

研究開発項目

# 1. AI ロボット科学者の身体

## 2023年度までの進捗状況

### 1. 概要

これまで人間の科学者だけではできなかった理化学実験を実施するため、人間の身体能力を超えた器用さを備え、かつ人間の身体能力を超えて**正確・精密**な実験操作を行うための**AI ロボット科学者の身体**を開発します。

具体的には、(1) 自律的に探究を行う頭脳を搭載するための AI ロボットプラットフォーム、(2) AI ロボットプラットフォームに搭載するためのマイクロロボットツールの研究開発を行います。

### 2. これまでの主な成果

ライフサイエンス分野の実験では、顕微鏡下で微細かつ複雑な作業を行う必要があり、**熟練の科学者でも失敗**してしまう場合も多くあります。また、既存のロボット技術は、硬い物体に対する定型タスクの繰り返しは得意ですが、**モデル生物のような微小かつ柔軟なサンプルに対する非定型タスク**を苦手とします。

このプロジェクトでは、まず、**熟練の科学者の身体能力を超える操作**をロボットの遠隔操作や自動制御によって実現し、その後、その**実験をロボットが自ら考えて実行する(自律化する)ロボットAI と統合**します。現在は、AI との統合を想定したプラットフォームやマイクロロボットツールの試作を進めています。

#### (1) AI ロボットプラットフォーム (原田)

これまでに**サイエンス探求自律化**を研究するための AI ロボットプラットフォームを開発してきました。この AI ロボットプラットフォームでは、顕微鏡下に設置された実験対象物に対して、**機能の異なる4台のロボットアームが同時に複雑な操作を行うことができます**。このロボットにより、様々なモデル生物に対して、**高精度かつ複雑な実験操作を行うことができることを実証**しました。また、研究を加速するための**デジタルツイン(シミュレーター)**も開発

しています。ライフサイエンスの分野では、AI を訓練するためだけに大量に実験を行うことはできません。ロボットの自律化のための AI を効率的に研究する環境としてデジタルツインを提供しています。このロボットの制御技術は、様々なロボットに搭載可能な汎用的な技術です。



図 1-1 AI ロボットプラットフォーム



図 1-2 デジタルツイン (<https://aiscienceplatform.github.io/>)

#### (2) マイクロロボットツール (新井)

細胞のような微細かつ柔軟な実験対象物に対して人間の身体能力を超えて**正確・精密な実験操作**を行うため、様々なマイクロロボットツールを開発しています。例として、**様々な実験環境において、ロボットが自らの身体構造を変えて、所望のマニピュレーション性能をオンデマンドで構築**できるプラットフォーム: Modular-Robotic Extender (M-REx) を実現しました。その他、植物の根(直径約 100  $\mu\text{m}$ )から約 10  $\mu\text{m}$  の大きさの細胞を1個ずつ回収するためのマイクロロボットツール、生体組織から AI によって狙った場所の細胞を採取するためのマイクロロボットツールなども開発中です。熟練科学者でも困難な微細操作をロボット化することにより**実験データの質の向上**にも貢献します。

#### EM Brake (Variable Stiffness Joint)      Reconfiguration

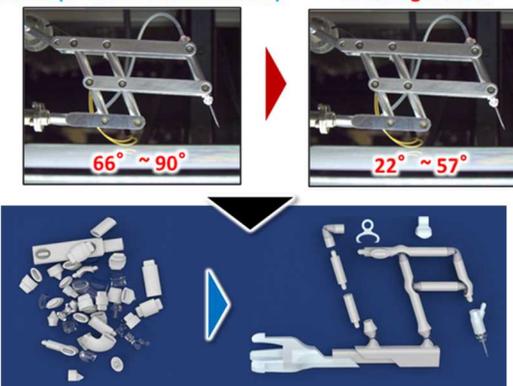


図 1-3 M-REx モジュール型マイクロロボットツール

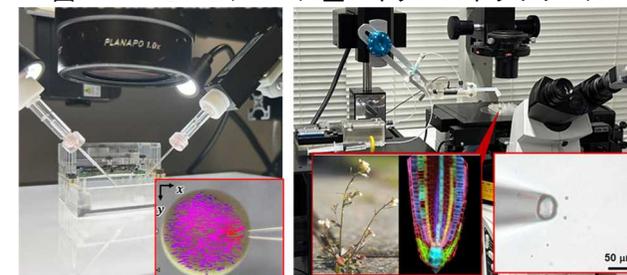


図 1-4 高精度細胞操作のためのマイクロロボットツール  
(左: 卵母細胞への刺入、右: 植物細胞の回収)

### 3. 今後の展開

引き続き、プラットフォーム及びロボットツールの改良とシステム統合を進めます。また、「研究開発項目(2) AI ロボット科学者の頭脳」で開発される AI との統合を進めることにより、**探究の自律化**への移行を目指していきます。更に「研究開発項目(3) AI ロボット科学者による理化学実験」において科学者と連携し、人間の科学者だけではできなかった理化学実験による新たな発見を行うことで AI ロボット科学者の貢献を示します。

