



ムーンショット目標 3

2050年までに、AIとロボットの共進化により、自ら学習・行動し
人と共生するロボットを実現

終了報告書

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

東京大学 大学院医学系研究科 / 大学院工学系研究科



1. 研究開発プロジェクトの実施概要

(1) 研究開発プロジェクトの概要

本プロジェクトでは、ムーンショット目標 3 が掲げるターゲットである「2050 年までに、自然科学の領域において、自ら思考・行動し、自動的に科学的原理・解法の発見を目指す AI ロボットシステムを開発する。」「2030 年までに、特定の問題に対して自動的に科学的原理・解法の発見を目指す AI ロボットを開発する。」の実現を目指して実施した。

(2) 研究開発プロジェクトの実施概要

本プロジェクトでは、人間の研究者の能力を補完し、共に新しい科学領域を切り拓く「AI ロボット科学者」の創成を目的とした。対象領域をライフサイエンスに設定し、数理基盤、科学 AI、フィジカル AI、ロボット身体という多様な技術を統合することで、従来の自動化を超える新しい科学探求の枠組みを構築した。

研究開発では、個々の技術を高度化するだけでなく、要素技術を相互に連携させる統合を中心課題として位置付けた。PM 制度を活用し、研究者間で活発な共同研究を生み出す体制を確立したことで、学術的先端性と具体的な成果創出の両立を達成した。プロジェクトでは、人間と AI ロボット科学者が協調する未来を見据え、必要となる能力を以下の 3 点に整理した。

(i) 要領よく発見への最短距離を導く熟練 AI ロボット科学者: 多様で膨大な知識を活用して効率的に仮説を立案し、また、熟練者でも失敗しうる困難な実験を成功させながら、無駄を抑えて仮説を洗練する。

(ii) 僅かな変化も見逃さず狙い撃つ鋭い AI ロボット科学者: 人間では捉えにくい僅かな兆候も見逃さず、変化を予測したピンポイントの介入により、従来は不可能であった仮説検証を可能にし、新たな知見を獲得する。

(iii) 困難な環境でも変幻自在で適応、諦めない AI ロボット科学者: 制約条件の多い環境でも、ロボット自らが身体構造や動作を工夫して任務を遂行する。

これらの能力は、将来の国際競争力を左右する重要な技術群でもある。

「研究開発項目 1: 融合 AI 理論」では、科学 AI とフィジカル AI を統合するための共通数理基盤の構築に取り組んだ。圏論に基づくアプローチは近年国際的にも非常に注目されており、本プロジェクトはその先駆的研究として位置付けられる。また、その応用として、遺伝子制御ネットワーク仮説 AI の高速化を実証し、創薬・生命科学における活用可能性を広げた。

「研究開発項目 2: 次世代 AI ロボット」では、科学 AI・フィジカル AI・ロボット身体を統合し、次世代 AI ロボットの構築を進めた。化合物・文献・画像など多様なデータを扱う仮説 AI と解釈 AI、失敗からの回復や身体構造の適応を可能にするフィジカル AI、細胞レベルの操作を可能にするマイクロロボットツール群などを開発し、これらを組み合わせることで実験器具や多様なモデル生物を自律的に操作することができるプラットフォームを実現した。この成果は、国内外の AI ロボット駆動科学の拠点として発展可能な基盤となる。

「研究開発項目 3: サイエンス探求」では、これらの AI ロボットを実際の科学研究に適用

し、植物の成長・再生、ヒト疾患の機序解明、培地・バイオスティミュラント候補の発見、医薬品応用可能性の提示など、人間のみのサイエンス探求では得られなかった成果を創出した。これらは、科学的価値の高い新規知見としてトップ・サイエンティストによって検証され、研究の有効性が確認されている。

また、本プロジェクトで開発した要素技術は、後述の成果データ集計表のとおり、各専門分野のトップジャーナルおよびトップカンファレンスで多数発表され、多くの賞を受賞した。これらの成果は国内外から高い評価を受けており、数理学、AI、ロボット工学、ライフサイエンスといった多様な学術領域に広く波及している点は、国としての研究力強化の観点からも重要である。

プロジェクト期間を通じて、AI 技術・ロボット技術の国際的潮流は大きく変化したが、本プロジェクトはその変動を捉えて柔軟に研究を進展させ、自律的 AI ロボット科学者という独創的概念を世界に先駆けて具体化した。これらの成果は、ムーンショット目標 3 の達成に向けた大きなマイルストーンとなるだけでなく、日本が AI for Science の国際競争において主導的な位置を占めるための重要な基盤である。

(3) プロジェクトマネジメントの実施概要

本プロジェクトでは、PM・PM 補佐を核とし、4 名の SubPM を配置した多層的なマネジメント体制を整備した。対象領域が数理学・AI・ロボット工学・生命科学にまたがるため、領域固有の課題と横断的課題が混在しており、それらを統合的に管理できる体制が必要であった。Slack による随時の情報共有に加え、週次の PM 会議と月次のグループ・ミーティングを組み合わせることで、迅速な意思決定と進捗管理を実現した。

研究開発体制としては、要素技術に関する「数理基盤・AI」「Robot」、応用に関する「Plant」「Animal」の 4 グループを設置し、各グループが専門性に基づく検討を行いながら、PM 層が横断的視点で統合度を評価した。これにより、個々の研究の進展と要素技術の融合を同時に推進することが可能となった。また、PM・SubPM は分野間の対話を促す「橋渡し役」として機能し、異なる研究文化を持つ分野が協働できる環境を整備した。

プロジェクトマネジメントの柱の一つは「分野融合の仕組みづくり」であり、本プロジェクトは数理学・AI・ロボット・生命科学を実際に統合的に運用した稀有な例となった。研究者・学生は技術開発とサイエンス探求の双方を経験し、「科学を理解する工学研究者」「技術を理解する科学者」として成長し、我が国の研究力基盤の強化にも寄与している。

さらに、社会実装を見据え、企業や海外研究機関との連携も進めた。国際連携では、KTH をはじめとした複数機関との共同研究や情報共有により、研究成果の国際発信と人材育成を促進した。国内では、企業との共同研究が進み、成果の一部は製薬・バイオ産業との接続が始まっている。

こうした体制をプロジェクト終了後も継続的に発展させるため、他プロジェクト代表らと(一社)AIロボット駆動科学イニシアティブを設立し、研究者コミュニティ形成、若手育成、国際連携の持続など将来に向けた基盤整備を進めている。本プロジェクトで構築したマネジメント体制は、AI × ロボット × ライフサイエンスという複合領域における研究プロジェクトのモデルケースとして活用可能であり、我が国の科学技術力強化に資する持続的枠組みとなる。

2. 研究開発プロジェクトの実施内容

以下では、課題推進者をPIと呼ぶ。また、以下の研究開発は、必要に応じて当該機関の倫理審査の承認を経て実施された。

(1) 研究開発項目1:融合AI理論

研究開発課題1:サイエンスする知能の数理理論

実施内容:

圏論 (category theory) は 20 世紀中ごろに創始された数学の理論であり、図形を数で表して分類するトポロジーという数学分野から派生する形で生まれた。人間には想像できないような 4 次元空間やもっと高い次元の空間中の図形を曲げたり伸ばしたりしても変わらない図形の性質を数値で表したり計算したりするのがトポロジーの役割である。とくに、想像するのも難しい高次元の 2 つの図形が同じか違うか判定することがトポロジーの課題である。トポロジーの力を増強して、複雑なものごとの間の関係性を発見したり、ものごとの本質を抽出したり、「関係と関係の関係」のような捉えがたい性質を言い表したりするのが圏論の得意とするところである。

一方で、サイエンスというのは、複雑な事象を観察してデータ化し、データを整理し、データ間の規則性を見つけ、規則性を利用して未知の事象を予測し、予測を実験で検証して、予想が外れていたら規則を修正し、予測が当たったならその規則を利用して人間にとって望ましいものを作るのに役立てようとする営みである。

また、近年の AI の進歩は著しく、翻訳や作文や作曲など人間の知的な活動を AI が支援する、さらには肩代わりまでする事態が現れている。しかし、現代の AI は、膨大な学習データと大量の計算機パワーを必要としており、いわば「丸暗記の力技」にもものを言わせるやり方である。

本課題では、圏論と AI とを組み合わせることにより、いわば「一を聞いて十を知る」「少数の事例を学習するだけで本質を見抜き、普遍的に成り立つ規則性を見出し、科学的発見を助ける」ような AI ロボットを創ることを目指して研究を行った。

圏論は 3 種の矢からなる。1 つ目の矢は対象から対象への射 (arrow) である。例えば、英語の SV0 (主語・動詞・目的語) という構文は、動詞が主語と目的語を結ぶ射だと思えば圏になっている。2 つ目の矢は圏から別の圏への関手 (functor) である。SV0 という抽象的な構文から「I eat an orange」という具体的な英文に移すことは関手になっている。また、SV0 を「You drink an orange juice」に移すのは別の関手である。3 つ目の矢は関手から関手への自然変換 (natural transformation) である。今の例で言えば、「I eat an orange」を「You drink an orange juice」に移すのが自然変換である。これらは「何となくパターンが似ている」という曖昧な関係だが、それをきちんとした数学の言葉で表すのが圏論である。不思議なことだが、射・関手・自然変換という 3 種の矢があるとたいいていのものごとくが表現できる。

私たちはものごとを細かく分けて見たい場面や、詳細には目をつぶっておおざっぱに概要だけを捉えたい場面がある。そのようなズームアップ (近くに寄って詳細を見る) やズームダウン (遠目で大局を見る) という視点の移動も圏論の得意とす

るところである。科学的計測機器で測定されるデータは細かすぎて、全データを眺めても本質は見えないことがむしろふつうなので、これを関手を通して粗いデータの圏に移すことが望ましいし、人間は無意識のうちにこれを行っている。それが「要領を覚える」ということである。AI ではデータの粗視化はエンコーダと呼ばれ、詳細なデータに戻すことはデコーダと呼ばれる。本研究では、詳細な観測データを対象とし実験操作を射とするような圏から粗いデータ圏に移すエンコーダを関手とする科学実験操作の学習 AI の方法を提案した。

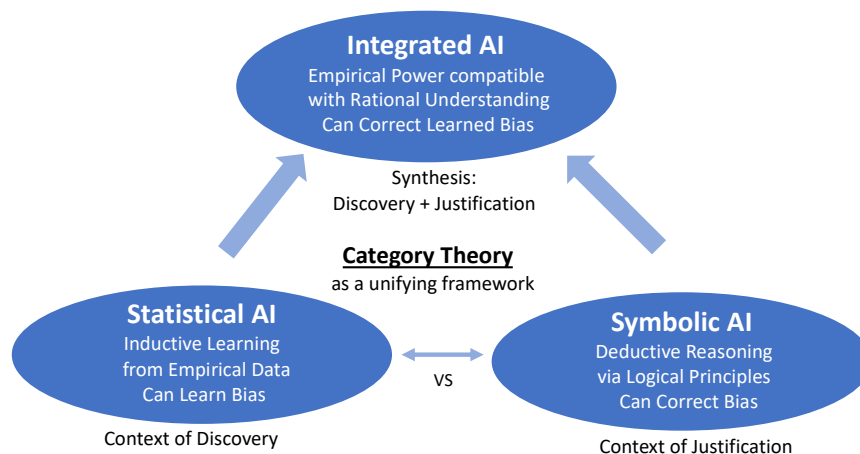
また、ある事象群（例えば、めまい、足の筋肉がつる、体温が高いなど）に共通の原因（この場合は熱中症）をつきとめたい状況や、これらから導かれる結果や対応策（この場合は体を冷やす）を知りたい状況は数多くある。そのような事象の因果関係をたどることも圏論で扱える問題である。最小の共通原因（原因として考えられることは漏れなく含んでいて、余計な要素は含んでいない）は圏論の極限 (limit) という概念で特徴づけられ、最大の共通結果（結果として考えられることをすべてを含み、無関係な要素は含んでいない）は圏論の余極限 (colimit) という概念で特徴づけられる。このように科学的因果関係をつきとめる方法を提案した。

課題推進者: 谷村 省吾 (名古屋大学)

研究開発課題 2 : 次世代融合 AI ロボティクスとサイエンスの圏論的基礎論

実施内容 :

本研究開発課題においては、圏論的人工知能・圏論的機械学習とその応用の研究開発を主として実施した。まず全体として本研究は、リソース勝負の側面が強い現代の AI 研究開発の限界を突破するため、下図のように、統計的・確率的な AI パラダイムと記号的・構造的な AI パラダイムの圏論的融合による次世代 AI パラダイム創出を目指したものである :

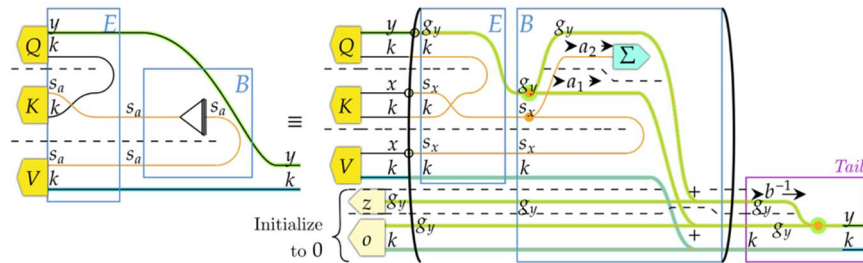


本研究開発課題における成果は多岐に渡るが、そのうちの幾つかについて以下で説明する。

(1) ニューラル・ストリング・ダイアグラムとそれによるトランスフォーマー高速化

ニューラル・ストリング・ダイアグラムとその変種であるニューラル・サーキット

ト・ダイアグラムの研究開発を行った。深層学習をユークリッド空間のような連続的な圏から離散的な圏へ拡張するための圏論的理論を開発した。またニューラルアーキテクチャのための圏論的な形式言語を開発した。それを用いて、下図のようなアテンション機構の圏論的定式化とそれに基づく改善により、トランスフォーマーの高速化を実現した。



さらにこれを用いて、神谷 PI との共同研究により、生命科学における遺伝子制御ネットワークのためのスフェリカル・アテンションの技術を開発した。これにより、遺伝子制御ネットワークのためのトランスフォーマーの高速化を実現した。特に実際に検証実験を実施することで高速化を実証した。抽象化・一般化・体系化のために用いられることの多い圏論が、非常に具体的な形で機械学習システム（トランスフォーマー）の高速化に応用可能であることを実証したのは、圏論研究としても機械学習研究としても非常に意義の大きな研究成果であると考えられる。

