2023年10月時点で日本において承認されている7個の核酸医薬品のうち5個が直近5年間に承認されたものである^[8]ことや2023年のノーベル生理学・医学賞に mRNA ワクチンが選ばれたことから明らかである。そのため、SBDD を行うために核酸の構造解析が求められている。

また、PDB に登録されている核酸の構造が少ないということは、AI に学習させるデータが少ないことを意味するため、タンパク質における AlphaFold2 のような信頼性の高い構造予測プログラムが確立されていない。その上で、核酸の構造はタンパク質の構造より多様性が低いので、今後構造の解明がさらに進展したとしても AI による高精度の予測が困難な可能性もある。

したがって、核酸では、AI による構造の提示と人間による機能の判断が生成 AI で一本化されるという展望は実現にかなりの時間を要すると考えられる。

3. テイヤール・ド・シャルダンの思想を踏まえた考察

テイヤール・ド・シャルダンは人間の進化を宇宙全体の流れの中に位置付けた。その思想は、様々な概念の理解を深める際、あるいは展望を考える際の重要な指針となるので、以下では、本論文の主題である生成 AI と構造生物学について、それぞれテイヤール・ド・シャルダンの思想に照らして考察する。

3-1. テイヤール・ド・シャルダンの思想と生成 AI の交わり

人間は知性の進化によってヌースフィアで発展を続けている。私はこの知性の進化をさらに二段階に分けられるのではないかと考える。

人間はヌースフィアの始まりから現在に至るまで様々な知識を蓄積し、その過程で AI を生み出した。レイ・カーツワイルによると、技術の成長（進化）は指数関数的に続き、その過程で AI が人間の知能を超える時点があるとされており、その時点を技術的特異点（シンギュラリティ）という。さらにレイ・カーツワイルは、技術的特異点をもたらす進化は「本質的にスピリチュアルな事業」（Kurzweil,2007,p521）であり、神の概念に向かうものだと捉えている。^[9] ゆえに、テイヤール・ド・シャルダンの思想と統一的に考えると、ヌースフィアの始まりからオメガ点（=神の概念）に至るまでの中間地点として技術的特異点を位置付けられるだろう。

私はヌースフィアの始まりから技術的特異点までの階層を第一の階層と考えた。この階層では人間によって行われてきた知識の蓄積が AI によって加速化すると考えられる。これは、従来型 AI が膨大な知識を組み合わせることで答えの予測を行っていることを踏まえている。続く技術的特異点からオメガ点までの階層を第二の階層と考えた。この階層に上昇する際にはあらゆる知識が蓄積されており、残すはそれらの知識を知恵によって高度に組み

合わせ、新たな技術革新を起こすことである。その際に活用されるのが、従来型 AI とは異なり、自ら新しい答えを創造できる、生成 AI ではないかと私は考える。したがって、第二の階層は、人間の知恵の爆発が起き、生成 AI がそれを補助する階層になると考えた。

まとめると、私は人間の知性を知識と知恵の 2 種類に分け、知性の進化レベルを知識が蓄積する階層と知恵が爆発する階層に分けて考えた。そして、前者の階層をヌースフィアの始まりから技術的特異点まで、後者の階層を技術的特異点からオメガ点までと考えた。

