

第2回 AI ロボット駆動科学研究会 実施レポート

< 2024.10/28 開催 >

AI ロボット駆動科学イニシアティブ設立準備事務局

2024.11.29 発行

目次

◆開催概要	3
◆講演概要	4
— 竹内 一郎氏	4
— 小野 寛太氏	5
— 松本 佳子氏	6
— 熊田 佳菜子氏	7
— 田村 亮氏	8
— 高木 志郎氏	9
— 田中 信行氏	10
— 浅野 悠紀氏	11
— 境野 翔氏	12

■ 開催概要

第2回 AI ロボット駆動科学研究会が2024年10月28日に東京大学 鉄門記念講堂にて開催された。

主催： ・JST ムーンショット型研究開発事業
－「人とAIロボットの創造的共進化によるサイエンス開拓」(原田香奈子 PM)

協力： ・JST 未来社会創造事業
－「ロボティックバイオロジーによる生命科学の加速」(高橋恒一代表)
－「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」(長藤圭介代表)
・JST ムーンショット型研究開発事業
－「人と融和して知の創造・越境をするAIロボット」(牛久祥孝 PM)

『AI ロボット駆動科学』とは、AIと実験ロボットを利用して科学研究プロセスを再定義しようとする新しい科学的方法論。今回の研究会は、AIとロボット技術を組み合わせた科学研究の最新動向について講演が行われた。プログラムは以下の通り。

■ キーノートスピーカー:

- ・ 竹内 一郎 (名古屋大学 大学院工学研究科/理化学研究所 革新知能統合研究センター)
「AI・ロボットによる研究開発プロセス革新の現状と課題」

■ 招待講演:

- ・ 小野 寛太 (大阪大学 大学院工学研究科)
「AI・ロボットによる研究開発プロセス革新の現状と課題」
- ・ 松本 佳子 (エーザイ株式会社)
「創薬研究現場で人との協働が可能な細胞培養実験ロボット ICHIRO の開発」
- ・ 熊田佳菜子 (産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター)
「有機合成反応の条件予測システムの構築と自動実験による検証」
- ・ 田村亮 (国立研究開発法人 物質・材料研究機構)「自律駆動型研究を支援するミドルウェア NIMO」
- ・ 高木 志郎 (独立研究者)「集团的予測符号化による科学のモデル化」
- ・ 田中信行 (理化学研究所 生命機能科学研究センター)「自動化による科学と自動化の科学」
- ・ 浅野悠紀 (東京大学 大学院工学系研究科)
「ロボティクスによるポリマー材料開発の自律実験システム」
- ・ 境野翔 (筑波大学)「素早く巧みな動作を実現する模倣学習」

1. 竹内 一郎（名古屋大学 大学院工学研究科／理化学研究所 革新知能統合研究センター）

「基調講演：AI・ロボットによる研究開発プロセス革新の現状と課題」

講演の概要は以下の通りである。

- 科学研究のプロセスは、仮説生成、予測、実験、知識獲得のループで構成されている。このプロセス全体を AI とロボット技術で自律化することで、研究の効率化と革新が期待されている。AI は膨大なデータを統合して分析する能力を活かし、複雑な仮説を生成し、ロボットはエクストリームな環境でも実験を遂行する能力を持つ。このように、人間だけでは達成が困難だった新たな科学的発見が可能になるとされている。
- 科学研究で扱うデータには、実験条件を示すラベルなしデータと、実験結果を表すラベルありデータが含まれるが、ラベルありデータは取得に多大なコストがかかるという課題がある。この問題を解決するため、データオーグメンテーションの技術を活用し、既存のデータを拡張することでデータ不足を補う手法が試みられている。また、深層学習による潜在空間を活用することで、データの効率的な利用が進み、これまで不可能だった領域への適用が進展している。
- 仮説生成の分野では、AI がシンボリックリグレッションや機械学習を活用して、新しい仮説を提案する技術が注目されている。既存のデータ範囲内での知見を広げる内挿と、範囲外で新たな仮説を生成する外挿の両方において、AI の活用が鍵となる。特に、外挿の分野では、従来のアプローチでは到達困難だった科学的発見が期待されている一方で、技術的な課題も多く、さらなる研究が必要である。
- 実験計画においては、ベイズ最適化を中心とした手法が導入されており、実験の効率化が図られている。例えば、シミュレーションとロボット実験を組み合わせることで、最も有望な条件を事前に予測し、それに基づいた実験を行うことでコストを削減しつつ精度を向上させることが可能となる。また、AI を活用することで従来の手動での試行錯誤を減らし、研究者の負担を軽減しつつ、研究開発のペースを加速する可能性が指摘された。