(2) 圏論と確率プログラミング言語を融合した圏論的深層学習フレームワーク

機械学習のためのストリング・ダイアグラムと確率プログラミング言語 Pyro を融合した圏論的深層学習フレームワークである DisCoPyro の研究開発を行い、実証実験において既存手法を凌駕するパフォーマンス向上が示された。特に、変分オートエンコーダなどへの応用を与えた。それにより、ベイジック手法と圏論的手法の融合の有効性を実際に具体的な検証実験を通じて実証した。さらに、プログラム合成や化合物合成など、一定の形式文法に基づく合成的構造に対して応用可能な汎用的融合 AI 手法を開発した。

(3) 群同変ニューラルネットを拡張した圏同変ニューラルネットと圏同変深層学習

群同変ニューラルネットワークは群論的対称性を利用した機械学習技術であり、化合物の構造を保存する機械学習などへの応用がある。自然や社会に存在する現実の対象・データは、下図のように、群論的対称性に留まらない圏論的対称性の構造を持っており、本研究では群同変ニューラルネットワークを圏論的に拡張することで、圏論的対称性構造を利用した圏同変ニューラルネットワーク (Category-Equivariant Neural Network; CENN) とそれを利用した圏同変深層学習 (Categorical Equivariant Deep Learning) の技術を開発した。

Category	Typical data	Arrows encode	Equivariance enforces
Group	invertible sym. data	e.g. isometries	global sym. invariance
Monoid	time, sequence	causal updates	consistency through time
Poset	hierarchy	order relations	hierarchical consistency
Lattice	logic/formal concept	entailment/meet/join	logical consistency
Graph	network	adjacency	message-passing symmetry
Sheaf	spatial field	region inclusion/rels.	local-to-global consistency
Groupoid	multi-orbit system	local symmetries	orbitwise invariance
General cat.	typed relations	compositional process	naturality wrt all relations

またその厳密な数学的基礎として圏同変ニューラルネットワークに対する同変普遍近似定理 (Categorical Equivariant Universal Approximation Theorem) を圏論的ラドン測度論などを基礎として定式化し証明した。さらに検証実験により、圏論的な複合的対称性と合成的構造に対する同変性が、既存手法を凌駕するパフォーマンス向上を生み出すことを実証した。

課題推進者：丸山 善宏 (名古屋大学)

研究開発課題 3：潜在構造発見の自立ロボットに向けた融合 AI

実施内容：

(1) 潜在構造を発見し活用する融合 AI マニピュレーション技術

自然科学領域における理化学実験を人間の作業者に代わって行うロボットには、環境内の物体の配置や変形する物体の内部構造を自ら学習し、熟練者の動作から隠れた戦略を発見して高度に模倣する AI 技術が必要である。本研究ではこの実現のため、東京大学の原田 PI、岡田 PI と連携し、共通のロボットプラットフォーム上で研究を推進した。

研究の中核としてマルチモーダルな世界モデル (Multimodal World Model) の構築を目指した。これは、画像、深度、力覚、触覚といった多様な観測情報 (マルチモーダル情報) を統合し、ロボットが直接観測できない内部の状態 (潜在状態空間) を同定する仕組みである。潜在状態空間の構成には変分オートエンコーダ (VAE) や再帰的状態空間モデル (RSSM) といった確率的生成モデルを用い、部分観測マルコフ決定過程 (POMDP) に基づく潜在的状態表現の獲得を目指した。これにより、潜在空間上での柔軟な行動計画や制御が可能になると見込み、研究を推進した。

具体的には、RSSM をマルチモーダル拡張した MRSSM を構築・実装し、卵殻切削タスクにおいて視覚と聴覚を融合した状態空間表現が得られることを確認した。しかし、この世界モデルのアプローチは、状態空間構成の学習と方策 (行動戦略) の学習の双方に学習サンプルが必要であり、その収束に相互依存性が生じるという課題が明らかになった。

そこで、よりデータ効率的に物体操作タスクに対応するため、潜在空間にニュートン力学の制約を加えた NewtonianVAE を活用した研究を推進した。この技術は、6D 姿勢制御やマルチビュー対応 (下図左)、さらには大規模言語モデルと融合した手順推論や箱詰め動作の実現にも応用され、実ロボット実験で有効性を示した。この成果は、国際会議 IROS 2023 のワークショップにおいて Best Paper Award を受賞した。

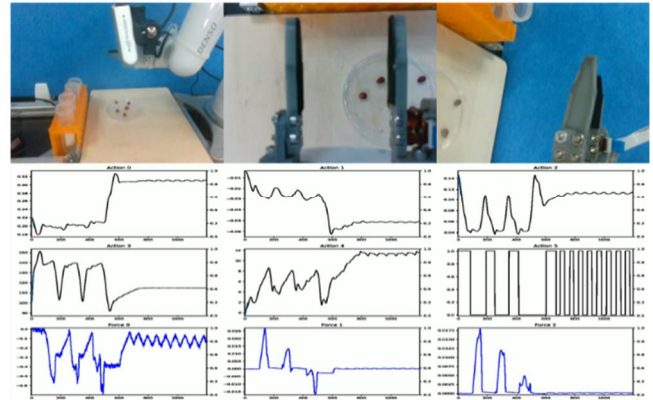
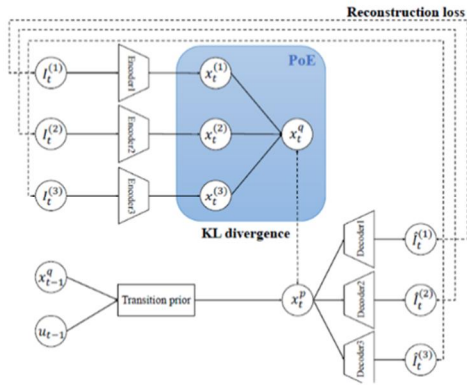


図: (左)マルチビューの NewtonianVAE のネットワークアーキテクチャ、(右)触覚情報を付与した複数視点の ACT による微小生体サンプル移動タスク

当初計画の卵殻切削タスクでは、視覚と聴覚(もしくは力覚)情報をフィードバックする周期的ベイズ強化学習の手法を開発し、タスク達成を確認した。また、頭蓋骨開頭タスクに関しては、潜在空間における螺旋状の学習制御手法を提案し、不確実な環境下での自動化精度向上を果たした(下図)。

プロジェクトを通じた議論から、世界モデルの学習と方策の学習の相互依存性を明確に意識したアプローチの重要性が明らかになった。この知見は、世界モデルと予測符号化に関する国際共著論文の出版や国際ワークショップの開催を通じた理論的理解の深化にも繋がった。

この議論を踏まえ、後半期は世界モデルの明示的な活用にこだわらず、Transformer に基づく模倣学習手法である ACT (Action Chunking Transformer) を活用するアプローチへと研究内容を拡張した。マイルストーンについては、PM の了解の下、主たるタスクを「微小生体サンプル移動タスク」に変更した。複数視点の画像情報を統合する ACT、さらに触覚情報を陽に考慮する Haptic-informed ACT を提案し、ロバストなタスク実行を実現した(下図右)。これらの研究はフィジカル AI 分野における先行的な取り組みであったと言えるだろう。

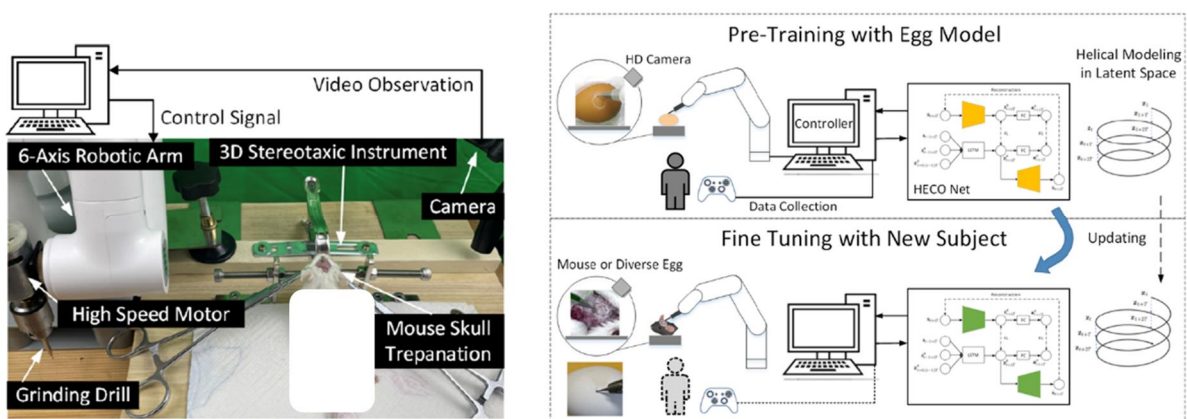


図: (左)頭蓋開頭タスクの外観図(右)2段階アーキテクチャに基づく Helical Control

(2) 潜在構造を活用した能動的探索手法

人間が科学的発見を行う際、理論的・演繹的な思考をガイドに、効率的に実験探索を行

う。ロボットが戦略を学習する際も同様に、対象物との最小限の相互作用で効率的に環境理解を得ることが期待される。この目的のため、潜在構造を活用した能動的探索手法の研究開発を進めた。

具体的には、RSSM(再帰的状态空間モデル)に基づき能動探索を行う Plan2Explorer のアプローチを、本研究で活用した NewtonianVAE へと導入した。NewtonianVAE が持つ明示的な物理的制約を活用し、能動探索の不確実性のモデル化には、ベイズ最適化(ガウス過程回帰を利用)の考え方を導入し、効率的なモデルの学習を進められる手法を開発した。

また、科学発見 AI ロボットによる実験計画からマニピュレーションまでを含んだ統合的な数理モデルを竹内 PI と協働し構築し、科学発見 AI ロボットの理論を開拓した。さらに、生成 AI が浸透した時代における新たな科学探求の理論として、予測符号化や能動推論を社会レベルに拡張する「CPC-MS (Collective Predictive Coding as a Model of Science)」を提案し、これからの自律駆動科学に向けた「生成科学」の道筋を示した。

課題推進者: 谷口 忠大(京都大学)

研究開発課題 4: 幾何学的深層学習によりサイエンスとデータを繋ぐ融合 AI

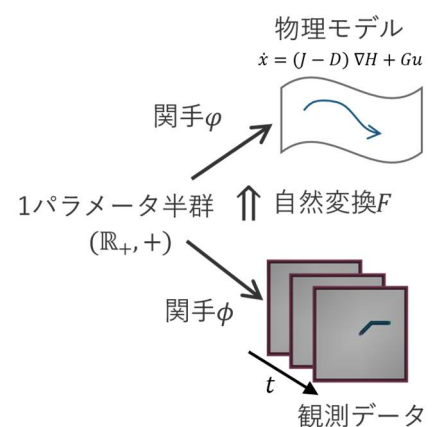
実施内容:

(1) 人の技能を AI ロボットの技能へとつなぐ技術基盤の開発

本課題は、人の技能という抽象的な概念を、AI ロボットの動作という具体的な系列に繋ぐことを目的とする。例えば、人間ならば誰も「物を掴む」という概念を理解できるが、それを力学的に物理モデルとして定義することは容易ではない。また、実際に得られる観測は画像列であり、やはり物理モデルとの間には隔りがある。これらの世界は異なる方法で記述されるため、それらを繋ぐために圏論を援用する。研究計画の前半として、観測データの世界と物理モデルの世界を繋ぐことに取り組んだ。

それぞれの世界は一種の圏であり、物理モデルや観測データは関手を用いた抽象的な力学系の具体化であるといえる。そして、観測データと物理モデルの間を自然変換で結ぶことができる。この自然変換は力学系として本質的な情報を保存する写像である(右図)。このような定式化を用いることで、観測データを物理モデルに変換し、その世界での制御を可能にする。このような定式化を用いなければ、画像列である観測データをそのまま制御するしかなく、何ら抽象的な概念の援用ができず、非効率であり解釈性もない。物理モデルにポート=ハミルトン系を用いることで、用いない場合に比べて数十倍の効率化・高精度化を実現した。

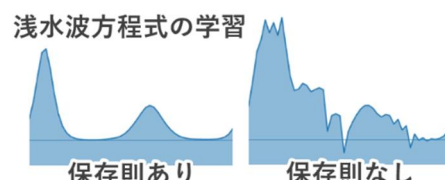
本課題の目標達成には、さらに動作という概念の世界に繋げる必要がある。この前段階として、自然言語を一階述語論理に変換して、画像が自然言語の指定を満たしているか判定するアルゴリズムを開発した。



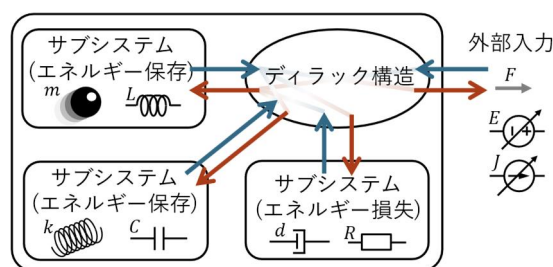
(2) AI ロボットによるサイエンスの技術基盤の開発

本課題におけるサイエンスとは、事象や対象に紐づいた物理的な性質や法則を解き明かすことによる科学的発見であると考えます。AI ロボットが科学的発見を行うための基盤として、幾何学的深層学習を援用し、データ駆動的な柔軟性と演繹的に定義された構造の両方を持つ数理モデルを設計した。この構造はエネルギー保存則のような物理法則と紐づいている。

仮にエネルギー保存則を仮定した数理モデルで、エネルギー散逸的な事象を学習すると、大きな誤差が生じる。また逆に、保存則を持つ事象を保存則のないモデルで学習すると、長期的な誤差の蓄積が起こる(右図)。よって、様々な構造を仮定したモデルを複数用意し、事象との当てはまり具合を見ることで、事象に紐づいた法則を発見することができる。これが基本的なアプローチであるが、現実的には仮定すべき法則(構造)が多すぎてスケールしない。



そこで構造をパラメータ化によって連続緩和し、データから学習することで、学習結果から構造を推定し、一度の学習で様々な構造の同定を可能にする深層学習手法を構築した。これはポアソン=ディラック定式化という解析力学の手法を援用した(右図)。これによって、様々な事象や対象について、力学系としてそれを構成する素子の特性とエネルギー動態やエネルギー流入出を同定することに成功した。



課題推進者: 松原 崇(北海道大学)

(2) 研究開発項目2:次世代 AI ロボット

研究開発課題 1:潜在構造発見の能動的探索 AI

実施内容:

(1) AI を用いた仮説生成のための方法開発

仮説生成に関しては、エンコーダとデコーダを併せ持つ潜在空間モデルを構築し、観測データの背後に潜む構造やパターンを抽出して、新たな科学的仮説を自動生成する枠組みを開発した。この潜在空間モデルは、高次元データの特徴を圧縮しつつ再構成可能な表現として扱うことを可能にし、データ駆動で多様かつ創造性のある仮説候補の生成に寄与した。特に本研究では、既存の仮説の単なる内挿にとどまらず、データ空間の未踏領域を探索しうる外挿的仮説生成を実現するためのモデル拡張を行い、未知領域に関する新規仮説の創出を可能にした点が重要である。

(2) AI によって生成された仮説の信頼性評価法開発

仮説評価については、AI が生成・選択する多数の仮説候補の中から信頼できる仮説を選び出すため、統計的有意性を厳密に評価する手法として選択的推論の発展に取り組んだ。選択的推論は、AI による仮説探索の過程で必然的に生じる選択バイア

スを補正し、P 値や信頼区間といった統計量を正しく算出するための方法である。本研究では、これまで単純な線形モデルや低次元設定でのみ適用可能であった選択的推論を、深層学習モデルなどの高性能かつ複雑な AI モデルにも適用可能とするための理論的・計算的拡張を行い、AI の探索結果を統計的に保証できる基盤技術を確立した。

(3) AI を用いた仮説検証方法開発

仮説検証の段階では、実験系の振る舞いを模擬する代理モデルとしてベイズモデルを導入し、限られた実験回数で効率的に最適条件を探索できるベイズ最適化の改良を進めた。本研究では、単純なベイズ最適化に加えて、制約条件が存在する系に対応する制約付きベイズ最適化、複数の指標を同時に最適化する多目的ベイズ最適化、異なる精度やコストを持つ複数のデータ源を統合するマルチフィデリティベイズ最適化など、高度な設定に対応した手法拡張を行い、より実験現場に即した柔軟で強力な仮説検証枠組みを構築した。

(4) AI を活用したバイオスティミュラント分子の探索・生成

実践応用として、魚住 PI、有澤 PI らとの連携により、本研究で開発した一連の AI 技術を農業・バイオ領域の重要課題であるバイオスティミュラント化合物の探索・生成問題に適用した。仮説生成・評価・検証を統合した AI パイプラインによって、従来手法では見落とされがちな化合物候補を効率的に抽出し、新規の有望化合物の提示に成功した。さらに、新井 PI との連携による実験ロボット技術による自動化、森 PI、佐藤 PI との連携によるコンピュータビジョンによる植物成長の定量評価など、複数の専門性をもつ PI との協調により、データ収集とモデル改良を半自動ループとして運用し、科学的発見の加速を実現した。

(5) AI を活用した好適培地の設計

もう 1 つの応用課題として、植物育成のための好適培地設計を対象とした。AI が培地組成と試薬配合比を提案し、植物研究を専門とする佐藤 PI らがその培地の有効性を実験的に検証するというループを繰り返すことで、既存の標準培地を上回る性能を示す新規培地の設計に成功した。複雑な化学組成空間における探索を AI が効率化し、新規培地の開発プロセスを大幅に短縮することができた。本研究開発課題では、AI を活用した科学研究の高度化と革新を目指し、科学における仮説生成・仮説評価・仮説検証という一連のプロセスを AI で統合的に支援するための方法論の開発と植物分野に対する実践的応用を行った。

課題推進者:竹内 一郎(名古屋大学)

研究開発課題 2 : 事前知識に基づく観察・解釈 AI

実施内容 :

(1) 事前知識情報を基に推論や判断を実現する技術の開発

事前知識情報を活用し、動物やヒトの微細血管構造の抽出・解析、植物器官の微細

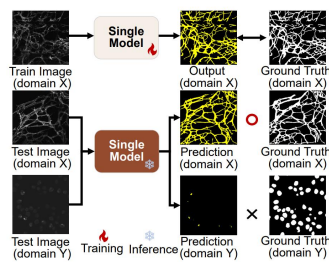
構造の抽出・解析、解析結果に基づく推論・判断、さらに血管と血栓の3次元的な解剖構造の構築や細胞の動態追跡（トラッキング）を行った。以下では深層学習を用いた共焦点顕微鏡（CLSM）画像からの血管の抽出と解析、一枚のCLSM画像からのマウス頭部構造の3次元構造の再構成、CLSM画像を用いた血球細胞の検出および追跡、植物の根部細胞のトラッキングについて詳述する。

a) 深層学習を用いたCLSM画像からの血管の抽出と解析

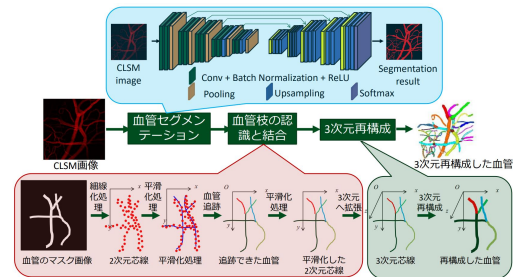
生物学者は疾患形成を解明するため、CLSMを用いてマウス大脳皮質の変化を観察・解析している。本研究では、深層学習を用いて血管および血球のセグメンテーションを実施した。公開された深層学習モデルを基盤とし、武部PIのデータを用いてFine-tuningを行い、血管と血球を高精度に抽出した（下図（ア））。提案手法は従来手法と比較して高速かつ優れた性能を示し、疾患解析への有用性が確認された（武部PI・原田PIとの協働）。

b) 単一のCLSM画像からのマウス頭部構造の3次元再構成

マウス大脳皮質の血管構造における空間配置を明らかにするため、CLSM画像を対象に、血管および血栓の3次元再構成と血管分岐解析を行った。深層学習により血管領域をセグメンテーションし、中心線を抽出して血管径などの形態指標を算出する。算出した情報を事前知識と統合することで3次元血管構造を再構成した（下図（イ））。提案手法により得られた3次元形状は、従来法と比べて生体構造に近いことが示された（武部PI・原田PIとの協働）。



(ア) 血管と血球のセグメンテーション



(イ) 血管の3次元再構成

c) 共焦点画像を用いた血球細胞の検出および追跡

血管内の血球は酸素供給や免疫応答の維持に重要な役割を担い、その位置を追跡することは血流異常や炎症・血栓形成の機序解明に不可欠である。本研究では、画像セグメンテーションから得た細胞領域をバイズ推定の事前知識として利用し、フレーム間の細胞位置の連続性を考慮して血球細胞を正確に追跡する手法を提案した。実験により、多数の血球運動に対して正確な軌跡を復元できることを確認し、生体血流解析への有用性が示された（武部PI・原田PIとの協働）。

d) 根部細胞トラッキング手法の実現

植物の根細胞における遺伝子配列を解析し、その機能を検証することで、根系の発達や環境応答に関わる分子機構を解明する。本研究は根細胞画像から細胞の3次元位置のセグメンテーションと遊離状態の細胞の追跡について取り組んだ。実験結果から、画像から根部細胞の3次元位置と運動軌跡を追跡することが可能であった（佐藤PI、新井PI、丸山PI、竹内PIとの協働）。

(2) 動作結果や観察結果から知識の獲得と事前知識への転換技術の開発

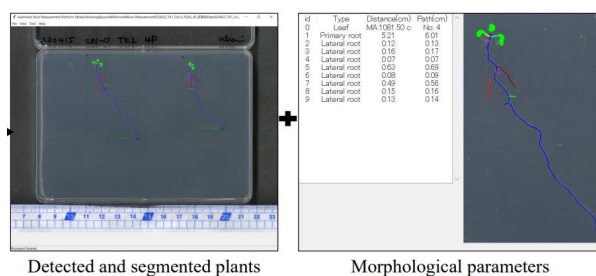
動作結果や観察結果から得られた知識を事前知識へと転換するために、撮影した植物器官の画像を解析し、各器官(根と葉)の形態学的パラメータを取得した。その後、解析されたパラメータを利用して事前知識の転換を行った。以下では、植物の根部における特徴抽出の手法に焦点を当てるとともに、気孔の特徴抽出についても詳述する。

a) 根の成長特徴の抽出と事前知識へ転換

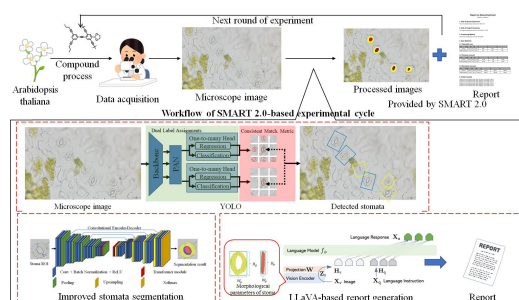
植物学者が植物の生長に適した培地を探索するには、植物器官の生育指標を自動かつ定量的に取得する仕組みが必要である。本研究では、植物画像から葉と根の形態指標を高精度に測定する手法(RAPID)を開発した。深層学習により各植物個体を検出し、葉および根の領域を抽出したのち、主根と側根を識別して形態指標を算出する。提案手法は従来法より多様な指標を高精度で得られることを確認した。RAPIDは生物学者向けソフトウェアとして実装され(下図(ア))、国内外学会で報告済みであり、現在雑誌論文を投稿準備中である。(佐藤PI、竹内PIとの協働)。

b) 気孔開口の影響に関するバイオスティミュラント解析

化合物が気孔機能に与える影響を明らかにするため、気孔の開度や幅などの形態指標を自動で計測することを求めている。本研究では深層学習と画像後処理技術を組み合わせて気孔構造の形態指標を自動測定した(SMART)。深層学習より解析した形態指標と植物実験において使用されたバイオスティミュラントの情報を統合することで、バイオスティミュラントが気孔開度に与える影響を明らかにすることが可能となった。提案手法は生物学者向けのソフトウェアとして開発され(下図(イ))、国際学会で発表を行った。論文投稿も予定している(魚住PI、新井PIとの協働)。



(ア) RAPIDで根の測定



(イ) SMARTで気孔の測定とレポートの作成

(3) 実験結果から得られた知識や経験を人へフィードバックする技術の開発

知識獲得結果を人が理解できる形で表現することを目的とし、解析された植物および動物の解剖学的構造のパラメータを活用して、実験報告書の作成に関する研究を行った。本研究では深層学習を用いて画像から植物画像の葉と、動物画像の血管の特徴量を抽出し、それをもとにLLMを活用し、得られた実験結果を自然言語および記号を含むレポートとして自動生成する手法を提案した。本研究により、植物実験および動物実験の両方において、得られたデータを効果的に活用し、実験結果の理解と次なる研究計画の策定に貢献できることを示した。

a) 植物の気孔の定量解析とデータ解析

植物実験を効率化し、気孔の開度などの形態指標を自動解析する技術が不可欠である。本研究では、画像解析で得られた気孔情報と LLM を統合し、実験レポートを自動生成する手法を構築した。さらに、化合物名などの事前知識と形態指標を対応付けることで、各化合物が気孔開閉に及ぼす影響を評価できる（下図（ア））。これにより、生物学者は実験結果の理解を深め、次段階の研究計画立案を効率的に進められるようになった（魚住 PI との協働）。

b) マウス頭部の血栓好発部位の獲得

病変好発部位を解析するには、実験画像に基づき病理情報を統一的に記述した動物実験レポートが不可欠である。本研究では、マウス画像から深層学習で血管と血栓の特徴量（位置、形状、体積など）を抽出し、LLM と統合して自動レポート生成を行う手法を構築した。提案手法により、血栓形成に関する病変部位の情報を含むレポートを自動で作成でき、生物学者の解析効率と研究計画立案を支援した（武部 PI と協働）。

Prompt: You are a scientific expert analyzing experimental results on stomatal physiology. Please compare and interpret the effects of **mock** and **ABA** on stomatal opening, based on the following quantitative parameters: **mock**: - pore width: 4.40 μm - Area: 29.05 μm^2 - AMI: 46% **ABA**: - pore width: 3.50 μm - Area: 22.90 μm^2 - AMI: 36% Please provide a concise and scientific interpretation of how Compound **ABA** influences stomatal opening relative to **mock**. Your response should describe the direction and magnitude of changes, their potential biological significance, and how they may reflect different mechanisms of action between the two compounds.

Findings from SMART 2.0:

Based on the given data, it appears that the **ABA (30nM) treatment leads to a significant reduction in stomatal width and area, as well as a decrease in AMI compared to the mock treatment.** This suggests that ABA (30nM) has an **inhibitory effect on stomatal opening**, which may be due to its well-known role as a plant hormone that regulates stomatal closure. **The magnitude of the changes in stomatal width and area is relatively small, but the decrease in AMI is more pronounced, indicating that the effect of ABA (30nM) on stomatal opening is more pronounced than its effect on stomatal area.** The direction of the changes in stomatal width and area is **consistent with the expected effects of ABA on stomatal closing, while the direction of the changes in AMI is less clear.** It is possible that ABA (30nM) is affecting the relationship between stomatal width and AMI in a way that is not fully captured by the current parameters. **Overall, the data suggest that ABA (30nM) has a distinct mechanism of action on stomatal physiology, compared to the mock treatment, and that further investigation is needed to fully understand the complex interactions between ABA and stomatal opening.**

Findings from ChatGPT:

Based on the given data, **ABA (30nM) treatment leads to a marked reduction in stomatal width, area, and AMI relative to the mock treatment.** These results suggest that ABA exerts an **inhibitory effect on stomatal opening, consistent with its established role in promoting stomatal closing through guard cell turgor regulation.** While **the reductions in width and area are moderate, the decrease in AMI is more pronounced, indicating a stronger effect on stomatal morphology.** This pattern suggests that ABA not only narrows the pore but may also alter the aperture shape, **as reflected by the reduced AMI.** **Overall, the findings support the hypothesis that ABA modulates stomatal physiology through a distinct mechanism compared to the mock treatment.** Further research is warranted to elucidate the specific pathways by which ABA affects stomatal geometry and function.



Reference image



Current image

Prompt: Describe the difference between the two CLSM images.

LLaVA: (BLEU: 0.0067) In the current image, the blood vessels are depicted as a series of interconnected tree branches, which is different from the reference image. The reference image shows a tree with a single trunk, while the current image features a tree with multiple trunks. This change in the visual representation of the blood vessels highlights the differences between the two images and emphasizes the importance of understanding the context and interpretation of images.

Proposed method: (BLEU: 0.17) A newly formed thrombus accompanied by vessel dilation may suggest acute thrombosis with compensatory vascular enlargement.

GT: A new thrombus is observed along with vessel dilation. This may indicate acute thrombosis with compensatory expansion.