なお、以下の図 2 は生成 AI とテイヤール・ド・シャルダンの思想の関係をまとめたものである。

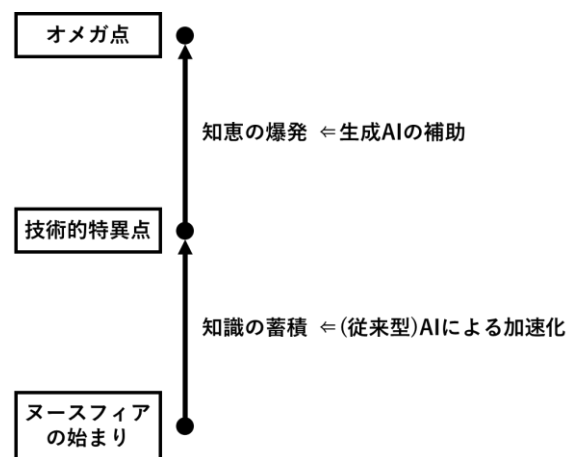


図 2. 生成 AI とテイヤール・ド・シャルダンの思想

3-2. テイヤール・ド・シャルダンの思想と構造生物学の交わり

テイヤール・ド・シャルダンは『物質の核心—わが魂の遍歴』で、あるものがより高次の集合に組み込まれると「そのままのものとしては（まさしく n 次+1 であるから）、決して直接には把握できないけれども、その存在の影響は多数の手がかりによって完全に知ることができる」（Teilhard, 1999, p42）とし、その知る能力を完全に手にしたとき新しい世界が現れると述べている。^[10] これは、例えば細胞に焦点を当てると動物を個体レベルで知覚することはできないし、素粒子のレベルでは原子・分子を知覚することはできないというように、低次のものと高次のものは直接的な互換性がなく、それらを結び付けるものは特別な力であるという意味である。そして、ヌースフィアにいる人間がオメガ点を直接知覚することはできないものの、神のエネルギーによって進化が導かれているため、より高次の精神世界を感じ、目指すことはできる。神の愛の力に導かれて人間の進化が完成すれば、つまり能力を完全に手にすれば、その精神世界が新しい宇宙として目前に出現すると言える。

この考えを構造生物学に適用すると、アミノ酸や塩基の配列（低次）から分子の構造や機能（高次）を直接知ることができないが、新しい技術（これが AI であることは後述する）があれば、予測することが可能だということであり、それが実現した先には生物学の新たな段階が待ち受けているということになる。分子の形と働きが完全に分かれば、生物の体内で

起こっている各種の化学反応を網羅的に捉えられ、まさに神がそうしているように、各分子の時間的・空間的な状態をモニタリングできるだろう。このことは、テイヤール・ド・シャルダンが『科学とキリスト』で、「生物学をある方向に徹底的に究めていくと、その導きによってわれわれは超越的なものの世界に浮上しうる」(Teilhard, 1971, p287) と述べている^[11]ことにも合致する。

なお、以下の図3は構造生物学とテイヤール・ド・シャルダンの思想の関係をまとめたものである。

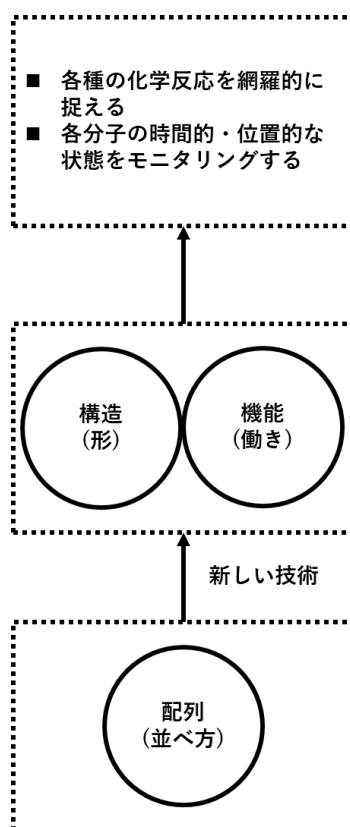


図3. 構造生物学とテイヤール・ド・シャルダンの思想

4. 私の学びと研究

ここまで、生成 AI、構造生物学、テイヤール・ド・シャルダンの思想という各トピックについてそれぞれの関係について考察してきた。以下では最後に、それら全てを統合する。それを踏まえた上で生成 AI が私の学びと研究に及ぼす影響について考察する。