[【発表資料を閲覧】](#) ※一部非公開のため編集済み

2. 小野 寛太（大阪大学 大学院工学研究科）

「AI・ロボットによる研究開発プロセス革新の現状と課題」

講演の概要は以下の通りである。

- 科学研究において、自律駆動型の実験システムを構築することが注目されている。これにより、実験計画からデータ取得、解析までのループを効率的に回し、新しい科学的知見を得ることが可能になると期待されている。特に材料科学の分野では、実験の自動化を通じて、知識獲得と次の実験計画を繰り返すプロセスが研究の中心となっている。
- 実験自動化の課題として、既存の大型システムの高額なコストや汎用性の欠如が挙げられる。これらのシステムは特定の用途に最適化されているが、多様な実験に対応する柔軟性が欠けている。また、導入や運用が複雑であり、小規模な研究室や若手研究者には不向きであると指摘された。このため、コンパクトでDIY的な自律型実験システムの開発が求められている。
- 実験システムの設計では、ロボットによる操作の精密性と再現性が重要な要素となる。例えば、粉体の粉碎や混合といった一見単純な操作でも、力の制御やセンサーによる状態のフィードバックが必要である。これにより、人間が手動で行った場合よりも高い精度と再現性が実現できる。小野氏の研究室では、力制御や音響信号、画像認識技術を組み合わせたロボットシステムを開発し、これを実験プロセスに適用している。
- コンパクトな自律型システムの構築は、再現性が高く効率的な実験を実現するだけでなく、次世代の研究者を育成するための教育的価値も高いとされる。モジュール型のシステムにより、各要素を柔軟に組み合わせることで、多様な実験に対応可能な仕組みを作ることが可能である。また、コードやCADデータの公開を通じて、若手研究者や他の研究機関とのコラボレーションを促進する取り組みも進められている。

[【発表資料を閲覧】](#)

3. 松本 佳子（エーザイ株式会社）

「創薬研究現場で人との協働が可能な細胞培養実験ロボット ICHIRO の開発」

講演の概要は以下の通りである。

- エーザイでは、AI 創薬研究におけるデータ創出力の質と量の向上を目指し、一連の細胞培養実験を自動化するロボットシステム「ICHIRO」を開発した。研究現場では依然として手作業による実験が多いため、ロボット実験への移行を円滑にする目的で、研究員と同じ器材を用いて、同じ空間で実験を行うロボットシステムを目指した。
- ICHIRO の開発では、上記の理由からヒト協働型の双腕ロボットを選択した。また、創薬研究基盤として複数種類の細胞の実験に対応するための試薬交換機能、週末に無人で実験準備から片付けまでを行うための無人搬送車の活用、実験 ID 管理、位置ずれエラー回避のための画像認識などを仕様に盛り込み、ロボットシステムインテグレーターの日立ハイテクと共に、細胞培養の一連の工程を自動化した。
- ICHIRO は、研究員が手作業で行う実験を模倣するため、難しい動作も多く開発は困難を極めた。例えば消耗品の形状ばらつきによる動作の不安定性は、手先カメラによる画像認識で解決した。培養フラスコへの細胞播種では、個別動作プログラムの内容と工程の改良により、研究員に優る均一性を実現した。機器性能に起因する無人搬送車の停止精度不足や画像認識エラーは、エラー処理により対応した。また、細胞培養実験の汎用性と全体最適化の追求は、個別実験の非効率性を招いたため、高頻度実験を優先して工程を最適化し、実験時間を短縮した。
- ICHIRO の導入により、細胞培養実験における再現性の向上や実験記録の自動化が実現された。研究現場での運用においては、エラーのリスクに見合うロボット利用価値の提示や、改良維持コストの理解を得るためのロボット実験リテラシーの向上が課題である。創薬研究の効率化と AI 創薬の促進を目指して、ICHIRO は今後も進化を続ける。

