



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

実施状況報告書

2024年度版

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. 当該年度における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

本研究開発プロジェクトでは、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。」の実現に取り組む。

具体的には、科学者と対等に議論しながら、人では困難な環境(危険な環境、微細な環境、等)におけるサイエンス実験を行う AI ロボットを開発する。科学者と AI ロボットの関わり合い方を自在に変え、共に試行錯誤することで未経験の対象物や環境にも対処する。それにより 2050 年には、サイエンス分野において AI ロボットによる科学原理・解法の発見を実現する。

プロジェクトのマイルストーン

■ 2030 年までのマイルストーン

科学者の意図や思考をこれまでの活動などから自動的に推定し反映しながら、これまで人間だけではできなかったサイエンス実験を自律的に行う AI ロボットを開発する。

■ 2025 年までのマイルストーン

AI が膨大な実験結果を自動で解釈し、人間では気付くことができないような仮説を科学者に伝えることで科学者が新たな方針を立てることができる等、これまで人間だけではできなかったサイエンス実験を自律的に行う AI ロボットを開発する。

プロジェクト内の研究開発テーマの構成

自律的にサイエンス探求する AI ロボット「AI ロボット科学者」を実現するためには、「人間の科学者の身体能力を超えて実験操作を行うロボット身体」と、「人間の科学者の情報処理能力を超えた処理を行い、具体的な指示がなくても AI ロボットらしいやり方で創意工夫をしながら探求する AI」を開発して統合し、自律的にサイエンス探求を行う必要がある。事前に決められた実験をロボットが自動で大量に行うのではなく、現在は不可能な実験を AI ロボット科学者が自律的に行うことで、これまでとは質の異なる発見を可能にし、人とロボットが共に新しいサイエンス領域を開拓していく。本プロジェクトでは、ライフサイエンス分野における植物や動物を対象とした実験を対象として、AI 分野・ロボット分野の研究者と科学者が参加する総合知のプロジェクトとして共同研究を推進する。

(2) 研究開発プロジェクトの実施状況

■ 研究開発項目1:融合 AI理論

概要: AI が知識と技能を体系的に扱うための数理基盤を研究する。当該年度は、モノイダル圏とカーリー化を用いた科学的学習の方法論の一つは定式化できた。また、圏論的機械学習の理論を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に応用し、L2 Transformer というそれ自体圏論と独立した機械学習モデルとして新規性を持つ新たなモデルを提案すると同時に、圏論的機械学習の理論に基づく高速化を成し遂げ、遺伝子制御ネットワークへの応用を可能にした。深層学習を用いて代数的/幾何学的構造と潜在空間を接続することを検討し、数理的構造と結びついた保存則の有無、もしくは連成系の結合構造を対象とし、対象の力学的ルールを取り出す手法を開発した。さらに、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と潜在構造を活用した能動的探索手法の研究開発に取り組んだ。

■ 研究開発項目2:次世代 AI ロボット

概要: AI ロボット科学者の「ロボット身体」としては、モデル生物(アフリカツメガエル、シロイヌナズナ、マウス)への操作を行うロボットプラットフォームと理化学実験器具を扱うロボットプラットフォーム、およびそれぞれに対応するデジタルツインを開発した。微細な植物細胞や動物細胞、生体組織をハンドリングするマイクロロボットツールの機能統合を完了した。「科学 AI」としては、バイオステミュラント候補化合物の探索で、既に性能が知られている有機分子を部分改変したものを生成する AI を開発し、改変有機分子を生成できるようになった。また、植物の好適培地を効率的に発見するための方法を開発し、植物科学分野で一般的な培地よりも植物生育度の高い培地をより数多く見つけることができた。「ロボット AI(フィジカル AI)」としてはロボットの自律化に関する研究を進めた。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うえで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。マウスを用いたクラニアルウインドウタスクなど科学面の応用も始めた。

■ 研究開発項目3:サイエンス探求

概要:これまで不可能であった植物・動物に対する実験を対象として、プロジェクトで開発された AI 技術・ロボット技術を適用した。主に3つの具体例で研究を行っている。

(a) 農薬の代替となるバイオステミュラント:有機化合物の構造データベース、学術文献、有機化学の専門家の知識を導入した AI により、バイオステミュラントとして有望な新規の有機化合物の仮説を立て、実際に合成を行った。AI の仮説によって合成された有機化合物のバイオステミュラントとしての性能を評価するためのマイクロロボットツールと AI により、高効率でかつ高精度に評価を行った。

(b) 植物の成長・再生:植物の成長・再生の謎を解明し、更には成長・再生を促進する培地の研究を行った。AI 技術を駆使して好適培地の組み合わせを予測した。自動撮影装置によって得られた画像データを AI 開発チームへ自動転送し、開発した自動形態解析ツールへ自動で読み込ませることでシームレスなシステムを構築するため、ネットワーク環境の整備を行った。