(ア) 気孔の実験レポート

(イ) 血管と血栓の実験レポート

課題推進者: 森 健策 (名古屋大学)

研究開発課題 3: 融合 AI によるマニピュレーションタスク戦略の獲得と生成

実施内容:

(1) マニピュレーションタスク戦略の獲得手法の開拓

複雑な双腕操作の模倣学習手法として以下の研究を行った。

・ロボットが自律的に微細な作業を遂行することを目的とした、マイクロドリルを扱った卵殻の切削タスク戦略の構成と方策、およびその戦略を検証するための一連のタスク実験の結果を陽に示した。卵殻の切削タスク戦略を実現するために、タスク戦略の立ち位置を背景に複合的な層からなるタスクを構成し、軸となる複合的処理として力覚・聴覚・手先位置の複合情報フィードバックの考え方に基づいた提案を行った。また、卵殻膜を破らないために必要な切削タスクのやめどきに関する考察を行った。卵殻に対して離散的・連続的に切削を行うアプローチを確立し、かつ卵殻膜を傷つけた場合の対処と方策、傷つけないようにするための考察も含めた包括的なタスク戦略を明らかにした。

・複雑な双腕操作の模倣学習手法として、複雑な操作の標準タスクである Peg Transfer を対象とし、そのタスクの解析からブロックを操作する鉗子に重なる仮想的な 1 軸の直動関節を設け、制約をかけながら逆運動を解くことで、固定点に負荷をかけずに動作するようにした。さらに、最初に熟練者の模範となる動作から奥行き方向に対する最小値最大値制約を生成し、これを用いてデータ収集と模倣学習を行うことで、Peg の位置がずれるなど想定外の状況でも、自律的な復帰動作を

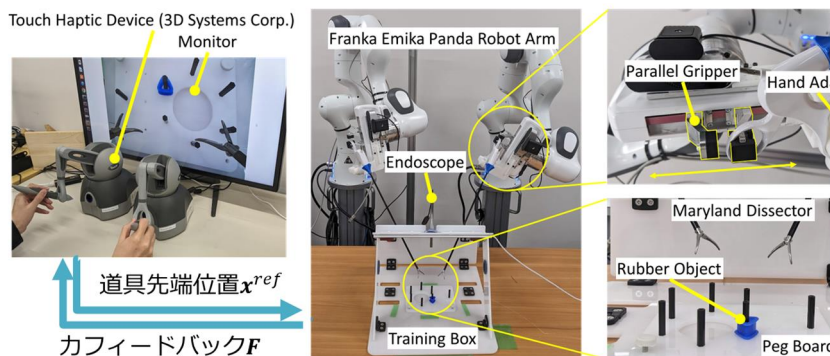
組み込んだ適応的なロボットの制御プログラムが自律的に獲得され、高い精度の Peg Transfer が可能であることを示した。さらに、熟練者データの観察からフェーズ遷移を抽出し、このフェーズ毎の模倣学習を行う事で、成功率の高い模倣学習を実現した。さらに、模倣学習に必要な熟練者の教示データには、多様な動作速度や癖があるため、これらの情報を Parametric

Bias と呼ばれる学習可能なネットワーク入力変数により、暗黙的の考慮する方法を用いた。

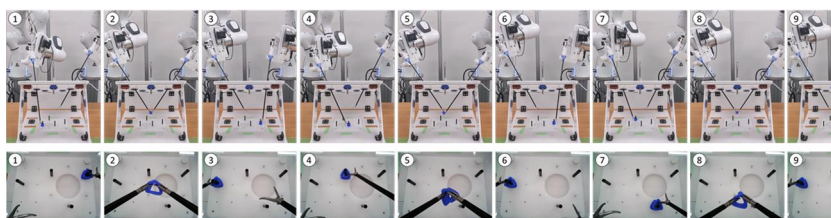
・複雑な双腕操作を含む自然科学領域の理化学実験マニピュレーションタスクにおいて、ドメイン知識を与えたいえ自律的な復帰動作を含むロボットプログラムを開発した。特に、双腕ロボットと単腕ロボットの間で視覚センサ付きグリッパを受け渡しする動的再構成タスクにおいて、常時モジュールの接続状況を確認し自律的な失敗の検知と復帰が可能なことを公開デモンストレーション等で示した。

(2) 自然科学領域の理化学実験を実現するサイエンス探求マニピュレーションロボットの認識行動インテグレーション

・力覚・聴覚・手先位置のマルチモーダルな感覚情報処理に基づくマニピュレーションタスク戦略の獲得手法の実証実験のために、手先に力センサを有する研究用ロボットを用いた実験環境と、手先に力センサを有さないが作業台座下に電子天秤を設置することで力覚情報を取得する産業用ロボットを用いた実験環境の 2 つのシ



FLS 基本技能獲得模倣学習ロボットシステム構成図



異なる初期位置にあるブロックを持ち換えを含めた操作の獲得に成功

システムを構築した。

・クラニアルウインドウ法でのマウス頭蓋骨切削作業を遂行可能な認識行動ロボットシステムを開発した。マウスは、個体差や部位差が大きく、その影響を受けにくいと考えた振動認識を用いて、切削軌道の微小区間ごとに切削対象が貫通したことを認識してその区間の切削を停止することで部位差にも対処し、破ってはいけない膜を破ることなく切削作業を完遂するシステムを構築した。



クラニアルウインドウの切削・剥離の様子

・特に、脳の損傷を最小限に抑えるために、骨切削作業を遂行可能なロボットシステムについて考察した。個体差の影響を受けにくいと考えた振動認識を用いて、切削軌道の微小区間ごとに切削対象が貫通したことを認識してその区間の切削を停止することで部位差にも対処し、破ってはいけない膜を破ることなく切削作業を完遂する手法の解明に取り組んだ。

・さらに、ロボットならではのタスク実現として、1匹のマウス頭蓋骨に4つの等面積のクラニアルウインドウを開けるというロボットならではのタスクを実現した。

(3) サイエンス探求マニピュレーションロボットシステムのソフトウェア基盤の開発と公開

公開済みのサイエンス探求マニピュレーションロボットシステムのソフトウェア基盤を引き続き整備し、共通ミドルウェアの公式ソフトウェアリポジトリで公開し、(1)、(2)の実験で活用してきている。

(4) 動的再構成ロボットの運動と機構の同時学習獲得に関する研究

多様なリンク・関節構成が可能なモジュラーロボットの設計最適化法として、指定した位置姿勢の到達精度と関節トルク値のそれぞれの評価値を多目的ブラックボックス最適化を用いて同時に最小化し、小さな必要トルクで所望の動作を実現可能な身体が自動構築されることを確認した。

・多様なリンク・関節構成が可能なモジュラーロボットの設計最適化法の研究を行った。具体的には、関節は全てピッチ方向に回転する1軸関節として表現し、各ジョイント座標系に対する、子リンクの方向ベクトル、リンク長さ、親ジョイント座標系から見た回転行列、26通りのアタッチメントの接続方向をパラメータとし、指定した位置姿勢の到達精度と関節トルク値のそれぞれの評価値を同時に最小化する。最小化手法は多目的ブラックボックス最適化である Tree-Structured Parzen Estimator を使い、小さな必要トルクで所望の動作を実現可能な身体が自動構築されることを確認した。

・また、より複雑な可変経由点を含む複雑な構造を有するワイヤ駆動型マニピュレ

ータの運動と機構の自律的学習手法に取り組んだ。ここでは、ロボットをD個の関節を持つリンク構造に対して、M本のワイヤを張ったものとしてモデル化し、m本目のワイヤにおけるn番目の経由点を取り付けるリンクdを指定し、目標手先力空間・目標手先速度空間を定義し、これをできる限り実現する設計解、すなわち、m, n, dを見つける問題として定式化する。この際、手先力空間は楕円で定義できるが、この楕円上の各点について、どの程度現在の身体の発揮可能手先力空間が、目標手先力空間を上回っているかを表す値を導入し、これを用いた評価指標を用いて、Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II)により多目的最適化を行い、身体パラメータを決定する。

(5) 動的再構成ロボットのための共通ミドルウェアに関する研究

動的に構造の機能の可変が可能な合体変形ロボットにおける、共通ミドルウェアの構成法について研究を行い、回転アーム、直動アーム、グリッパ、移動台車の各モジュール間を機構の接続だけでなく、電気的な接続も可能な構成に特徴がある任意に動的再構成可能な接続モジュールを開発した。また、これらのロボットを共通ミドルウェア上で駆動するため、2台のロボットの分離合体実験を行い、そこにおける共通ミドルウェアの構成法を集中制御型、分散制御型、コネクションレス通信の観点から整理と実装を行った。

・アームの取り付け交換が可能な、合体変形型のロボットにおける、共通ミドルウェアの構成法について、アーム部位に計算機を組み込んだエッジ型知能の構成法により、各エッジがミドルウェアによる自律的な通信が可能な方式を設計した。また、アームの取り付け交換時に、接続されたモジュールを一意に判定する機構を考案し、これにより、共通ミドルウェア上のロボットモデルを、実ロボットの身体構成に合わせて再構成する方法を開発した。

課題推進者: 岡田 慧(東京大学)

研究開発課題 4:サイエンス探求マイクロロボットツール

実施内容:

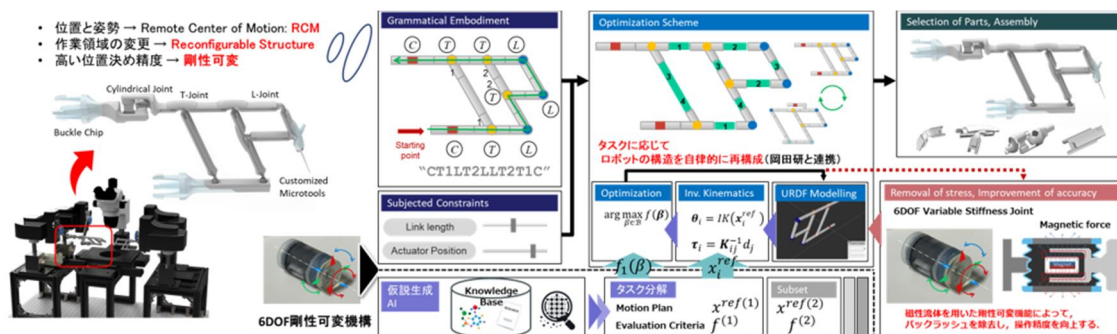
(1) サイエンス探求マイクロロボットツールの共通技術

人や従来のロボットでは操作が困難であった微小な対象物を扱う微細な作業には、作業に適した様々なマイクロロボットツールが必要である。そこで、機能性マイクロロボットツールとして、モジュール化された、従来にないまったく新しいツール群を開発することを推進した。具体的な実証応用例としてバイオスティミュラントの評価系、植物の好適培地の評価系、動物細胞組織を用いた疾患機序評価系を対象として実験を進めた。また、実験の自動化や自律化にむけて、ツールあるいはシステム構成を、タスクに応じて動的に再構成可能な形態(Reconfigurable Robot)を取り込んだモジュール構造と機能を具体化した構造を実用評価した。

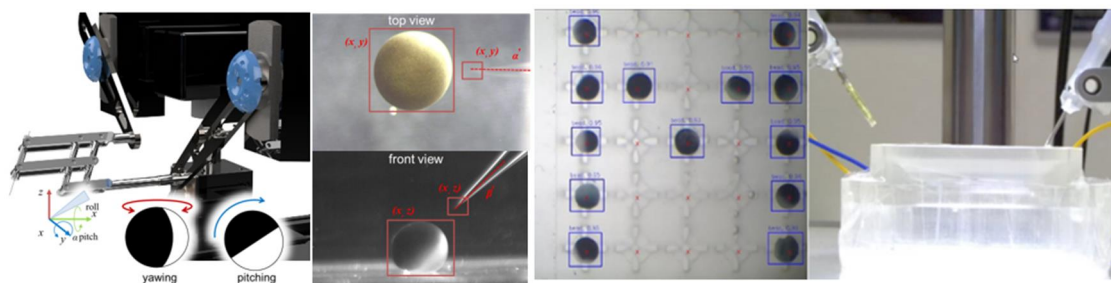
以下に具体事例を示す。

微細作業実験ロボットのモジュラ性を維持しながら、多様な実験タスクに対して適応的なロボット実現するために、脱着可能な剛体肢、ヒンジ機構などの単位構造

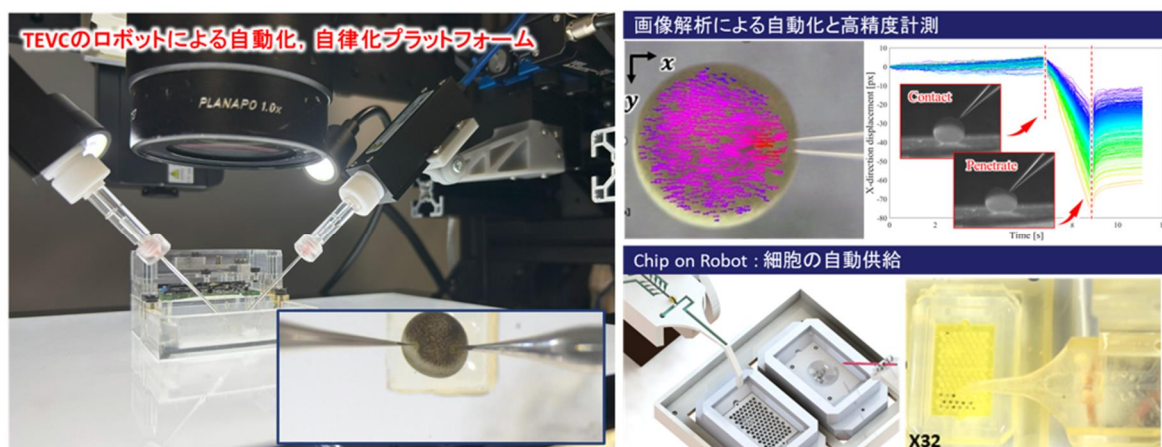
をもとに、複数のアクチュエータに嵌合し駆動させることが可能であって、パラレルリンクやRCM機構や多軸駆動のなど、複合的な機能が実現できるプラットフォーム:Modular-Robotic Extender(MREx)を実現した(下図)。