【発表資料非公開】

4. 熊田 佳菜子（産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター）

「有機合成反応の条件予測システムの構築と自動実験による検証」

講演の概要は以下の通りである。

- 有機合成反応の効率的な進行を目指し、反応条件の予測システムと自動実験システムを連携させた自律型研究サイクルの構築が進められている。従来、反応条件の設定は研究者の知識や経験に依存していたが、AIによる予測とロボットによる自動実験を組み合わせることで、より高効率かつ再現性の高い研究が実現可能となることが目指されている。
- 本プロジェクトでは、まず反応条件の予測 AI モデルを構築した。このモデルは、化合物の構造を文字列（スマイルズ形式）、部分コード（フィンガープリント）、および二次元構造（分子グラフ）の3種類で表現し、それぞれの特徴を活かした予測を行う。各モデルはアンサンブル学習によって統合され、高精度の予測を可能にしている。また、これらの予測を自動実験システムと連携させることで、実験結果をフィードバックし、モデルの再構築を行う仕組みを整備中である。
- 実験システムは、反応モジュール、分析モジュール、制御コンピュータの3つのパートで構成されており、1日に約36本の実験を処理可能である。自動実験システムでは、実験開始からデータ解析、次の条件提案までを完全自律で実行する。これにより、従来の研究サイクルよりも約9倍の効率で実験が進行できることが確認された。
- 現時点では、予測モデルの精度は23.5%であり、さらなる向上が課題となっている。データ精査やモデルチューニングを進めることで、60~70%の精度向上を目指している。また、反応条件提案 AI システムを活用し、最適条件の効率的な探索を可能とすることで、有機合成研究の革新を目指している。今後、文献データの活用や大規模言語モデル（LLM）の導入により、さらに高度なシステムの構築を予定している。

【発表資料非公開】

5. 田村 亮（国立研究開発法人 物質・材料研究機構） 「自律駆動型研究を支援するミドルウェア NIMO」

講演の概要は以下の通りである。

- 田村氏は、自律駆動型の研究を促進するため、AI アルゴリズムとロボットを簡単に接続し、多様なアルゴリズムを活用できるミドルウェア「NIMO」を開発。このミドルウェアは、ベイズ最適化や、物性値空間を俯瞰して見るための探索アルゴリズムを含む複数の AI モデルを組み合わせることで、研究効率と柔軟性を向上させる仕組みを提供している。これにより、AI とロボットを用いた材料探索や自動化研究の可能性が大きく広がる。
- NIMO は、AI アルゴリズムを自由に切り替えながら利用できる設計が特徴。研究者は、従来の特定用途に限られたアルゴリズムの制約を克服し、創造的な研究を推進可能となる。特に、ベイズ最適化だけでなく、分布探索や無目的探索などの幅広いアルゴリズムを選択可能であり、研究ニーズに応じた最適なアプローチが実現できる。
- 実例として、電解液の最適化や水電解触媒の材料探索において、NIMO が使用された。例えば、従来ランダムに行われていた探索では数年を要するプロセスを、ベイズ最適化を利用することで数週間に短縮。また、探索空間を広範囲にわたって調査する無目的探索の手法により、新しい材料特性の発見が可能となった。このような柔軟な研究支援を通じて、特定の研究分野にとどまらず、多様な分野への応用が期待されている。
- システムの導入においては、研究者が設定する材料候補データベースを基盤として、ロボット実験の制御や結果のフィードバックを行う仕組みが構築されている。これにより、研究サイクルの完全自動化が実現可能となり、特に電気化学や材料開発などの分野での効率化が顕著に見られる。さらに、NIMO は GitHub でオープンソースとして公開されており、多くの研究者が利用可能である。

[【発表資料を閲覧】](#)