(c) 未知の疾患の謎の解明:微細血管の閉塞に関する謎を解明して新たな診断や治療につなげるための研究を行った。細胞やオルガノイド等の微小组織・臓器を実験動物へ移植し、イメージングと画像解析 AI 等によって細胞・組織・臓器の障害における新しい現象理解を実現した。さらに、疾患発症のプロセスを解析する実験技術を対象とした AI 技術とロボット技術基盤を構築した。

(3) プロジェクトマネジメントの実施状況

本プロジェクトは分野横断的研究プロジェクトであり、数理分野の研究者、AI・ロボット研究者、科学者が実際のサイエンス探究を例題として共同研究を行いながら、それぞれの研究を発展させるためのマネジメントを行っている。アウトリーチとしては、ICRA2024 と目標3公開シンポジウムにおいて展示を行い、研究内容を紹介した。また、スウェーデン王立工科大学(KTH)とシンポジウムを共催し、開発した技術の生産システム分野への応用について議論を行った。

2.当該年度の研究開発プロジェクトの実施内容

(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

当該年度実施内容:

令和6年度の研究開発計画では、科学的学习の方法論を確立することを目標として掲げた。科学的学习の最大の意義は、既知のデータの蓄積から未知の出来事に関する予測ができるようになることにある。インプットとアウトプットの関数関係を単純に数多く記憶するだけでは、未知のインプットに対するアウトプットを決定できない。未知のインプットを受け入れられるように関数の定義域を拡張するためには、既知の関数から未知の関数への高次関係推論が必要であり、ここに圏論の高次関係記述能力が活かされる。また、我々にとって科学的関心のあるシステムのほとんどは時間変化する力学系であり、力学系の挙動の観察から力学系の状態を予測できるようになりたい、できれば力学系に所望の運動をさせたいという要求から制御理論が作られている。そうであれば、観察データの高次関係性を学習する AI によって未経験の環境における未体験の運動の制御も生成できることが期待できる。そのように考えたことから、当該年度は、圏論と力学系理論の方法を活用した科学的学习の方法論の定式化・開発を研究した。とくに科学実験の操作・手順を機械学習によって生成したり最適化したりできるようにするための数学的基盤を提供することを目指した研究を行った。

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」研究

当該年度実施内容:

最も重要な研究として、神谷 PI とマサチューセッツ工科大学のグループとの共同研究により、圏論的機械学習の理論を遺伝子制御ネットワークのためのトランスフォーマー(特に遺伝子制御ネットワークのための拡張された Attention Mechanism)の高速化に応用し、L2 Transformer というそれ自体圏論と独立した機械学習モデルとして新規性を持つ新たなモデルを提案すると同時に、圏論的機械学習の理論に基づく高速化を成し遂げ、遺伝子制御ネットワークへの応用を可能にした。

ここで言う圏論的機械学習の理論とは、本プロジェクトでこれまで研究を進めてきたニューラルネットワークのためのストリング・ダイアグラムの理論である。ニューラル・ストリング・ダイアグラムの理論は、通常は単なる絵として記述されるニューラル・アーキテクチャを数学的に形式化し、ディープラーニングを連続的なユークリッド空間以外の圏論的構造に適用することを可能にした。ニューラル・ストリング・ダイアグラムの理論は、ニューラルネットワークを抽象化する方向の理論であるのに対して、その後考案されたニューラル・ストリング・ダイアグラムの変種であるニューラル・サーキット・ダイアグラムの理論は、ストリング・ダイアグラムに実装的詳細を付加することで、実装的詳細に対する細やかな制御を可能にしたものである。

このニューラルネットワークのためのストリング・ダイアグラムの理論を実際の機械学習システムの高速化に応用しそれに成功したのが今回の研究である。従来、圏論は計算複雑性を上手く捉えられずシステムの高速化には使えないと考えられてきたが、今回の研究はその従来不可能と考えられてきたことが実際に可能であることを実証したという点で、当該研究コミュニティにおいて非常に大きなインパクトを持つものであると考えられる。

加えて、この成果は本プロジェクトの応用先である生命科学をダイレクトに扱ったものであり、神

谷 PI と密に協働することで、遺伝子制御ネットワークへの応用を可能にした。圏論の抽象理論から具体的な遺伝子制御ネットワークのためのトランスフォーマーモデルの高速化に至るこの流れは、今後の圏論的機械学習理論の応用のために paradigmatic example となるものであり、非常に意義の大きい具体的応用例を与えたと考えられる。

以上述べた研究以外にも様々な研究を実施し、圏論的機械学習の理論と応用を推し進めてきた。成果はこれまで通りコンスタントに論文として発表してきており、上で述べた研究成果についてもすでに論文執筆を完了し投稿済みである。プロジェクト終盤において、これまでの研究成果に立脚し、非常に優れた応用例を与えることができたと考えている。

課題推進者:丸山 善宏(名古屋大学)

研究開発課題3: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

当該年度実施内容:

サイエンスを行う AI ロボットを開発するには、サイエンスを司る知能やひらめきに相当する非常に抽象的なレイヤーから、個々のアクチュエータを制御する非常に具体的なレイヤーまでを統合する必要がある。近年、世界モデルを始めとするモデルベース強化学習や模倣学習といった機械学習技術によって、ロボットや熟練者の動作が持つ潜在構造を帰納的に抽出し、技能や意味を獲得することが可能になってきており、研究開発項目1「研究開発課題4:潜在構造発見の自律ロボットに向けた融合 AI」において取り組んでいる。この技能や意味を用いることで、ロボット制御の高度化が可能になる。

しかし帰納的なアプローチでは、技能の獲得に膨大なデータが要求されたり、獲得された技能がサイエンスの観点で無意味であったりする可能性がある。研究開発課題1及び研究開発課題2における抽象レイヤーで定義された知能の研究と研究開発課題4の技能を結びつけるための研究を実施する。

当該年度はテーマ(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」を実施し、科学実験のためのロボットのマニピュレーションタスクの実機実験において、令和6年度に達成した抽象代数学による制約を潜在構造に与えることによって、学習に必要なデータ量または汎化性能の検証を行った。またテーマ(2)「AI ロボットによるサイエンスの技術基盤の開発に取り組」み、具体レイヤーである動作や中間レイヤーである潜在構造から抽象代数学的構造(つまりルール)を帰納的に発見することを目指した。より具体的には、令和6年度に開発した陽に定義された数学的構造を制約として理論的に活用できる深層学習技術を用い、実際に未知の力学系について、エネルギー特性を含む物理法則の同定を行えることを実証するとともに、圏論的定式化を行った。

課題推進者:松原 崇(北海道大学)

研究開発課題4:潜在構造発見の自律ロボットに向けた融合 AI

当該年度実施内容:

本研究課題では潜在構造発見の自律ロボットに向けた融合 AI の研究開発を行う。自然科学領域における理化学実験を行うロボットを創造するためには、構造を記述し計画する記号的表現と不確実性をモデル化し感覚運動情報を統合する統計的表現を融合した AI 技術が必要である。

熟練者からの事前知識とスキルの教示に基づき、仮説や代替案を立案、実行、評価しつつ成長する AI ロボットシステムに必要となる融合 AI の研究開発を行う。確率的生成モデルや深層生成モデルを効率的に開発・推論する確率的プログラミング言語や深層学習ライブラリを発展的に活用し、潜在構造の発見と能動的な探索を理論的に統合し、環境や対象の多様性や不確実性に対して人間が習熟を要するような手順や微妙な操作を含んだ課題に対しても、操作を実現するシステムの実現を目指す。

特に、ロボットの複雑な手順や配置の不確実性を含んだ対象物体のマニピュレーションを主な対象とする。本研究開発課題では(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、(2)潜在構造を活用した能動的探索手法の研究開発に取り組む。また、理化学実験に関わる具体的な対象物に対して本手法を適用する実証実験を行いその有効性を検証する。

その中で本年度においては下記の内容をマイルストーンとして実施した。

(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:科学実験の対象系に類似した複雑な手順を要する不確実性を含んだ対象に対するマニピュレーションタスク(マウスのクラニアルウィンドウ作成の円状のドリリングタスクを対象として、そのタスクを模擬した実環境タスク)を開発した融合 AI により実現する。

(2)潜在構造を活用した能動的探索手法:潜在構造発見 AI と融合させ潜在構造の発見を3倍以上高速化する。

課題推進者:谷口 忠大(京都大学)

(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

当該年度実施内容:

本研究課題は AI・ロボットによるサイエンス探求を目指すとりくみのうち、仮説・設計の自動化を目標とするものであり、目標に向けて課題として「仮説・設計のシステム科学創出」と「実践研究における科学的発見」の2つの課題にとりくむ。前者においては、AI による仮説の立案・評価・検証を行う枠組を定式化し、汎用的な方法の開発を行うことを目指した研究を実施する。後者においては、植物研究、動物研究を行うグループの具体的な科学研究課題に共同してとりくみ、AI を活用した仮説・設計の有効性を実証する研究にとりくむ。当該年度は、具体的なとりくみとして下記の研究項目を実施した。

1つ目の研究実施項目は研究対象に関する潜在構造(仮説)を同定するための方法開発であり、今年度は、集合、系列、グラフ表現など多様な表現を持つオブジェクトから特性に強く影響を与える部分構造を同定するアルゴリズム、深層生成モデルを用いたオブジェクトの生成や編集を行うアルゴリズムを開発した。

2つ目の研究実施項目は AI や機械学習により同定された潜在構造(仮説)の信頼性を定量化するための方法開発であり、今年度は、様々な構造を持つ深層学習モデルに対して、汎用的に統計的信頼性を定量化するための統計分析法と計算アルゴリズムを、選択的推論の枠組を用いて開発した。

3つ目の研究実施項目は AI や機械学習により同定された潜在構造(仮説)の検証を行うための実験計画を行うための方法開発であり、今年度は、異なる精度、異なるコストを持つ実験系を複合