研究開発項目

## 2. AI ロボット科学者の頭脳

### 2023年度までの進捗状況

#### 1. 概要

AI ロボット科学者が自ら考えて自律的にサイエンス探究を行うには、AI ロボット科学者のロボット身体が実世界との相互作用によって、新しい科学知識と技能を自ら獲得しながら、仮説を更新して探究する頭脳が必要になります。

プロジェクトでは、この頭脳の構成要素として、実験データを解釈して自ら新たな仮説を立てる科学 AI、ロボットデータを解釈して自ら新たな実験操作の戦略を立てるロボット AI、そしてそれらを AI ロボット科学者の頭脳として体系化するための数理基盤を開発します。

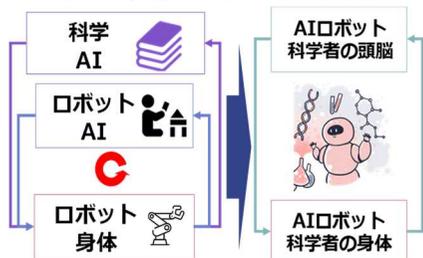


図 2-1 AI ロボット科学者の構成

#### 2. 2023年度までの成果

科学者が実際に行っている動物・植物の実験に応用できる形で要素技術の開発を行っています。

##### 科学 AI (竹内、森)

実験データを解釈して知識として習得し、実験の仮説を立てる科学 AI を開発しています。ライフサイエンス分野では、実験データの種類の非常に多いにも関わらず、実験サンプル数が少ないため、効率的な探究が必要となります。そこで、化合物探索を例として、様々な種類のデータ（化合物構造式や学術文献のデータベース、過去の実験結果）

から、有力な化合物の候補を自ら仮説として提案する AI を開発しました。シミュレーションを併用することにより、実験サンプル数が少なくても有望な仮説を立てることができるようになりました。また、科学者が気づかないような実験対象物のわずかな変化を定量的に把握する AI を開発しました。これにより、数ミクロンの気孔の開き具合、髪の毛の太さほどの根の成長率や微細血管網のわずかな閉塞、細胞の挙動などを瞬時に定量化できました。科学者が気づかないような、わずかな変化から新たな知識を得て、その知識をもとに仮説を更新することにより、AI ロボットならではの探究が可能になります。

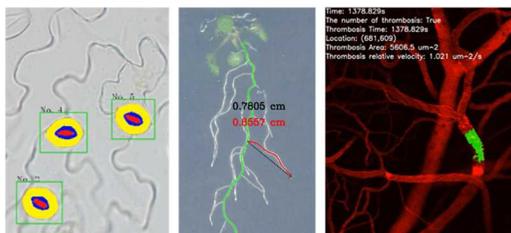


図 2-2 微細構造の変化を定量化（気孔、根、血管）

##### ロボット AI (谷口、岡田)

AI ロボット科学者が極限環境でも人間の介在なしに自ら探究を行うためには、新しい技能を自ら獲得して新たな実験操作の戦略を立てるロボット AI が必要です。特にライフサイエンスでは、タスクが頻繁に変わり、また、自然物である実験対象物のばらつきが大きいため、同じ動作の繰り返しでは対応できません。実験サンプル数も少ないため、操作を大量に学習して技能を学習することが困難です。そこで、少し教えただけで技能を学びとり、自らの身体構造や動作を工夫して、ロボットらしいやり方で臨機応変に操作するための手法を開発しています。

要素技術として、ロボットが自らの身体構造の構成を探索する AI を開発しました。例えば、ロボットが自らの腕を

組み立てなおすことで、最適な操作を実現することが可能になります。また、人間による熟練の操作を学び、少数の学習データからタスクを自律化する AI を開発しました。これにより、これまで自律化が困難であった物体の受け渡しのような両手操作を自律化することに成功しました。また、ロボットが物体を移動する場合に、移動先の位置が変わってもロボットが臨機応変に動作を生成する AI も開発しました。これにより、ロボットや物体の位置姿勢を人間が数値でプログラムしなくても、状況が変わっても、複雑な操作をロボットが自ら考えて自律的に実現できます。



図 2-3 両手での物体の受け渡し操作の自律化

##### 体系化のための数理基盤 (谷村、丸山、松原)

サイエンス探究とは、様々なデータを関連付け、秩序付けて有機的な体系を編み出すことです。膨大な可能性が存在する潜在空間の表現に数理基盤を与えることは、試行錯誤から得た知見を知能として体系化することにつながります。これまでに関係性を記述する抽象数学を活用して、汎用的な AI を数学的に厳密に表現する手法を開発してきました。化合物探索の例では、化合物の構造として正しく、かつ多様性のある化合物を仮説として生成する手法を開発しました。また、ロボットの制御においては、物理法則の視点で理にかなった動きを生成する手法を開発しました。