4-1. 生成 AI+構造生物学+テイヤール・ド・シャルダンの思想

以下の図4のように各トピックをベン図で整理した。①の領域が2-1と2-2の生成 AI と構造生物学の関係で、②の領域が3-1の生成 AI とテイヤール・ド・シャルダンの思想の関係で、③の領域が3-2の構造生物学とテイヤール・ド・シャルダンの思想の関係である。以

下では④の領域についての考察を行うということである。

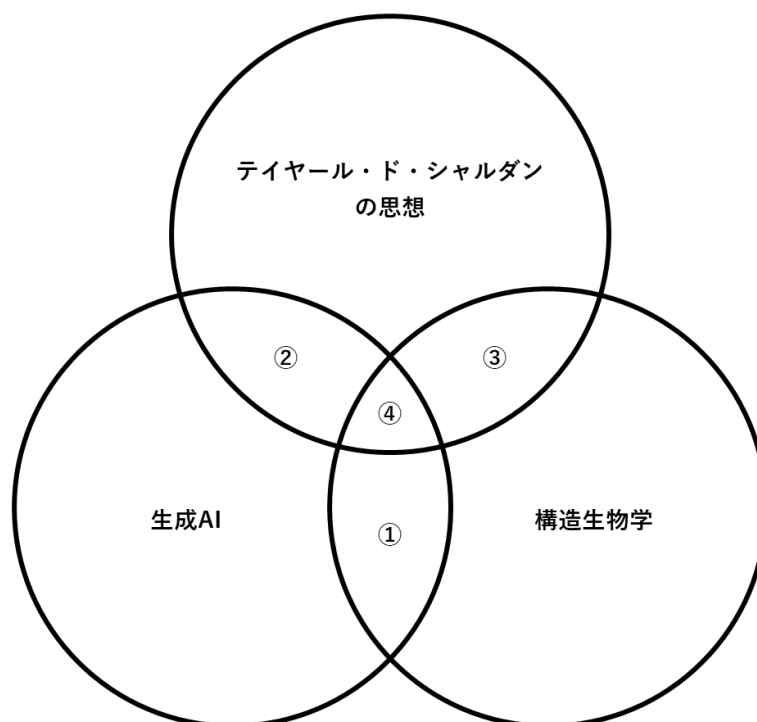


図 4.3つのトピックのベン図

2-1、2-2、3-2より、アミノ酸や塩基の配列という低次のものと分子の構造や機能という高次のものを結び付ける新しい技術が従来型 AI 及び生成 AI である。その上で 3-1 を適用すると、従来型 AI によって配列から構造が予測できるようになり、その精度が最大化した地点が構造生物学の技術的特異点であると言え、生成 AI によって配列から構造も機能もその先の医薬品設計も場合によっては網羅的な化学反応の理解も提示されるようになり、その補助によって生命現象を俯瞰できるようになった地点が構造生物学のオメガ点であると考えられる。

現時点のタンパク質の構造生物学は、人間による構造解析が成熟し、PDB にデータ（知識）が十分に蓄積された状態であり、従来型 AI (AlphaFold2) によるアミノ酸配列からの構造予測の精度がかなり高いので、技術的特異点を目前にしていると考えられる。今後生成 AI の登場でオメガ点へ向かうと想定される。

一方、現時点の核酸の構造生物学は、未だ人間による構造解析が遅れているため、PDB にデータが不足しており、そのために生成 AI はおろか従来型 AI も高性能なものを生み出せていない。ゆえに、人間による構造解析を多種多様な核酸分子についてますます推進し、知識を蓄積することが急務である。同時に、構造と機能の関係について理解を深めておくことも求められる。それらが成熟し、次第に従来型 AI や生成 AI が発達すれば、技術的特異点、ひいてはオメガ点への進化が加速するだろう。