実際に ICRA2024 エキシビションなどでは、下図に示すように、卵母細胞を模擬した柔らかい物体をピックアンドプレースすることに成功した。



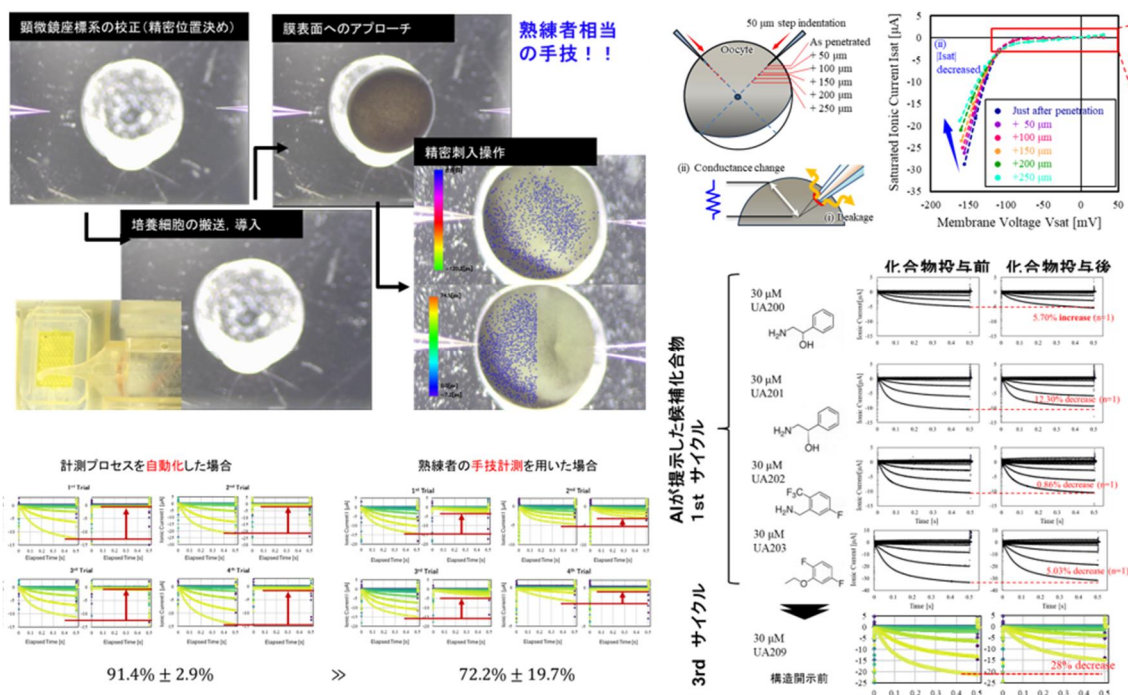
また、微小な生体標本を、ロボットを用いて高精度に取り扱うための力センサとして、水晶を用いた水晶振動式力センサを自作、実装し、特性評価をすすめた。実際のアプリケーションタスクに適用し、例えば TEVC の微弱な膜貫通力を計測しながらフィードバック制御するような操作が可能となった(下図)。MEMS/3DPrinterの融合技術であるセンサ統合型マイクロピペットツールはM-RExへの搭載、実証を進めた。



(2) バイオスティミュラントの評価系サイエンス探求 AI マイクロロボットツール

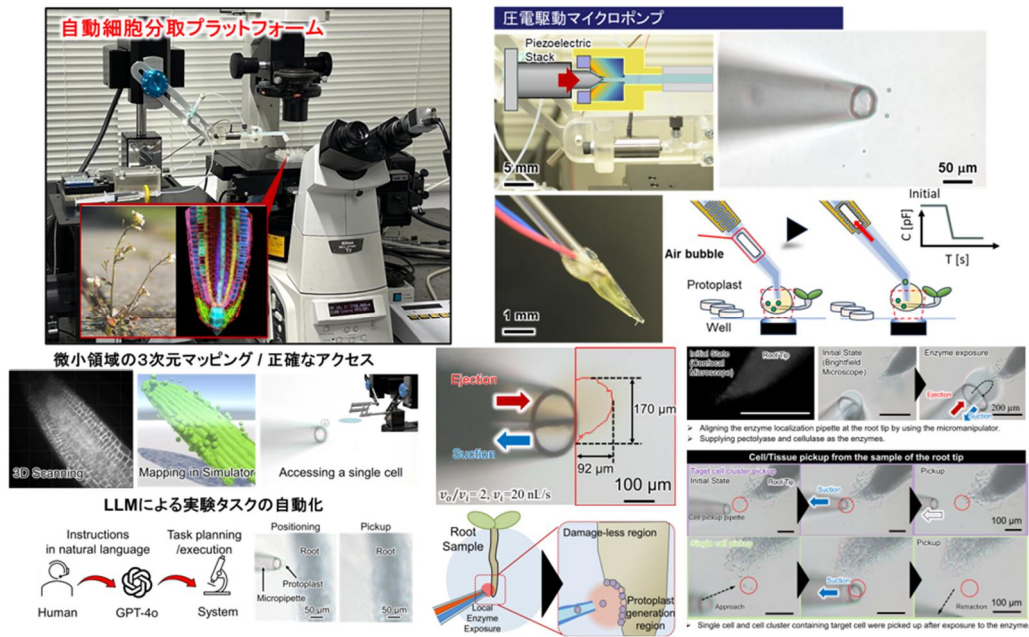
AI ロボットによる理化学実験の実証研究の一環として、新規バイオスティミュラントの探索を行うために必要なマイクロロボットツールを開発した。卵母細胞の

位置・姿勢を制御したり、狙った位置に正確に遺伝子を導入したり、ボルテージクランプに必要となる、様々なマイクロロボットツールを開発し、AI ロボットとのインタフェース技術を開発した。顕微鏡下において、双腕ロボットステージ、QCR 力センサ、TEVC アンプによる膜電位計測機能、流体デバイスによる溶液置換機能を統合し、TEVC の実験プロセス全体（ワークスペースのキャリブレーション、細胞供給、細胞膜位置検出、細胞キャピラリ刺入操作の自動化、計測の自動化）を進めた。細胞の膜電位固定による貫通直後の穿刺動作停止が有効であることを見出し、実際の TEVC によるイオン電流の計測を精密に行うことを達成した(下図)。この自動化システムを用いて、竹内 PI、笹野 PI、有澤 PI と連携し、候補化合物の評価を進めた。結果として、KAT1 抑制に効果的な低分子化合物のバイオスティミュラントを発見することに成功した。



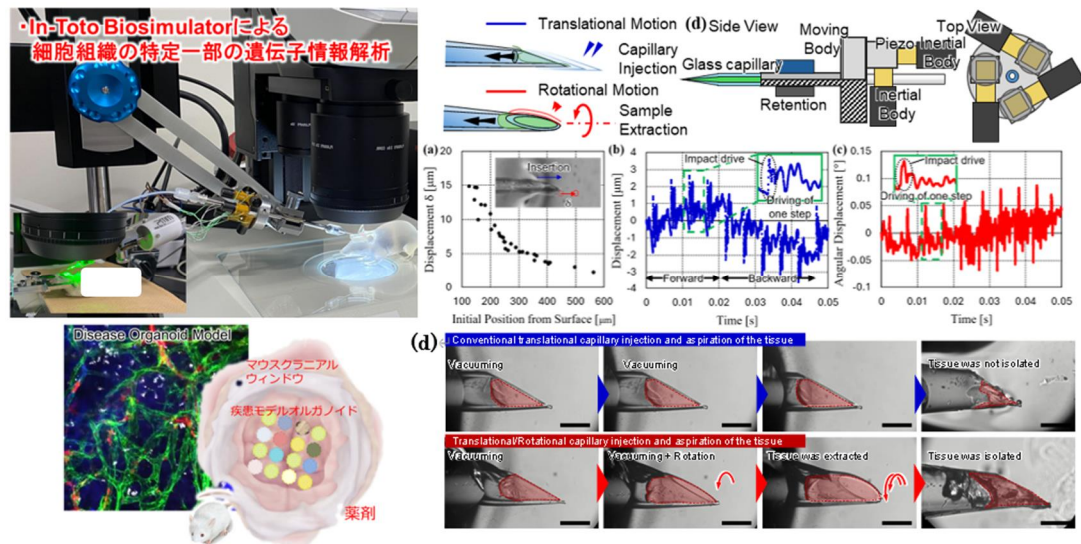
(3) 植物の好適培地評価系のためのサイエンス探求 AI ロボットプラットフォーム

AI ロボットによる理化学実験の実証研究の一環として、植物の根先端の細胞の位置情報を維持した単一細胞操作技術を開発した。共焦点/明視野併用の撮像プラットフォームに高精度な位置決め性能を有する3軸、あるいはMRE xを搭載した5軸RCM マニピュレータを搭載し、さらにその先端にpL オーダの圧電駆動マイクロポンプを実装することで、単一細胞レベルの高精度な細胞の吸引/吐出動作を可能とした。明視野画像、共焦点画像、ピペット搭載マニピュレータ、ワークスペースの対応づけを行い、また、LLM を用いた自律的な細胞分取インタフェースを実現した。これによって、手動での回収では困難であった、特定の細胞の位置を指定して高速に(平均 4.2 s)で細胞を分取することに成功した。



(4) 動物細胞の評価のためのサイエンス探究AIロボットプラットフォーム

AIロボットによる理化学実験の実証研究の一環として、超解像度の実態顕微鏡下で、圧電インパクト駆動機構 (Piezoelectric Impact Drive Mechanism) を採用したピペットシステムを実装することで、In-situ で所望の細胞組織を単離する手法を開発した。反復穿刺とねじり操作を行うことができる独自制御コントローラを実装することによって、標的の組織小片を分断することで、局所的に組織を吸引回収することに成功した。



課題推進者: 新井 史人 (東京大学)

研究開発課題 5: サイエンス探究 AI ロボットシステム

実施内容:

(1) サイエンス探究 AI ロボット・プラットフォームの開発

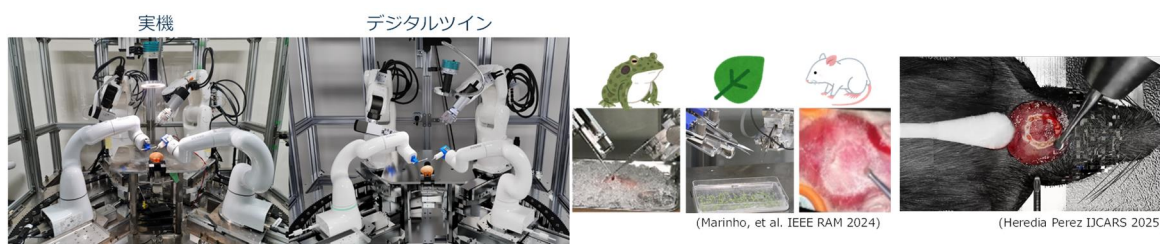
ライフサイエンス分野の実験では、多様な実験器具とモデル生物の双方を扱う必

要がある。特にモデル生物は微小で柔軟性が高いため、従来のロボットでは扱うことができない。また、個体差が大きいため、定型動作では対応できず、対象に応じた臨機応変かつ繊細な操作を自律化する必要がある。そこで観察系に対応した以下の3種類のプラットフォームを開発した。

a) モデル生物に対して mm オーダーの操作を行うプラットフォーム

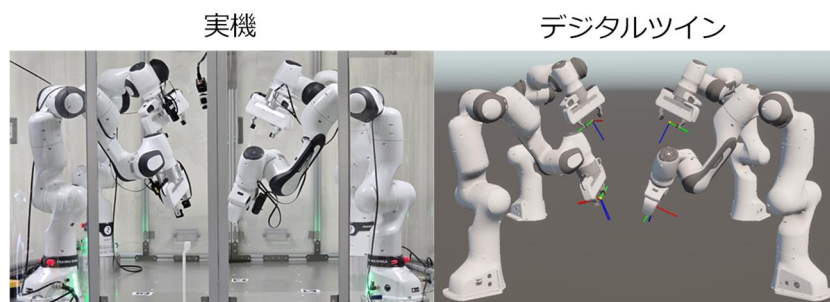
本システムは4本の産業用ロボットアームで構成され、リーダー・フォロワ制御により、人間にとっても困難な微細操作を実現し、これにより AI 学習用のデータ作成も可能にする。ロボット同士や環境との干渉を回避する自動衝突回避制御を実装し、様々なモデル生物を対象としたロボット操作を実現した。

さらに、実機に加えてデジタルツインのシミュレータを開発した。モデル生物実験は細胞培養に比べサンプル数が極めて少なく、倫理的制約によってさらに制限される場合が多い。そのため、デジタルツイン環境を構築し、マウス頭蓋骨やそのモデルである卵殻を含め、音声・力情報・様々な視野からの画像・切削量など、実環境での実験では収集困難なデータを取得可能とした。これらのデータは谷口 PI に提供され、フィジカル AI の開発に貢献した。



b) 実験器具の操作に対応する cm オーダーの操作プラットフォーム

a)の技術を応用することで、短期間で実験器具を扱うシステムを構築した。ピペット、シャーレ、ビーカーなどの実験器具を対象としており、具体例として、佐藤 PI の培地合成タスクを対象とした開発を行った。こちらもデジタルツイン環境を整備し、リーダー・フォロワ制御や自動衝突回避を実装した。リーダー・フォロワ制御はティーチングに限らず、自律ロボットに人間が介入する際にも有用であり、そのための直感的なユーザーインターフェースの開発も進めた。なお、a)とb)、さらに原田 PI の研究室で開発されている様々な手術支援ロボットは共通のシステム構成を持ち、要素技術を相互に展開可能である。



c) 細胞レベルの実験操作を対象とする μm オーダーの操作プラットフォーム

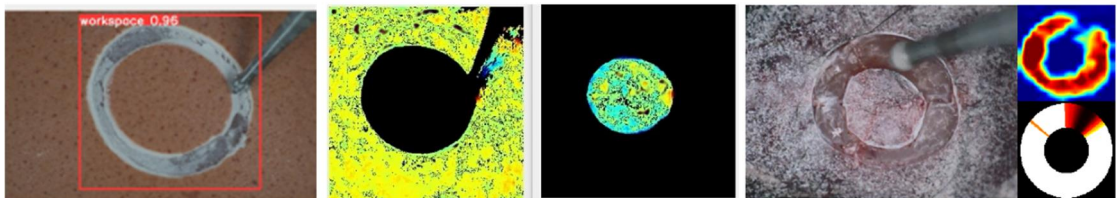
武部 PI をはじめ多くの研究者が利用する共焦点顕微鏡下で、マウス個体に対する精密操作を可能にするプラットフォームを構築した。従来の共焦点顕微鏡は観察

装置としての利用が中心であり、顕微鏡画像処理とロボット操作を統合する必要があった。本課題では、共焦点顕微鏡から得られる高解像度画像を自動的に転送し、森PIの開発する共焦点顕微鏡画像解析AIにより、細胞や組織レベルでのターゲット位置を正確に特定する。その結果から変換された座標情報を新井PIのロボットに送信し、顕微鏡観察とロボット操作をシームレスに接続する統合を行った。