6. 高木 志郎（独立研究者）

「集団的予測符号化による科学のモデル化」

講演の概要は以下の通りである。

- 高木氏は、科学の活動を「集合的予測符号化（Collective Predictive Coding）」という視点でモデル化し、科学的知識がどのように生成され、進化していくのかを理論的に説明する新たな枠組みを提案した。この枠組みでは、複数のエージェントが観測データや内的仮説を基に、知識や理論の受容や拒否を繰り返し、最終的に科学共同体全体として科学知識を生成するプロセスを符号化のプロセスとして捉えている。
- 提案された「CPCMS（Collective Predictive Coding Model of Science）」は、科学的進歩や知識の生成を定量的かつ統計的に記述するモデルである。科学者個人を「エージェント」として、彼らが持つ仮説や理論を「内的状態」として表現。各エージェントは観測データに基づいて新たな仮説を生成し、それを他のエージェントが受け入れるか否かを判断するという社会的なプロセスを繰り返す。このような集団的な知識構築の枠組みを通じて、科学的知識が構成されていく過程として科学を捉える見方を提案した。
- CPCMS は、科学哲学における「社会的客観性」や「科学的進歩」といった概念の再解釈を可能にする枠組みである。従来、科学的知識が社会的に構成されると考える主張では科学共同体全体の相互批判や多様性が重要であることが指摘されてきたが、CPCMS はこれらの重要性を統計的視点から議論することを可能にする。特に、異質性を持つエージェント間の相互作用が、科学的知識の生成において不可欠であることを理論的に示している。また、科学革命をパラメータ空間における非連続的な変化としてモデル化することで、通常科学と異常科学の区別を新たな視点で表現できる可能性を提示している。
- 本モデルは、AI やロボットの科学活動への参入が科学の多様性や効率性に与える影響を分析する手段としても有用である。AI をエージェントとして統合的にモデル化することで、人間と AI が協働する科学の未来像を具体的に議論可能になる。また、AI が提供する高いサンプリング速度や精度が、科学的探究の効率化を促進する一方で、AI 特有の制約が科学共同体全体の知識形成に与える影響についても議論が行われた。高木氏は、AI と人間の協働が科学の進歩に貢献し得る一方で、科学設計の見直しが必要であると指摘している。
- 高木氏は最後に、科学の自動発展システムを目指す上で、CPCMS が一つの有力な出発点となる可能性を示唆した。科学活動を集合的かつ自律的な営みとしてモデル化することで、AI やロボットを含む次世代の科学設計や運営に向けた新しい議論の基盤を提供することが期待されるとして講演を締めくくった。

[【発表資料を閲覧】](#)

7. 田中 信行（理化学研究所 生命機能科学研究センター）

「自動化による科学と自動化の科学」

講演の概要は以下の通りである。

- 田中信行氏は、生命科学の分野において AI とロボット技術を活用し、人間に依存しない新たな科学研究の形を模索する取り組みを紹介した。特に、生命科学の動的性に対応し、リアルタイムでの観察・解析・実験が可能な自動化技術の重要性を強調した。
- 同氏の研究では、発生生物学を中心に、生物の動的な変化を捉えるための実験プロトコルをロボットと AI に適応させたシステムが開発されている。例えば、腎臓のような複雑な構造を発生させるプロセスを対象に、人間では不可能な分単位・秒単位のリアルタイム反応を捉えることで、新たな発見を促進する仕組みを構築している。
- 特に、探索のための自動化実験システムが注目される。これには、膨大な実験条件を効率よく探索する AI モデルの導入や、生命科学の階層的対象（分子、細胞、組織、個体）に対応するデジタル実験装置の導入が含まれる。このシステムでは、動的変化に対応するアクティブな制御が可能で、従来の固定的なプロトコルとは異なる柔軟性を持つ。
- ロボットを活用した実験設備も開発されており、標準化されたフォーマットだけでなく、細胞のライブ観察や動的変化への対応を重視した設計が進められている。さらに、AI が生成する知識を基にした研究のサイバー空間とフィジカル空間の統合が、科学研究の新たな形を実現する道筋となっている。
- 最終的には、生命科学における「自動化による科学」と「自動化の科学」を統合し、科学研究そのものを進化させることを目指している。これにより、膨大な探索を可能とするだけでなく、従来の人間中心の研究方法を越えた、新たなアプローチが実現される。

[【発表資料を閲覧】](#)