なお、以下の図5は全トピックを統合して整理したものである。

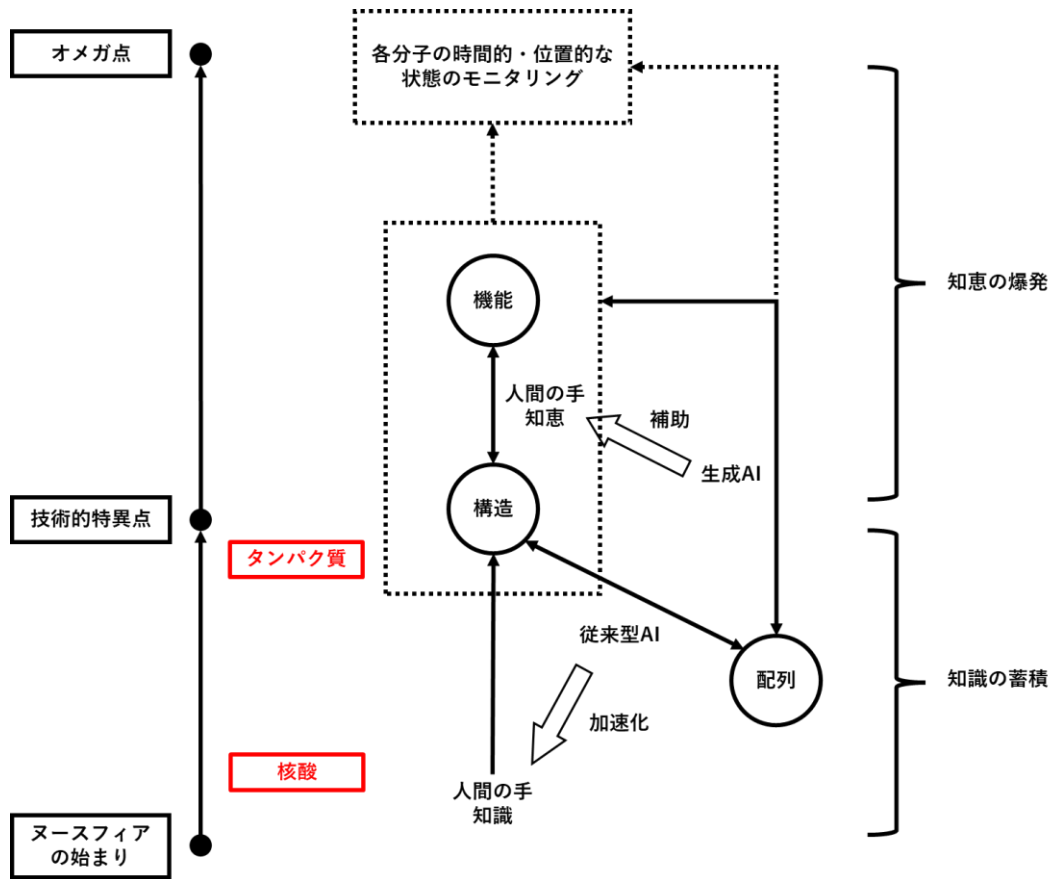


図5. 生成 AI、構造生物学、テイヤール・ド・シャルダンの思想の統合

4-2. 生成 AI が私の学びと研究に及ぼす影響

私は構造生物学の中で、特に核酸の構造解析と SBDD の手法による医薬品設計を研究している。そして、構造生物学における生成 AI は、人間では成し得なかった配列と構造・機能との間を結び付けられるため、技術的特異点を超越し、オメガ点に近接するためのパートナーとなるポテンシャルを秘めている。ただし、核酸の場合は知識も知恵も成熟していないので、それを補うのが私の研究である。

このように、生成 AI は知恵の行使を補助するものであるが、時に誤った情報を提供することもある。神が地球上を治めることを人間に任せているが、人間を監督することで間接的に地球上全体を統べていることと同様に、生成 AI によって提示された答えを人間が吟味し、検証することが絶対的に必要である。そのためには、人間自身が正しい知識・知恵を持っていなければならない。つまり、生成 AI は研究を効率化できるという良い影響を与えるが、妄信してはならないという負の側面も持ち、自己の学びに対して、研鑽を怠らないようにすべきであるという戒めと生成 AI を正しく運用するリテラシーを高めておくべきだという戒めを与える。このためには、生成 AI を使用する際に、生成 AI が得意なことと苦手な