的に用いるための実験計画法に関するマルチフィデリティベイズ最適化のアルゴリズム開発とソフトウェア実装を行った。

4つ目の研究実施項目は AI や機械学習による仮説の生成、評価、検証を行うアプローチの実証であり、今年度は、バイオステミュラントのイオンチャネル特性に大きく影響を与える有機化合物を部分的に編集する方法を開発し、有澤 PI、魚住 PI と協力して、その有効性を検証した。

5つ目の研究実施項目はロボット実験における制御パラメータの同定のために必要な AI 技術を確立であり、今年度は、1 細胞分取に必要な 3 次元細胞トラッキングアルゴリズムと、培地最適化のためのベイズ最適化アルゴリズムを構築し、佐藤 PI と協力してその有効性を実証した。

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

当該年度実施内容:

本ムーンショット研究開発プロジェクトは、人間にとって困難な環境で行う実験や目に見えないような微細な対象物を扱う実験など、これまで人間だけではできなかったサイエンス実験を AI ロボットが創意工夫しながら、そして科学者と一緒に試行錯誤しながら行うことができるようになる将来を見越して研究開発を実施するものである。科学者と AI ロボットの協働でのサイエンス探求による科学的原理・解法の発見ができるようになる技術を開発するものである。

このような全体計画の中において、本研究開発課題では、事前知識に基づく解釈と理解の側面からサイエンス AI ロボットを支える技術の開発を行う。サイエンス AI ロボットにおける AI として必要とされるのは、

- (1) 事前に何らかの形で獲得された知識情報を基に判断や動作を実現する技術
- (2) 実際の動作の結果から知識を獲得し、それを事前知識と利用できる AI 技術
- (3) 人から与えられる事前知識を取り込むことのできる AI 技術
- (4) ロボット動作によって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

である。特に、オルガノド研究など、動植物実験(マウスを利用する実験や植物を培養する実験)において必要とされる様々な処置を行うサイエンス AI ロボットをターゲットとして、これを実現する上で必要とされる AI 基盤技術の実現に取り組んだ。

今年度は、動植物解剖構造やロボット先端に装着されたカメラおよび顕微鏡から得られるシーンに関する事前知識を基に、推論や判断を行うシステムを実現した。また、この推論と判断に基づくサイエンス AI ロボットの動作から得られる結果を事前知識として再導入できる枠組みの開発と解剖構造の解析精度の向上について研究を行った。観察結果から新たな知見を見出す仕組みの開発も行った。ここで得られた知識は、コンピュータのみが解釈可能な形式と人が解釈可能な形式の双方で表現され、人が解釈できる知識を基に、人とサイエンス AI ロボットの共進化を図る形を実現した。さらに、自然言語処理技術を用いて論文を解析し、その結果をサイエンス AI ロボットの推論・判断へと活用する技術も実現した。これにより、より有望な候補の推薦や培地条件の抽出のシステムを構築した。

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

当該年度実施内容:

本研究課題では融合 AI に基づいたサイエンス開拓ロボットのマニピュレーションタスク戦略の獲得手法の研究開発を行っている。

(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う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: 実マウスを用いたクラニアルウインドウタスクの実験を進めている。これまでに、頭蓋骨の切削自体は可能だが、脳への損傷を最小限にするための貫通のリアルタイム判定に関して、ドリルによる頭蓋骨の操作反力の違いへの対象が課題となることが明らかになった。一方で、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ロボットならではのタスクは実現しており、科学面での応用の探求を始めている。

(3) 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: 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: ワイヤ駆動型マニピュレータの機構とワイヤ配置の設計最適化法として、ワイヤ配置による手先発揮力や速度などの運動面での最適化だけでなくワイヤの経路による身体の幾何学的形状をも最適化の評価に組み込むことで、実ロボットで現実的に実現可能なロボット設計における多目的最適化法を提案した。

(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、接続状況に応じてプログラムを実行できることを示した。

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

当該年度実施内容:

本研究課題では、自然科学領域における理化学実験を対象として、熟練者からの事前知識とスキルの教示に基づき、仮説や代替案を立案、実行、評価する AI ロボットシステムに必要となるサイエンス探求マイクロロボットツールおよび、これらをタスクに応じて適切かつ円滑に利用するためのシステム技術に関する研究開発を行う。マイクロロボットツールの機能を積極的に活用することで、人が事前に手順や操作を十分設計できない課題に対しても、人と AI ロボットの協働により、創造的価値であるサイエンス探究を支援するシステムの実現を目指す。特に、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を対象とする。