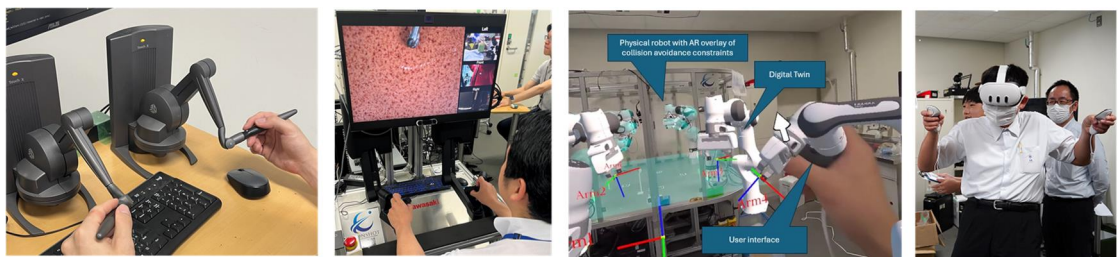
(2) 人とAIロボット協働の研究

ライフサイエンスにおける操作対象の生体は一つとして同じものがなく、単純な繰り返し動作では対応できない。そのようなタスクの例として、本研究ではマウス頭蓋骨の切削自律化に取り組んだ。本研究では、未知の形状・未知の厚さの対象に対して切削を自律化するための手法として、タスク進捗を指標とするAIを開発した。頭蓋骨切削のモデルタスクとしての卵殻切削タスクを対象に学習データを収集し、薄膜を破らず卵殻のみを切削するタスクを完全に自律化した。また、デジタルツインを用いた学習環境を整備し、より効率的な学習も可能にした。

また、本研究では能動的インタラクションによる情報取得も導入し、ロボットが切削領域を押し込み、対象の微小変位を観察することで切削状態を把握する方式を開発した。本研究では自の立体観察システム(MSCS)を開発し、0.14 mmの変位を観測可能とした。統合の結果、卵殻に対し、事前計測データなしで薄皮を残して自動切削することに成功し、85.7%の成功率を達成した。さらに、安楽死後のマウス頭蓋骨に適用し、完全自律での切削に成功した。



a)およびb)のプラットフォームでは、共通のユーザーインターフェースを通じて操作可能であり、人間が介入できないようなバイオハザード環境や高クリーン環境においても人間との協働が可能である。また、VRヘッドセットを用いた直感的インターフェースも開発した。これと自動衝突回避機能による安全確保と組み合わせることで、非熟練者でも安全かつ容易にロボットを操作可能となり、携行性を活かしてスペイン-日本間の大陸間遠隔操作デモを実証した。



課題推進者: 原田 香奈子(東京大学)

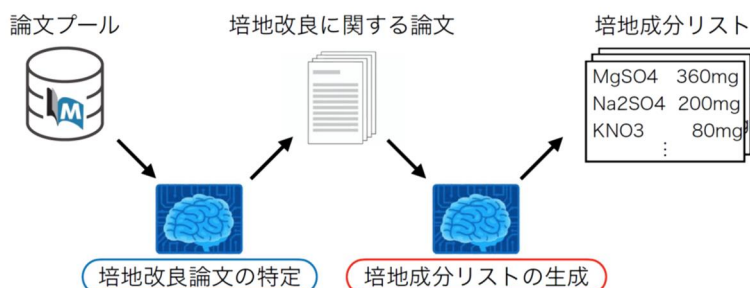
研究開発課題 6 : 大規模言語モデルを活用した文献解釈・生成 AI

実施内容：

(1) 培地改良論文の特定と組成情報の抽出

好適培地の開発に向け佐藤 PI と協力し、大量の論文からの培地改良に関する論文の特定、および、改良された培地の組成情報の抽出の自動化に取り組んだ。植物等の培養において、発育に最適な培地を用いることは重要であり、その探索のためには多くの培地組成の収集が必要となるが、大量の論文の中から培地組成の情報を獲得する作業は時間的コストが大きく、最適培地探索の研究を阻害する一因となっていた。

本研究では、大規模言語モデルを活用することで、培地に関する論文が与えられた場合に、培地改良論文が上位となるようにランキングするモデルを構築し、さらに培地改良論文からの組成情報抽出に取り組んだ



培地改良論文の特定と組成情報の抽出の流れ

(右図)。

培地改良論文の特定に関して、上位にランキングされた論文を専門家が分析した結果、最上位の論文は培地改良論文となっており、その一部はこれまで培地改良論文として把握していない論文であることが確認できた。

(2) テキスト情報を用いた化合物探索の効率化

バイオスティミュラントの開発に向け、魚住 PI、竹内 PI、有澤 PI らと協力し、論文等から得られるテキスト情報を用いることで化合物探索を効率化するシステムの構築に取り組んだ。具体的には、化合物構造の文字列表現である SMILES 記法と、化学分子データベース PubChem における化合物の説明文を入力とし、与えられた化合物が特定の物性を持つかどうかを予測する大規模言語モデルベースの分類モデルを構築した。さらに、イオン輸送体阻害剤の探索を題材とした実験を実施し、化合物の SMILES 記法に加えて説明文を用いることで物性予測の性能が向上することを示した。さらに構築したモデルを用いて実際にバイオスティミュラントとして有望な化合物の推薦を行った。

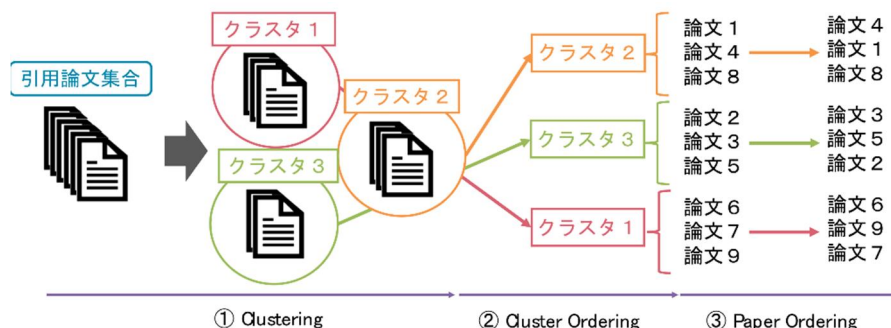
(3) 論文の自動生成に向けた質の高い論文の特定

論文の自動生成に向け、質の高い論文の自動で特定できるようにするため、学術論文の将来の引用数を予測する課題に取り組んだ。引用数予測に関する研究は数多く存在するが、それらは出版後十分な時間が経過していない論文については将来の引用数が利用可能であると仮定しているため、新たに発表された論文の引用数を予測するには適用できないという問題があった。そこで本研究ではまず、既存研究の設定における問題点を明らかにし、対象論文の出版時点で利用可能な情報のみを厳密に用いる現実的な引用回数予測タスクを導入した。さらに、被引用数補完と早期導入度を活用することで、最新論文にも適用可能な、より現実的な被引用数予測モデルを構築し、そ

の有効性を示した。

(4) 関連研究節自動生成に向けた引用論文の最適配置

関連研究節生成のためには、引用する論文を決定した上で、段落構成や引用順序など引用論文の配置を考える必要がある。本研究では、引用論文を段落ごとにまとめるクラスタリング、段落順の決定、段落内の引用順決定という3タスクに分解し、各タスクを解くことで引用論文の最適配置を実現した(右図)。



引用論文の最適配置の概要

具体的には、まず与えられた引用論文

集合に対し、クラスタリングを実施することで同一の段落で引用すべき論文をまとめ、続いてそれらの段落の並びを決定するために得られたクラスタリングの並び順を決定し、最後に同一段落で引用される論文の引用順を決定するという3つのステップから成る引用論文の最適配置モデルを構築した。

課題推進者：笹野 遼平 (名古屋大学)

研究開発課題7：遺伝子制御ネットワーク仮説 AI

実施内容：

(1) 遺伝子制御ネットワークの仮説を推定する AI の開発

遺伝子の制御関係によってもたらされるダイナミクスが、遺伝子発現データを生成しているため、遺伝子発現状態の潜在空間を作る Encoder の Attention が遺伝子間の重要な相互作用を反映すると仮定し、遺伝子「注意」ネットワークを用いた発見的アプローチを採用した。また、生物学特有である以下の入力と出力のデータ構造の要請を同時に満たすために Signed Bag Attention を開発した。この拡張した Attention を用いて遺伝子制御ネットワーク推論を行った。

補足：入力データは遺伝子発現データであり、その数学的なデータ構造は Bag である。生物学的には発現している遺伝子の個数であり、1細胞状態のスナップショットの情報を持ち得る。深層学習のアーキテクチャで、Bag を自然に扱えるものは殆どなく、List を多重度で展開すると計算量が大きすぎるために既存技術の活用は非実用的であった。出力データは遺伝子制御ネットワークであり、遺伝子発現の関係性を記したもので、Signed Graph で表現される。通常の Attention では制御を表すようなラベルがない。この出力のデータ要請を満たすようなモデルは、前例がないため新規開発が必要であった。

(2) AI が提案する仮説の検証

実験結果によって科学 AI を更新することは、継続的な AI の改善にとって重要であり、本

研究においても AI による仮説提案で終わらせずに、実際のデータを用いた検証と、その結果の AI へのフィードバックを行った。肝臓の血管に関する病気を再現するためのオルガノイドのレシピ開発を応用先・連携先として、武部 PI と連携した。その共同研究では、制御対象の候補となる遺伝子を約 3,000 種類から絞り込み、これらの候補を専門家が評価した。オルガノイド開発のために高コストな実験が必要であるため、仮説検証する価値があると判断された候補の採択率を、モデル有用性の評価とした。

初期検証として、制御対象の候補となる遺伝子を約 3,000 種類から 49 件に絞り込み、これらの候補を専門家が評価した。その結果、オルガノイド開発のために高コストな実験を実施して仮説検証する価値があると判断したものが 20 種類あった。さらに、それらの候補を専門家が評価した結果、細胞分化の新しい標的となる可能性がある未発表の遺伝子を再発見することができた。その発見にはトップ研究者でも膨大な研究時間と費用を要するものであった。

この結果を受け、さらに追加候補を選択した。対象の病気や遺伝子の母集団は前半と同様であるため、より厳しい候補選定ではあったが、追加 25 件の候補から 14 件が専門家のレビューにより選ばれ、目標としていた採択率の 10% 向上を達成。これにより、遺伝子制御ネットワーク推論の実証ができたため、様々な病気に適用することを目指し、候補遺伝子を多様な母集団から選ぶことができるよう、倍以上の種類を扱えるようにモデルの改善・高速化を行った。

課題推進者: 神谷 幸太郎 (SyntheticGestalt 株式会社)

(3) 研究開発項目3:サイエンス探求

研究開発課題 1: Lab-on-Oocytes によるバイオスティミュラント開発

実施内容:

減農薬、環境負荷低減、脱炭素社会の一環となる、作用点の明瞭な特異性の高いバイオスティミュラントの開発をめざし、植物輸送体の標的化合物の探索を行った。本研究は、乾燥耐性を誘導する化合物を探索目標とした。植物の気孔の閉鎖が生じる際に、孔辺細胞に K^+ を取り入れる K^+ チャネルは不活性化すると考えられている。本研究では、乾燥環境下で植物が迅速に気孔を閉じて初期乾燥ストレスを乗り切ることを補助するため、孔辺細胞の K^+ チャネルを標的とした阻害化合物の開発を目的とした。

アフリカツメガエル卵母細胞を用いたイオン電流計測により、阻害・活性化剤を創出する。ヒトの操作だけで行われている長時間、繰り返し作業を、AI とロボットの導入によって操作および観察データ処理を支援し効率化をめざした。これにより、生理反応制御するイオン輸送体の調節化合物 (バイオスティミュラント) の開発は、既存の化合物にとどまらず未合成化合物においても、目的化合物のスクリーニングが可能となる。すなわち、人では見いだすことができない新規有効化合物の創製が期待される。

(1) AI 提案化合物の評価

竹内 PI によるグラフマイニング AI 推定に基づく化合物の検索と、笹野 PI による

自然言語処理 AI を用いた化合物の探索で提案された候補化合物について電気生理測定による評価を行った。本 AI の教師データとなる電気生理学測定結果の提供を行った。特に、孔辺細胞から K^+ を排出する K^+ チャネルの立体構造は不明であったことから、Cryo-EM により立体構造を決定した。販売品のほか有澤 PI により合成された数多くの化合物を評価し、竹内 PI の AI 推定化合物の中から K^+ チャネル活性を有意に阻害する化合物が新たに見いだされた。

(2) ロボットによる細胞穿孔法の検討

新井 PI により、人の代わりに、2つのガラス電極を細胞に穿孔する操作を行うマイクロ・ロボットツールの開発において、技術的に必要な観点を説明した。開発されたロボットが実践投入された後の改良について、人による操作との比較を行った。ロボットの性能を高める実験を共同で実施し、ロボット操作とヒトの操作を比較する評価を行った。開発されたロボットは、ヒトの操作と比べて細胞への侵襲性が小さいという結果が得られた。

(3) 画像 AI を用いた気孔開度の評価

気孔開度は、気孔一つずつ人の作業によって測定されている。人に代わって短時間に気孔開度の測定を行うことが可能にする目的で、森 PI による AI 画像処理の構築がすすめられた。実際に、気孔を気孔開口誘導剤や閉鎖誘導剤で処理して、その気孔の画像を提供するとともに、構築された画像 AI による気孔開度と人によって測定した気孔開度を比較した。これにより、真の値に近づくための改良に協力した。この結果、人の測定を超える気孔開度測定法が構築された。

課題推進者:魚住 信之(東北大学)

研究開発課題2:植物 1 細胞遺伝子発現アトラスの構築

実施内容:

(1) サイエンス探求マイクロロボットツールを活用した好適培地の開発

研究開発課題実施期間において、植物生育における好適培地の効率的探索を次の5つの実施項目により実現した。

a) AI による探索空間の絞り込みおよび情報自動抽出モデルの開発

半世紀に渡って蓄積された培地改良研究データを真に研究者が活用しうるデータとし、植物組織培養の重要なパラメーターの探索法を確立するためには、これまでの組織培養データを収集し自然言語処理に供することが必須である。そこで、AI 開発を行う笹野 PI と連携して、約 5000 報の論文集合の中から培地改良論文を見つけ出し、その培地情報を正確に抽出することに成功した。

b) AI 自動測定ツールの開発

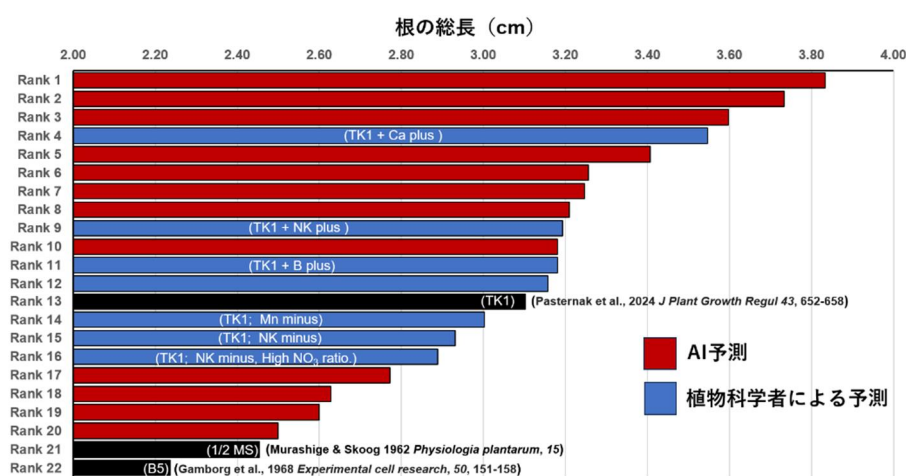
植物の発生における測定は、従来の解析手法は手動に頼る部分が多いことから、AI 開発を行う森 PI に画像を提供し、主根の長さや側根の数などの自動解析ツールの開発を行った。開発したツールでは、従来よりも短時間、かつ根の発達具合に関わらず概ね一定の工数で測長が完了しており、研究開発の促進に大きく貢献した。

c) 文献から得られた化合物を添加したときの再生率の評価

文献情報から植物発生や再生に影響を与える 10 種の物質に着目して解析を行った結果、1 種の化合物で通常培地よりも速く再生過程に侵入する至適濃度を発見した。

d) ベイズ最適化を用いた好適培地の開発

少ない試行回数で最適解を導く機械学習としてベイズ最適化を用い、植物の好適培地開発を行った。過去の文献から、植物の成長を促進すると予想される培地組成を 10 種類考案し、好適培地開発への開始点とした。これらを事前学習データとし、総根長を最も長くする窒素 (N)、リン (P)、カリウム (K) の含有比率を提案する予測モデルを作成した。その結果、AI によって提案された培地組成はいずれも一般的に用いられている培養培地である 1/2MS よりも総根長が長くなり、植物科学者が考案した 10 種類の培地よりもさらに良好な結果を示した (下図)。



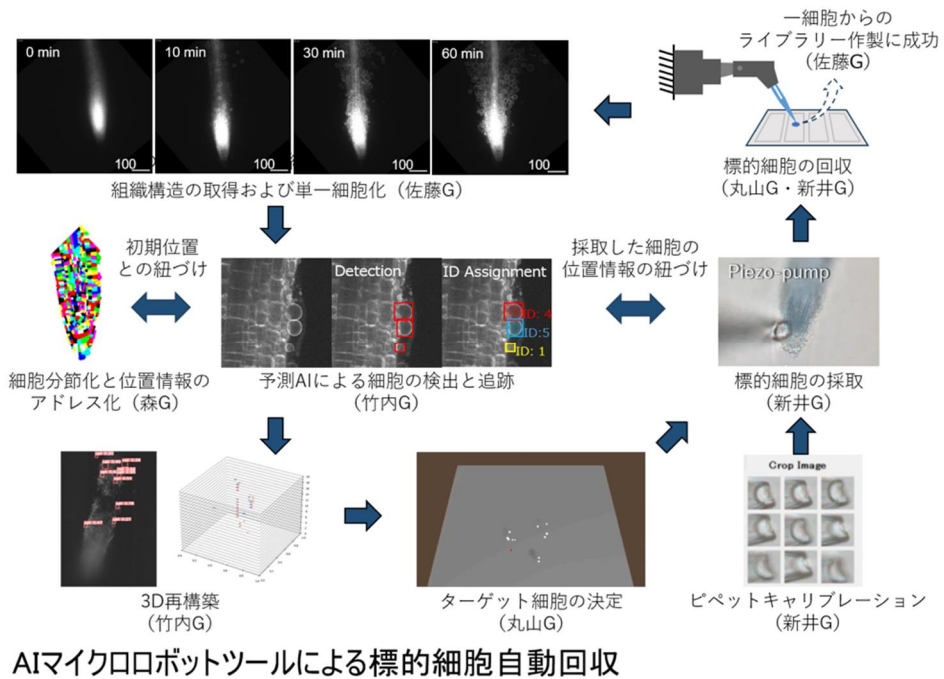
AIによって提案された培地で培養した植物体の根の総長
植物体を7日間培養したときの根の総長を示す。黒色は既存の培地を、青色は植物科学者が予測した培地を、赤色はAIによって予測された培地を示す。

e) 植物自動撮影装置の開発

撮影の時間間隔や頻度が制限されてしまう課題を解決するため、植物自動撮影装置を開発した。本装置は、明期や暗期によらず一様な輝度を維持した画像取得を可能にする構成を持ち、10分間隔で7日間連続撮影するなど、人では取得することが不可能であったデータを取得することが可能となった。

(2) サイエンス探求マイクロロボットツールを活用した植物1細胞遺伝子発現アトラスの構築の実施

研究開発課題実施期間において、植物の根を構成する細胞の空間情報を維持したまま1つ1つの遺伝子発現情報を得る植物1細胞遺伝子発現アトラスの構築にむけたマイクロロボットツールの開発に成功した (下図)。



a) 採種した細胞と紐づける細胞位置情報のアドレス化

採取した細胞と採取した細胞が根のどこに存在していたのかの位置情報を紐づけるために、細胞壁を染色した植物の根を共焦点顕微鏡で観察し、この3D画像データを基にAI開発を行う森PIと植物の一細胞のセグメンテーションを行い、細胞位置情報のアドレス化に成功した。

b) 一細胞採取が可能な酵素処理条件の検討

単一細胞採取のための根組織の酵素処理条件の検討を行い、蛍光タンパク質を指標に単一細胞の鮮明な共焦点画像を得ることに成功した。

c) マイクロロボットツールを搭載する顕微鏡システムの構築

AI開発を行う森PI、竹内PIの画像AI技術およびマイクロロボット開発を行う新井PIの自動マイクロマニピュレーション技術を統合し、共焦点顕微鏡撮影、遊離した細胞の検出および追跡、採取する細胞の決定、採取までの一連の動作においてオートメーション化することに成功した。

d) 植物一細胞の遺伝子発現評価

単一細胞採取環境のクリーンレベルや、RNA抽出条件の工程、試薬の検討を行い、一細胞からもライブラリー作製に十分なcDNA量を合成できる条件を確立した。これにより次元圧縮や発現変動遺伝子の抽出など、解析のコアになる技術の実装が完了した。

課題推進者: 佐藤 良勝(名古屋大学)

研究開発課題 3: *In toto* Bio-simulator

実施内容:

(1) 難環境理化学実験を対象としたAIロボットの潜在的タスクの発見と熟練者実験の学習

背景・目的：自然科学領域における実験データから対象に潜む潜在構造もしくは説明及び予測理論を発見するロボットを活用するためには、理化学実験の中でも、最適な実験系を特定し、データを収集・学習に供することが必須となる。本開発項目では、難環境下において、極めて熟練した技術者によってしか実現されえない自然科学タスクを同定し、また、その構造を記述し計画する記号的表現を取得するとともに、それらの実験情報から新規の理論を発見するために必要なデータ生成とAIロボットによる実証を行うことが必要であった。

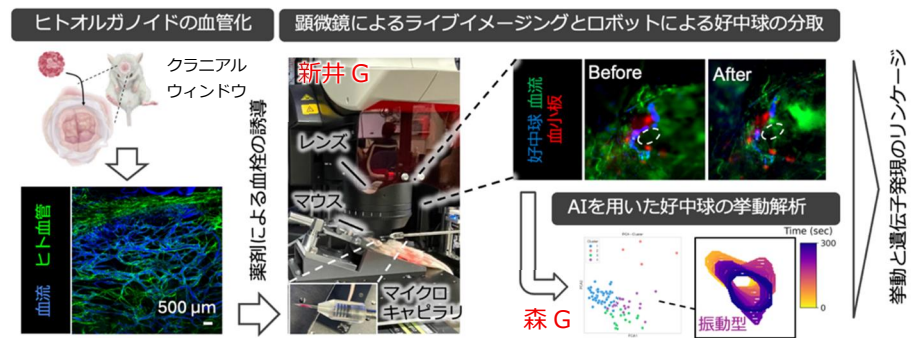
実施内容・成果：難環境実験として設定されたクラニアルウィンドウ（CW）モデルを用いた *in vivo* 観察系の確立により、熟練者が行う微細操作をAIロボットが模倣・実行可能となった。これにより、非熟練者でもマウスへのヒトオルガノイド移植とその後の観察実験が実施可能となり、操作再現性が大きく向上した。この操作手技をデジタル記録し、AI学習のための高解像度映像および音声データを統合することで、合計200件以上の失敗・成功事例が蓄積され、精緻なマニピュレーション学習モデルが構築された。

(2) AIロボット技術を活用した難環境における理化学実験による概念実証

背景・目的：生体防御を担う好中球において、特定の「挙動」が血栓症を増悪させることが示唆されている。しかし、ヒト血管内の免疫反応を直接観察する術はなく、好中球の挙動に対する理解は進んでいない。そこで、AI画像解析ロボットによるセルバイオプシー技術を搭載した血管化ヒトオルガノイドのライブイメージングシステムを構築し、細胞の挙動と遺伝子発現をリンクさせることで、血栓症を増悪させる好中球の病的挙動及びその分子機構を明らかにすることを目的とした。

実施内容・成果：

①ヒト肝臓オルガノイドをマウスクラニアルウィンドウに移植することで、血液灌流を有したヒト血管のライブ



イメージングシステムを構築した。②セルバイオプシー技術によって、ライブイメージング下で血栓形成部位に近接する好中球を直接分取することに成功した。③AIによる高精度な画像認識技術を活用することで、好中球の挙動を一細胞レベルで捉え、「振動型」という病的挙動を同定することに成功した（上図）。

(3) 仮説生成AIを活用した理化学実験と科学的発見の推進

背景・目的：シングルセル解析などの解析技術が普及したことにより、膨大で複雑な生命に関する記号情報を取得できるようになってきた。しかし、得られたデータを解釈し、どの遺伝子や因子が重要かを見いだしてモデル化する作業は、人間の手作業では非常に時間がかかり、科学的発見を阻む「ボトルネック」となっている。この課題

を解決するために、多数の遺伝子の発現データから相互のつながり（遺伝子ネットワーク）を推定し、新しい仮説を自動的に生み出す「仮説生成 AI（科学 AI）」が重要な役割を担う。本研究では、実データを AI に提供し、AI が生成した仮説の検証実験を行うことを目的とした（下図）。



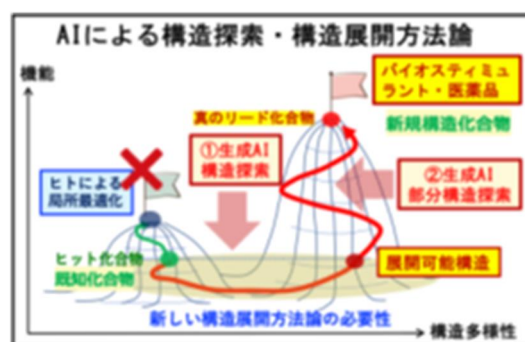
実施内容・成果：まず、研究チームが作製した「血管を含む肝臓オルガノイド」から取得したシングルセル RNA-seq データを AI に入力した。AI には、「成人の肝臓を基準に、オルガノイド内の細胞をより成熟化・多様化させるための培養条件（レシピ）を設計する」という課題を与えた。AI は遺伝子発現パターンを解析し、細胞の成熟や多様化に関わる遺伝子ネットワークを推定した。その結果、オルガノイド血管内皮細胞の発達を促す可能性のある遺伝子標的候補 20 件を選び出すことに成功した。さらに、そのうち 10 件について、リガンド分子（受容体を刺激する物質）や中和抗体、低分子化合物を用い、遺伝子機能を活性化または抑制する実験を行った。その結果、①肝臓特有の血管構造である類洞の内皮細胞成熟を促進する分子の同定に成功した。②複数の分子に同時介入する新たなレシピが、性質の異なる肝臓血管内皮細胞の多様化に機能することを見出した。この結果は、AI による仮説生成が、従来の人手による解析では難しかった細胞分化の制御メカニズムを発見する強力な手段となり得ることを示している。

課題推進者: 武部 貴則(東京医科歯科大学)

研究開発課題 4: AI 技術を活用したバイオスティミュラント候補物質の開発

実施内容:

バイオスティミュラントを含む農業薬剤や医薬品の開発では、人手による設計では局所的な最適化にとどまり、膨大な候補の中から実際に承認される化合物はごくわずかである。農業薬剤では約 14 万分の 1、医薬品では約 2.5 万分の 1 と、非常に低い確率でしか成功しない。しかし、生成 AI を活用すれば、この試行錯誤のプロセスを大幅に効率化



し、開発スピードと成功率を飛躍的に向上させることができる。具体的には、

- ① 新しい分子骨格を見出す生成 AI（竹内 PI）や様々な異分野論文情報から候補化合物を探索する生成 AI（笹野 PI）：ヒット構造の探索
- ② それらの候補構造を改良して活性を高める生成 AI（竹内 PI）：開発リード構造の探索

等の複数の生成 AI 技術を組み合わせることで、効率的なバイオスティミュラントの開発が可能になると考えて実施した。

(1) 生成 AI を利用する植物イオンチャネルを標的とした合成化合物を開発

本研究では、わずか 10 種の化合物合成で *in vivo* で気孔閉鎖を誘導する薬剤の開発に成功した。具体的には、バイオスティミュラントとして利用できる新しい化合物を見出すため、生成 AI・合成 (Synthia の利用)・自動評価システムを連携させた探索ループを構築した。

なお、バイオスティミュラントは安価に大量生産できることが重要なため、本研究では分子量 300 未満の候補に絞って選択した。初めに、ドッキングスコアを指標にしなが、生成 AI (竹内 PI) によって多数提案された、効果が期待できる化合物の情報を基に、逆合成解析ソフト Synthia を使用して、合成の可否判断と合成ルートを探した。この first cycle では、UA200~UA207 の化合物 7 種を合成した。そのうち UA200, UA201, UA206 がカリウムイオンチャネルを弱いながら阻害することが分かった。