#### 3. 今後の展開

AI ロボット科学者の頭脳を AI ロボット科学者の身体と融合させることで、サイエンス探求を実現していきます。

研究開発項目

### 3. AI ロボット科学者によるサイエンス探求

#### 2023年度までの進捗状況

##### 1. 概要

2050年にAIロボット科学者を社会実装するためには、研究開発の初期段階から科学者との共同研究を実施し、サイエンス探究を具現化しながら研究を進める必要があります。プロジェクトでは、要素技術の応用によって研究が加速すると期待される3つの課題に取り組んでいます。

##### (1)「バイオスティミュラント」の開発 (魚住、有澤)

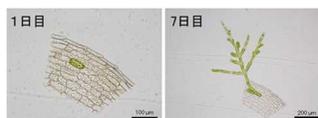
植物を気候変動などの環境変化に強くするため、農業に変わる植物の薬「バイオスティミュラント」を開発します。無数



にある候補からAIが有力な化合物を発見し、その化合物のバイオスティミュラントとしての性能を評価する実験をロボットによって精密に行い、植物のわずかな変化をAIで観察し、その結果を用いて更なる探索を行います。開発するAIやロボット技術は創薬にも応用可能です。

##### (2) 植物再生力の解明 (佐藤)

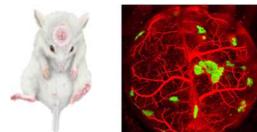
植物は驚異的な再生力を持つことが知られています。植物の再生力の謎を解明し、更には再生力を発揮させる培地を発見することで、食料の安定供給に繋げることが期待されます。そのために、植物の根の約10ミクロンの細胞をAIで狙いながら1細胞ずつ回収して解析し、



所望の細胞の状態を実現する培地を探索します。開発するAIやロボット技術は動植物の単一細胞解析に広く応用可能です。

##### (3) 未知の疾患の解明 (武部)

近代医療をもってしても致死率の高い未知の疾患がありますが、ミニ臓器とも呼ばれるオルガノイドを使えば、そのような未知の疾患の謎を解明して、予防・治療方法を開発することができます。オルガノイドに起こる目に見えないわずかな変化をAIが発見し、変化が起きた場所の細胞のみをロボットで回収して解析します。



さらには(1)～(3)に共通するライフサイエンスの課題として、限られたサンプル数で確実に実験結果を得るため、微細かつ柔軟なモデル生物や実験器具に対する複雑な操作をロボットで自律的に行う方法も開発します。

##### 2. これまでの主な成果

(1)の例としては、開発した科学AIを適用して、有機化合物の専門家の知見を取り入れつつ、文献や化合物の構造データなどの多様で膨大なデータから有望な有機化合物を仮説として提案する手法を開発しました。また、AIが提案した、これまで存在しなかった新規化合物を実際に合成することにも成功しました。さらには、開発したマイクロロボットツールによって、有機化合物のバイオスティミュラントとしての性能を科学者の技能によらず、高精度に計測することも可能になりました。これらの技術を統合することにより、効率的に植物の新しい薬を見つけることが可能になります。

(2)の例としては、開発した科学AIを応用して、髪の毛の太さほどの根の細胞に自動で「番地」を割り当て、その根から酵素によって分離される細胞一つ一つの動きを自動で追跡できるようになりました。さらには、開発したマイクロロボットツールにより、狙った1細胞のみを回収できるようになりました。これらの要素技術を統合することにより、1細胞レベルでどこで何が起こったかを解明する

ことが可能になり、その変化を加速するための培地の開発につながります。

(3)の例としては、開発した科学AIを応用して、微小血管内の100個以上の細胞のわずかな挙動の変化を約50個のパラメータを用いて自動で計測する手法を開発しました。これにより、同じ免疫細胞でも病気の段階によって独特の挙動を示すことを新たに発見しました。他の細胞とは挙動が異なる細胞をマイクロロボットツールによって採取することにより、1細胞レベルでいつ何が起こったかを解明することが可能になります。これは、例えば、病気に至る変化を抑制する薬の開発につながります。

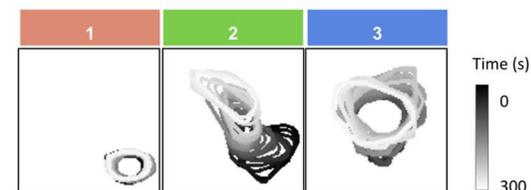


図3-1 新たに発見した免疫細胞の挙動

また、開発したロボットAIを用いて、様々な実験操作を自律化しました。例えば、ドリルを使う実験操作において、「ドリルの移動量を人間がプログラムしなくても、「貫通する前に停止する」という指示のみで、ロボットが自律的にタスクを完遂できる手法を開発しました。また、微小なサンプルを容器に移す操作も自律化しました。これにより、人間が介在できない宇宙などの極限環境でもロボットが自ら考えて実験操作を行うことが可能になります。

##### 3. 今後の展開

最先端のAIロボット要素技術を開発しながら、実際のサイエンス探究に応用しています。このように学術的貢献と社会実装を両立しながら総合知による共同研究を推進しています。更に統合を進め、AIロボットによって、これまで不可能であった探究を可能にしていきます。