- (1) サイエンス探求マイクロロボットツールの共通技術として、サイエンス探求マイクロロボットツールと AI ロボットシステムの統合設計を進めた。具体的には、顕微鏡下におけるリコンフィギュラブルなツール制御システムの機関技術となる、Modular Robotic Extender (M-REx)の機能評価の構造改変を進め、実験プラットフォームとの統合を進めた。M-Rex は、複数の多軸制御ステージに嵌合する 5 軸 RCM 機構として構造ユニットが構成され、タスクに応じて構造を変化させることで、異なる性能を発揮する微細作業操作が達成可能なものとした。具体的には、機構の長さを意図的に変形することや、EM ブレーキを用いた支持点の角度を調整することで、作業領域の広さや構造の変化に対して、アダプティブに対応できるようにした。構造の最適化には、URDF を用いたシミュレーションを用いたダイナミックな構造改変手法を検討した。またさらに、ヒンジに剛性を必要に応じて変更可能となるよう、MR 流体を使用した多軸の剛性可変ジョイント機構 (VS Joint) を作製し、その性能を評価した。また、QCR カセンサは、高機能化、集積化を進め、実機搭載によるサイエンス実験への適用を進めたほか、多軸化時の精度保証に対する検討をすすめ、実用化的なロボットへの適用への道筋を示した。またさらに、MEMS センサ技術と 3D プリンタの融合した 3 次元微細構造を有するピペットの機能を M-REx へ搭載し、Lab-on-oocyte やシングルセルトランスクリプトームのための細胞分取実験系に組み込める構造とした。以上のシステム統合技術について、これまでのブラッシュアップ、性能評価を滞りなく完了し、各種応用のサイエンス実験に向けた実装と適用を滞りなく完了した。
- (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として、Lab-on-Oocytes のシステムおよびマイクロロボットツールの統合設計、および実験自動化を進めた。具体的には、卵母細胞を用いたボルテージクランプシステムのツール評価を行い、ロボットシステムを用いた卵母細胞を用いたボルテージクランプを実現し、さらに卵母細胞へのツールの自動位置決めや遺伝子導入の自動化を進めた。顕微鏡、双腕ロボットステージ、イメージ解析、QCR カセンサ、TEVC アンプの協調による TEVC のキャピラリー刺入操作の自動化をすすめ、微細作業空間での精密な TEVC 計測を行えることを示した。従来示してきた QCR カセンサを用いた微小柔軟物体との力の相互作用のリアルタイム評価と微弱な力信号のフィードバック、画像認識を用いた細胞膜変形を用いたフィードバックにくわえて、計測用ガラス電極の接触・貫通を電気信号から検知する手段を開発し、これらの技術の統合化をすすめた。これにより、TEVC のキャピラリー刺入操作や計測動作を自動化し、実際に OOCYTE に発現した KAT1 に対する電気生理特性の計測が可能であることを実証評価した。さらに、計測は当初目標の 80 s 以内 /1 細胞を達成し、既知のバイオスティミュラント候補化合物である NS5806 を用いた計測誤差は 2.9%以内であることが示された。これより TEVC の自動化要素技術を滞りなく評価し、バイオスティミュラント候補化合物の評価システムの機能統合を滞りなく完了し、実験ループを遂行した。
- (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として、単一細胞操作のためのマイクロロボットツールの機能統合を行った。シロイヌナズナのプロトプラスト分取の自動化システムの改良と、細胞操作のためのツール機能評価を行った。細胞分取プラットフォームは、共焦点/明視野併用の撮像プラットフォームを構築し、マニピュレータ制御のための空間キャリブレーションをのものと、単一細胞の分取が実現可能であることを示した。また、共焦点画像による細胞と根の位置検出後、OPENGLによってデジ

タルツイン環境で3次元再構成を行い、目的の細胞に正確にアクセスして細胞を回収する技術を確立した。また、圧電素子駆動の微小液量制御式ポンプと高速駆動バルブを含む単一細胞分取ツールを評価し、pL オーダの液体の吸引、吐出を行いつつ、シリンジポンプを用いて大容量の吸引、吐出制御が可能になるよう、システムを拡張した。さらに、LLM を用いた実験操作の自律化を行うべく、ChatGPT-4o のプロンプトを解釈してタスクを逐次的に実行する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 4.2s)で細胞を分取することに成功した。さらに、酵素処理によって単一細胞を遊離させるプロセスでは、ダブルバレルピペットによって酵素の局所濃度を制御し、細胞分取の標的を集中的に有利させる新規技術を創出した。これにより、高速高精度に分取するためシステム統合を滞りなく完了した。

- (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として、センサ内蔵型の機能性マイクロロボットツールのシステム統合を行った。具体的には、圧電インパクト駆動機構 (Piezoelectric Impact Drive Mechanism) を採用したプラットフォーム全体のシステム改良を進め、回転機構を導入したオルガノイド穿刺、細胞吸引操作ツールを含む細胞組織分取システムの統合を行った。これにより、マウスのクラニアルウィンドウに誘起した血栓性疾患組織、ならびに、その機械特性を模倣した人工ゲル材料を対象として、IDM による高精度かつ再現性の高い穿刺操作を行った。さらに、並進/回転動作を生起できる機能拡張された IDM を作製し、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。これにより、これまで困難であった高粘弾性体のツール穿刺と組織分取を両立することが可能となり、クラニアルウィンドウに誘発した疾患組織のサンプルに対する細胞分取の自動化を滞りなく進めた。これらより、In-toto Biosimulator を用いた疾患モデルの局所遺伝子分析のためのシステム統合を滞りなく完了した。