これらの結果を再び生成 AI にフィードバックし、より良い構造を提案させる「探索ループ」を合計 3 回実施した。特に UA200、UA201 を基に、分子骨格を大きく変えずに部分構造を改良する生成 AI を使い、Second cycle で UA208、Third cycle で UA209 の化合物の合成を実施した。評価の結果、UA209 は *in vitro* だけでなく植物個体 (*in vivo*) でも気孔閉鎖を誘導することを見出した。

これにより、生成 AI と評価ロボットだけで新しいバイオスティミュラント候補を自動的に提案・合成 (逆合成は Synthia による判断; 化学合成のみ自動ではなく有澤が担当)・評価できる体制が実現し、実際に気孔閉鎖を誘導するバイオスティミュラントの開発に成功した。

(2) 生成 AI による 医薬品候補の探索への展開

本研究では、生成 AI による「新しい構造の探索」と「部分構造の改良」という 2 つの手法を組み合わせ、バイオスティミュラント開発で得た技術を 医薬品候補の探索にも応用できることを示した。

以下に、医薬品分野への代表的な実施例を示す。

- a) **脳関連疾患領域**: 生成 AI を活用することで、脳の重要な生理機能に関わるチャネルや代謝経路を標的とした改善薬候補化合物を、効率的に導き出すことに成功した。わずかな合成試行回数で有望な活性を示す候補を絞り込めた点は、従来の膨大な探索工程を大きく短縮できる可能性を示している。
- b) **がん領域**: 生成 AI が提案した骨格とその改良案をもとに、限られた数の化合物合成で、特定のがん細胞に作用する候補を得ることができた。現在、さらなる最適化と評価を進めており、将来的な応用に向けた準備を進めている。
- c) **感染症領域**: ウイルスの共通構造に着目し、生成 AI を用いて結合しやすい化合物構造を効率的に設計した。その結果、新興感染症にも応用可能な薬剤候補を短期間で得られる可能性が示され、次世代感染症対策に迅速に貢献しうる成果が得られた。

以上、生成 AI の活用によって、従来は多大な試行錯誤を要した創薬プロセスを「大幅に効率化」できることが明らかになった。少数の合成で有望な候補を得られ

る点は、医薬品や農業用途の化合物開発において「革新的な手法」となる。今後は、権利化の準備、他疾患への応用、産業界との連携を進め、実用化を目指す。

課題推進者:有澤 美枝子(九州大学)

3. プロジェクトマネジメント実施内容

(1) 研究開発プロジェクトのガバナンス

進捗状況の把握

本プロジェクトでは、PM・PM 補佐・SubPM から構成される代表機関の PM 支援体制のもと、Slack を活用した常時的な情報共有と、週次 PM 会議および月次のグループミーティングを組み合わせた運営体制を構築した。これにより、迅速な意思決定と正確な状況把握を実現した。課題推進者は、技術側の「数理基盤・AI」「Robot」と、応用側の「Plant」「Animal」の4グループ(重複参加あり)に属し、各月次ミーティングで進捗・課題・方向性を共有し、研究目標に応じて適宜軌道修正を行った。また、サイトビジット、課題推進者が一堂に会する全体会議、公開イベントなどを実施し、互いの状況把握と全体方針の共有を図りつつ、要素技術の開発・統合および科学実証の計画的な進行を管理した。

研究開発プロジェクトの展開

研究の展開においては、PM 制度を活かして研究者間の協働を強化し、進捗に応じて必要な調整や体制再構築を行った。国際連携も積極的に推進し、KTH をはじめ MIT、ANU、ETH、DLR 等、多数の海外機関と共同でワークショップやイベントを開催し、国際的な研究知の集積を実現した。

AI ロボット駆動科学の世界的潮流を背景に、本プロジェクト独自の実証機会を戦略的に設定し、国内外での招待講演、実機展示、共同論文執筆を通じて国際的評価を獲得した。さらに、ELSI や数理科学の横断的取り組みを通じて、AI ロボット活用に関する倫理・制度・標準化への対応を強化し、科学的価値の創出および社会導入に向けた体制を整備した。これらの活動により、学術的先進性と社会実装を両立させるガバナンスが機能し、総合知による研究推進が実現した。

(2) 研究成果の展開

科学的成果について検討が進んでおり、特に医薬品分野での展開可能性が認識されている。数理基盤、仮説 AI、遺伝子制御ネットワーク仮説 AI、フィジカル AI など、多様な AI 技術は企業との共同研究へ発展し、製薬・食品・化学・ロボティクス領域の国内外企業との連携が進展した。これにより、工学とサイエンスの両側面から事業化戦略が議論され、産業界への橋渡しが加速した。

プロジェクト終了後を見据え、開発した AI やロボットのソフトウェアを順次公開し、国内外の研究コミュニティが利用できる環境整備を進めている。特に化合物仮説 AI および遺伝子制御ネットワーク仮説 AI は創薬分野での利用が期待される。ロボットプラットフォームは高い独自性が評価され、研究インフラとして外部研究者が活用可能な形で発展させる計画が進行中である。さらに、国内外で実施した実機デモを通じて、将来構想に関する議論の場を提供した。

今後は、技術移転、共同研究、国際連携、人材育成を柱として社会実装と事業化をさらに加速させる。AI ロボット駆動科学の先駆的プロジェクトとして構築した技術基盤と国際ネッ

トワークを維持し、研究成果を持続的に学術・社会に還元する体制を確立していく。

(3) 広報、アウトリーチ

AI・ロボット分野に加え、サイエンス分野の学会でも積極的にアウトリーチを行い、プログラム外の研究者・科学者からの意見を取り入れながらプロジェクトを推進した。国民との対話にも力を入れ、多様な層が本プロジェクトに触れる機会を創出した。

a) AI ロボット駆動科学イニシアティブ (<https://ai-robot-science.com/>)

目標 3 牛久 PM、JST 未来社会創造事業の高橋代表・長藤代表とともに、「AI ロボット駆動科学イニシアティブ」を運営した。年 1 回のシンポジウムに加え、定期研究会を開催し、第 2 回研究会は本プロジェクトが主催した。牛久・長藤・原田研究室見学、9 件の招待講演、研究懇談会を企画し、大学研究者のみならず企業・マスコミも多数参加した。

原田 PM は 2025 年 10 月に同イニシアティブを社団法人化して理事に就任しており、今後も若手研究者・学生・企業を巻き込みながら国内プロジェクトとの連携や標準化活動をさらに加速させる予定である。



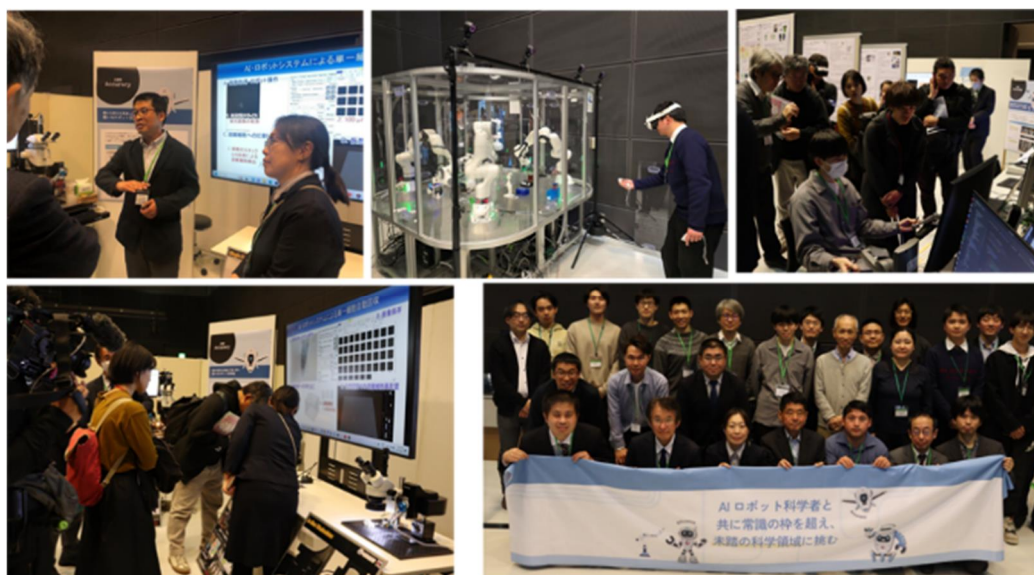
b) 中高生、国民との対話、国内外の研究者や企業との対話

各 PI は、プロジェクト当初より研究室見学に多数対応した。例えば、東京大学では、精華大学、TUM、KTH、香港大学など海外大学の訪問に加え、Asian Deans Forumでの学部長見学ツアー、The Rising Stars Women in Engineering Workshop における若手女性研究者ツアーなど、多様な訪問を受け入れ、成果を積極的に発信した。

また、中高生向けにロボット・VR 操作体験の機会を何度も提供し、次世代育成にも寄与した。内閣府主催「未来社会の担い手×ムーンショット研究者」交流会では講演と研究室見学を行い、事業全体のアウトリーチにも貢献した。

ICRA2024 ワークショップでは招待講演を行い、講演者の講演内容をまとめた 17 研究機関の国際共著レビュー論文 (Viewpoint Paper) に参画した。また、国内の AI ロボット駆動科学分野の研究プロジェクトを総括するレビュー論文にも共著として参加し、27 研究グループによる成果として Digital Discovery 誌に掲載された。

IROS2022 および ICRA2024 ではロボット実機の展示を実施し、多くの研究者に成果を直接紹介した。また、目標 3 公開シンポジウムでもロボット展示を行い、一般市民、企業、各種団体、マスコミへ成果を広く発信した。

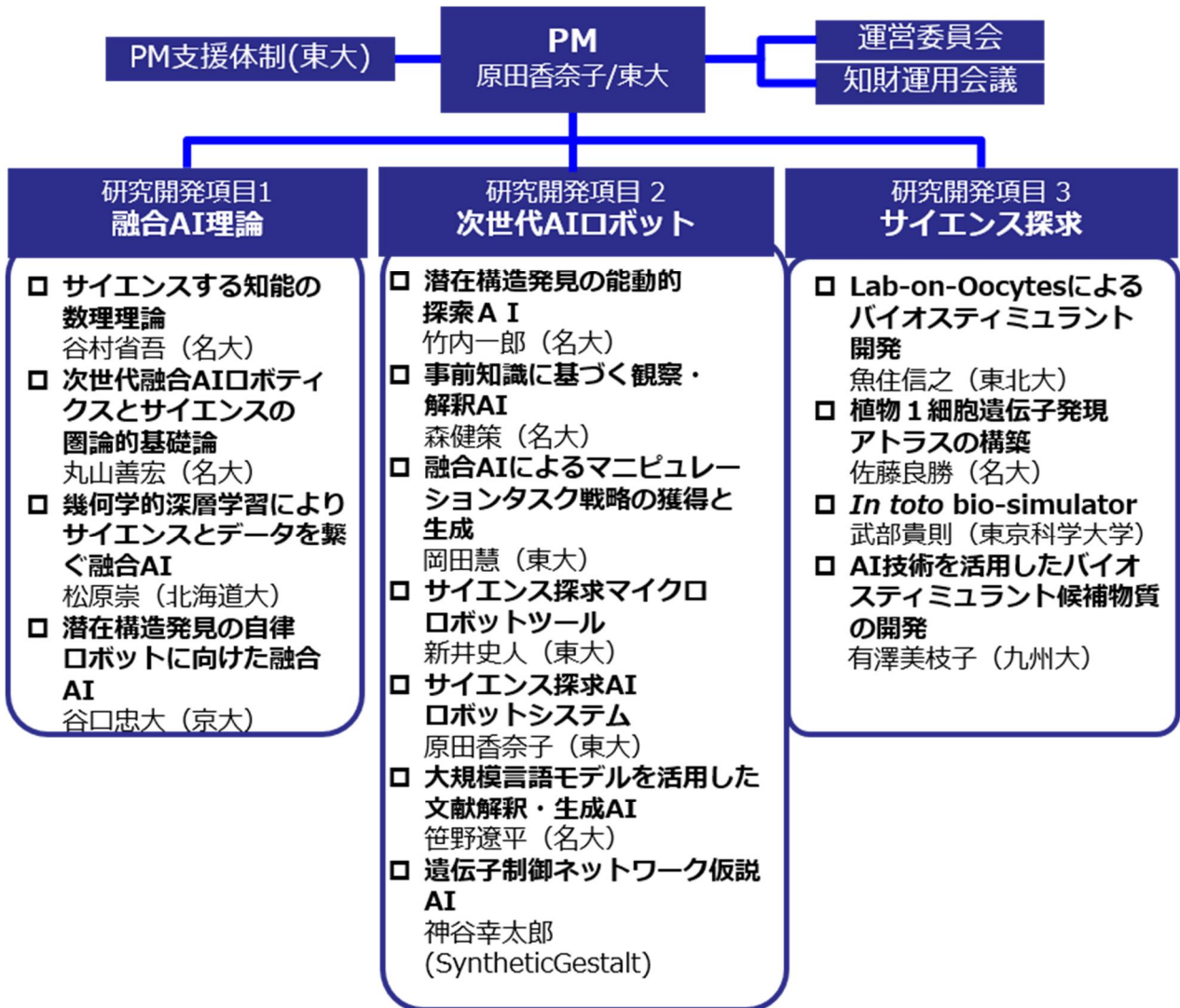


(4) データマネジメントに関する取り組み

データマネジメントは東京大学と名古屋大学が中心となり方針を策定し、各研究開発機関の合意を得ながら管理を進めた。すでに一部プログラムは公開されており、国内外研究者による活用が見込まれる。特に植物の根や気孔解析用のAIは、植物科学者がすぐ利用可能な形で開発されており、魚住PI・佐藤PI・有澤PIらが他研究者へ紹介し、すでに実利用が始まっている。

企業がライセンス契約を検討するプログラムについては、各PIが所属機関のTLOと連携し、企業との交渉を進めていく予定である。

4. 研究開発プロジェクト推進体制図



5. 研究開発プロジェクト成果

知的財産権件数				
	特許		その他産業財産権	
	国内	国際(PCT含む)	国内	国際
未登録件数	3	0	0	0
登録件数	0	0	0	0
合計(出願件数)	3	0	0	0

会議発表数			
	国内	国際	総数
招待講演	106	68	174
口頭発表	83	78	161
ポスター発表	52	26	78
合計	241	172	413

原著論文数(※proceedingsを含む)			
	国内	国際	総数
件数	3	93	96
(うち、査読有)	3	92	95

その他著作物数(総説、書籍など)			
	国内	国際	総数
総説	17	9	26
書籍	9	1	10
その他	0	0	0
合計	26	10	36

受賞件数		
国内	国際	総数
19	12	31

プレスリリース件数
9

報道件数
27

ワークショップ等、アウトリーチ件数
46