こと、生成 AI に任せても支障のないことなどをよく見極めておくこと、言うなれば新しい形の知恵を得ることが必要である。また、研究の過程では、正確な知識を提供しなければ、誤ったデータを生成 AI が学習することになり、必然的に誤った答えが創造されてしまい、嘘に嘘を重ねるようなことになってしまう。生成 AI が生み出され、知性が進化する過程は、神の愛の力で導かれているものであるから、人のためになるべきである。私の研究は医薬品開発という人の命を救うための研究であるので、この方向性は間違っていないだろう。

整理すると以下のようなになる。生成 AI は私の学びに対して、正しい知識・知恵を習得する必要性の痛感、そのような自己研鑽を怠らないような精神性、生成 AI を正しく運用するリテラシーを高める意欲を与えるという影響を及ぼす。また、生成 AI は私の研究に対して、人間ができない部分を補助して効率的に研究を進める力、正確で倫理的な知識を構築する責任感、人の命を救うという決心の確定を与えるという影響を及ぼす。

5. おわりに

本論文では、構造生物学における生成 AI の役割、テイヤール・ド・シャルダンの思想を踏まえた際の意味、私自身の学びや研究に対する影響を順を追って考察してきた。

生成 AI は従来型 AI による構造の予測と人間による機能の判断を一本化するように活用されると考えられ、このことは、テイヤール・ド・シャルダンの思想を踏まえると、技術的特異点を超越し、オメガ点へ近接する知性の進化そのものであると考えられた。そしてオメガ点という超越的精神世界に進化していく大きな力の中で、生成 AI は真っ当な知性を獲得するための学び・研究を行うよう私を促している。

文献

- [1] Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, L., & Polosukhin, I. (2017). Attention Is All You Need. *ArXiv*.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.03762>
- [2] 創世記, 第1章第20節-第31節.
- [3] Simpson, R. (1999). The Biosphere BY VLADIMIR I. VERNADSKY. *Environmental Conservation*, 26(3), 236-241.
- [4] 中富清和. (2022). 第7回国際科学会議 (モスクワ大学) と書評について. *フランス哲学・思想研究*. 27. 276-287.
- [5] Teilhard, P. (1971). テイヤール・ド・シャルダン著作集1 現象としての人間(美田稔, Trans.). みすず書房.
- [6] Mirdita, M., Schütze, K., Moriwaki, Y., Heo, L., Ovchinnikov, S., & Steinegger, M. (2022). ColabFold: making protein folding accessible to all. *Nature methods*, 19(6), 679-682.
- [7] Berman, H. M., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T. N., Weissig, H., Shindyalov, I. N., & Bourne, P. E. (2000). The Protein Data Bank. *Nucleic acids research*, 28(1), 235-242.
- [8] 国立医薬品食品衛生研究所遺伝子医薬部第2室. (2023, October 4). 日米欧で承認された核酸医薬品. 国立医薬品食品衛生研究所遺伝子医薬部ホームページ.
<https://www.nihs.go.jp/mtgt/pdf/section2-1.pdf>
- [9] Kurzweil, R. (2007). ポスト・ヒューマン誕生 コンピュータが人類の知性を超えるとき(井上健, Trans.). NHK 出版.
- [10] Teilhard, P. (1999). 物質の核心ーわが魂の遍歴(美田稔, Trans.; 再版). オリエンズ宗教研究所.
- [11] Teilhard, P. (1971). テイヤール・ド・シャルダン著作集9 科学とキリスト(渡辺義愛, Trans.). みすず書房.