課題推進者:新井 史人(東京大学)

研究開発課題5:サイエンス探求 AI ロボットシステム

当該年度実施内容:

本研究課題ではサイエンス探求 AI ロボットシステムの研究開発を行う。自然科学領域における理化学実験では、人間には困難な環境において、サンプル数や実験時間が限定された状況で、事前に手順や操作を十分設計できない場合においても、ウェットで微細な柔軟物である対象物にも操作を行う必要がある。将来的な拡張や汎用化を視野に入れたシステムを開発し、他の研究課題推進者の成果を統合しながらサイエンス探求を実現することを目指す。

具体的には(1)サイエンス探求 AI ロボットプラットフォームの開発、(2)人と AI ロボット協働の研究を行っている。(1)では、これまでにモデル生物(アフリカツメガエル、シロイヌナズナ、マウス)への操作を行うロボットプラットフォームと理化学実験器具を扱うロボットプラットフォーム、およびそれぞれに対応するデジタルツインを開発した。また、(2)では、従来のオートメーションでは自動化できないタスクを対象とした自律化の手法を開発している。具体例として、形や厚さ、物性などのばらつきが大きい対象物に対して、進捗や相互作用を活用することにより対象物の特徴を計測せずに切削する技術を開発した。実証として、鶏卵の薄皮を破らずに卵殻のみを

切除するタスクを行い、91.7%の成功率を達成した。

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

当該年度実施内容：

本研究課題では、大規模言語モデルを活用した文献解釈・生成AIの研究開発を行う。人と AI ロボットの協働によるサイエンス開拓において、人がこれまで行ってきた研究等から得られた大量の知見をAIロボットに獲得させるにはAIによる文献の解釈が必要であり、また、AIロボットが実施した実験結果やAIシステムが発見した知見を人に分かりやすく伝えるには論文等の形式の文献を生成するのが効率的であると考えられる。近年、大幅に高性能化した大規模言語モデル(LLM)を活用しつつ、他の研究課題推進者と協力し、AIによるデータ探索に適した形式で情報を文献から抽出する技術、AIロボットが実施した実験結果や観察と解釈のAIにより獲得された知見等を論文化するシステムの構築を目指す。特に、植物の発生・再生を促進する好適培地やバイオステイミュラント関連の論文を主な対象とし、(1) LLM を用いた文献からの情報抽出、(2) AI ロボットにより得られた知識・知見からの論文生成の研究を行う。

その中で本年度においては下記の内容を実施した。

- (1) 植物の発生・再生を促進する好適培地に関する文献を対象として、好適培地に関する論文を識別する LLM ベースの分類モデルを構築し、大規模なデコーダ型 LLM を用いた場合と遜色ない性能を維持しつつ、5 倍程度高速に動作するモデルを実現した。また、バイオステイミュラント関連の論文からバイオステイミュラントとして有望な化合物を高速かつ低コストに予測する LLM ベースのモデルの構築を行った。具体的には、イオンチャネル阻害剤として有望な化合物を識別する LLM ベースの分類モデルを構築した。従来の LLM を用いた場合より小規模なモデルでも高い性能を達成した。
- (2) 実験結果からの考察文自動生成を実現するため、論文中の表とその考察文の対応情報を含むタグ付きデータの構築に取り組んだ。また、構築したデータを用いて LLM に基づく各文のタグ予測モデルを構築した。LLM として、BERT-large、DeBERTa-large 等を用いた実験の結果、DeBERTa-large を用いた場合、タグの分類精度 72.4%を実現した。また、サーベイ論文の自動生成を目的とし、生成したいサーベイ論文のキーワードが与えられたとき、キーワード検索と論文の引用関係に基づき候補論文集合を作成し、そこから引用推薦の枠組みを用いてサーベイ論文が引用すべき論文を推薦するシステムを構築した。

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

当該年度実施内容：

本研究課題では、遺伝子制御ネットワークの仮説 AI の研究開発を行った。AI ロボット科学者の頭脳の一部として、人間では扱えない多様かつ希少なデータである遺伝子発現解析データから GRN の推定を行う科学 AI を開発した。特に本プロジェクトでは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・連携先としており、対象とした病気の研究におい

ては、その病気の再現がボトルネックとなっており、特定の病気を再現できるオルガノイドの組み立て方に相当する GRN を推定した。具体的には、(1) GRN の仮説を推定する AI の開発、ならびに、(2) AI が提案する仮説の検証を行った。

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

当該年度実施内容：

AI が提案した化合物について、ロボットを用いた電気生理学測定による阻害活性を検出した。この化合物は気孔閉鎖においても効果のあることが明らかになった。目的とおりバイオスティミュラント化合物を獲得した。