8. 浅野 悠紀（東京大学 大学院工学系研究科）

「ロボティクスによるポリマー材料開発の自律実験システム」

講演の概要は以下の通りである。

- 浅野悠紀氏は、ポリマー材料開発においてロボティクス技術を活用し、自律的な研究サイクルを構築する取り組みを紹介した。ロボットアームを中心とした実験自動化システムを用いて、材料合成から特性評価までの一連の工程を効率化し、高精度で再現性のある研究環境を実現することを目指している。
- 講演では、ポリマー材料開発における自動化の具体例として、プレス工程と測定工程の自動化が取り上げられた。プレス工程では、ポリマーフィルムの成形をロボットによって自動化し、フィルムの厚みや形状をリアルタイムで評価する仕組みを構築。このシステムは、ロボット操作のプレスプレートや装置制御ソフトウェアのインテグレーションによって、ロボットと装置からなる複雑な実験工程の自動化を可能にしている。
- 測定工程では、誘電率や電気特性を測定する装置にロボットを導入し、フィルムの自動セットアップと測定を実現した。これにより、人間による手作業に比べて遜色のない測定精度を保ちつつ、工程全体の効率化が図られている。また、フィルム挿入の正確性を確保するため、ロボット力センサによる接触検知を実装し測定の信頼性を高めている。
- 浅野氏は、自動化だけでなく、自律的な最適化にも取り組んでいる。具体的には、プレス工程の温度や時間といったパラメータを最適化するため、ベイズ最適化を活用して次の実験条件を探索するシステムを開発。このシステムの活用により、最適条件の発見が促進され、研究の効率性を飛躍的に向上させていくことが期待される。
- 将来的には、全工程を統合した自律的な研究サイクルを実現することが目指されている。これにより、ポリマー材料開発における研究のスピードと精度がさらに向上するだけでなく、多様な分野への応用も期待されている。浅野氏の取り組みは、材料開発の自動化と自律化の新たな可能性を切り開く重要な試みである。

[【発表資料を閲覧】](#)

9. 境野 翔（筑波大学）

「素早く巧みな動作を実現する模倣学習」

講演の概要は以下の通りである。

- 境野翔氏は、ロボットが未知の物体や環境に適応しつつ、人間のように迅速かつ巧妙に動作を実現するための模倣学習の技術を開発している。本講演では、力制御を活用した柔軟な動作生成技術と、その模倣学習を用いたロボットシステムの構築について解説した。この研究は、特に汎用的なロボットが多様なタスクを高精度で遂行できるようにすることを目的としている。
- ロボット制御において、従来の位置制御では硬直した動作しか実現できない一方で、力制御を組み合わせることで柔軟性と適応性が向上する。本研究では、力制御を取り入れた「バイラテラル制御」に基づき、ロボットが人間の操作動作を学習し、それを再現可能とする技術を開発。この技術により、ロボットが初めて触れる物体でも適切に力を調整し、高度な接触操作を実現することが可能となった。
- 境野氏は、模倣学習のデータ収集において、単なる成功動作だけでなく、「惜しい失敗動作」も有効活用する新しいアプローチを採用。失敗動作から成功動作を導き出すための学習モデルを構築することで、少量のデータでも効率的な学習が可能となり、従来の方法に比べ成功率を大幅に向上させた。これにより、タスクに応じた柔軟な適応性を持つロボットの開発が進められている。
- 講演では、実際の応用例として、ホワイトボードの掃除やパンケーキの調理・運搬など、未知の環境や物体におけるロボットの動作デモが紹介された。これらのデモは、ロボットが事前に教えられていない状況でも柔軟に対応し、人間並みの速度と精度でタスクを遂行できることを示している。また、境野氏のシステムは専用ハードウェアを必要とせず、汎用ロボットで実現可能である点も特筆される。
- 今後の課題として、化学実験など極めて高い成功率（99.9%）が求められる分野への応用や、ロボットの動作モデルの解釈性向上が挙げられた。これらを実現するために、大規模モデルやフィードバック制御との統合が重要になると考えられている。境野氏は、模倣学習と力制御を活用した技術がロボティクス全体の可能性を大きく広げる基盤となると結論づけた。

[【発表資料を閲覧】](#) ※一部非公開のため編集済み