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

当該年度実施内容：

本研究開発課題では、人と AI ロボットの協働によりはじめて創造的価値を生み出す難環境の理化学実験として、1 細胞からの再生技術としての好適培地の開発と、細胞位置情報とリンクした植物 1 細胞遺伝子発現アトラスの構築を目標に研究を行っている。当該年度では、植物の主要必須元素である窒素(N)、リン(P)、カリウム(K)に着目し、無数に存在する含有量の組み合わせの中から AI の提案に基づいて総根長を長くする組成比率の検証を行った。また、植物 1 細胞遺伝子発現アトラス構築にむけたマイクロロボットツールの最適化および一細胞遺伝子発現解析に向けた条件検討を進めた。

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、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

当該年度実施内容：

AI ロボット技術を活用することによって初めて実現される、難環境における理化学実験タスクを同定するとともに、自律的に仮説生成、実行、解釈を実現するための AI 構築と出力ループの確立に向けた、熟練者による学習データの生成と検証を進めた。特に、細胞やオルガノイド等の微小組織・臓器を実験動物へ移植し、イメージング解析等によって細胞・組織・臓器の障害における新しい現象理解を実現した。さらに、疾患発症のプロセスを解析する実験技術を対象に、AI ロボットの潜在的タスクの発見と熟練者実験の学習を通じて、質の高い実験データの生成・解釈・修正をシームレスに探求可能なマニピュレーション技術基盤を構築した。そして、実験動物への微小操作実験に対して、これらの技術基盤を適用する実証実験を行い、その有効性を検証した。さらに、仮説生成 AI が出力した、オルガノイド細胞の成熟に関連する遺伝子発現制御ネットワーク (GRN)

の推定結果に基づき、有効な標的遺伝子に対する検証実験を実施した。以上を通じて、in toto ヒトオルガノイドモデルを用いた難環境理化学実験における AI や画像解析が担う潜在タスクと、仮説生成 AI と連携したオルガノイド実験による科学的発見推進ループを見出し、以下の4つの発見を達成した。

- (1) AI 画像解析グループと共同で、一細胞挙動解析技術(single cell choreography)を発展させ、世界初の立体的な細胞挙動を解析するための基盤手法を新たに開発した。
- (2) ATG 誘導性の血管内皮障害モデルにおいて、scChoreography を適応することで、血管内に接着する好中球の中で、扁平性が高い細胞集団が細胞障害因子である neutrophil elastase を放出する傾向が高いことを発見した。
- (3) LPS 誘導性血栓症マウスモデルにおいて、ロボティクスによるイメージング下細胞分取を行い、血栓近傍の好中球を含む細胞集団を分取することに成功した。
- (4) 採取した組織片から、その後の網羅的遺伝子発現解析に耐えうる mRNA 量を回収できることを見出した。
- (5) 大規模なシングルセル遺伝子発現解析データから GRN を推定する新規 AI モデルによって選定された、オルガノイドを構成する血管内皮細胞の成熟や多様化を促す遺伝子標的候補 10件について検証を行った。

課題推進者: 武部 貴則(東京医科歯科大学)

研究開発課題4: 物イオン輸送体を標的とするバイオスティミュラント候補物質の開発、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

当該年度実施内容:

本課題では、植物イオン輸送体阻害剤・活性化剤の候補化合物の AI 分子設計と類縁候補化合物の有機合成を行う。

今年度、竹内 PI の進める AI への知識導入について、予備的に複数の化合物からあるタスクの解を入力する導入方法について試行した。また、AI 分子設計とシミュレーションによって、3 度の試行(第 1～第 3 サイクル)で提案された化合物自体の合成を実施した。その結果、第 1 サイクルよりも第 2 サイクル、第 2 サイクルよりも第 3 サイクルでの候補化合物で、植物のイオンチャネルを賦活化し、in vivo で気孔閉鎖を誘導する化合物を見出すことができた。また、同様のイオンチャネルは植物に加えて動物も有することから、動物のイオンチャネルを賦活化する機能を有する化合物を同時に見出すことができた。今年度は、合成まで含めたループをまわす過程を 3 度実施できたことと、化合物のイオンチャネルの賦活化機能探索に関して、植物と動物のいずれにおいても良好な知見を得ることができた。

課題推進者: 有澤 美枝子(九州大学)

3. 当該年度の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

重要事項の伝達を迅速に行うため、各大学の課題推進者及びプロジェクト参加者との連絡は Slack とメールを併用し、オンラインや対面での打ち合わせを行いながら運営した。各大学の課題

推進者は、技術グルーピングとしての AI グループ、Robot グループ、応用としてのグルーピングである Plant グループ、Animal グループの 4 種類のグループで進捗を把握しつつ、必要に応じて議題毎のミーティングを併用しながら共同研究を進めた。PM と 2 名の PM 補佐は原則としてすべての定例会議に参加することで全体の進捗を管理した。PM と SubPM の 5 名は毎週 30 分の意見交換を行い、プロジェクトの方向性を確認しながら研究を進めた。

(2) 研究開発プロジェクトの展開

要素技術の開発が進み、要素技術を統合したシステムとしての統合がさらに加速した。また、スウェーデン王立工科大学(KTH)との技術交流を行うなどして国際連携に取り組んだ。

(3) 研究成果の展開

技術動向については、アラート機能などを活用して情報収集しており、Slack での共有チャンネルを用いて、重要なニュースや論文、ワークショップやセミナーの情報を共有した。アカデミアを対象とした学会だけでなく、企業を対象とした展示会に参加し、要素技術としての社会実装を見据えた研究開発のマネジメントを行った。

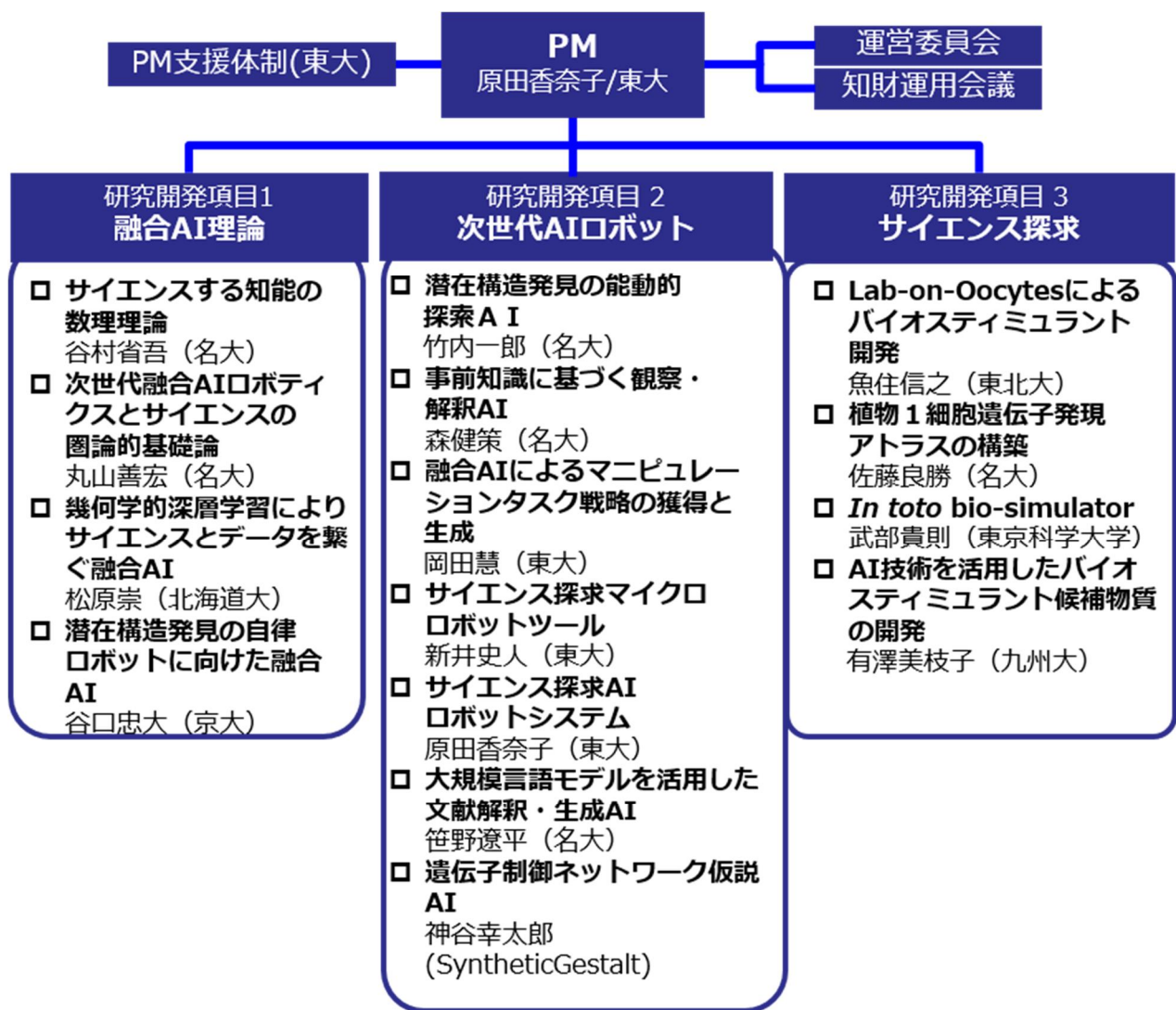
(4) 広報、アウトリーチ

AI 分野、ロボット分野の学会だけでなく、サイエンス応用分野の学会においても積極的に発表を行い、工学系だけでなく、AI ロボットの将来のユーザーとなる科学者からもフィードバックを得ながら研究開発を行った。未来社会創造事業と共同で第2回 AI ロボット駆動科学研究会を主催し、研究室見学を行うとともに、若手や学生、企業を対象とした研究会を通じて AI ロボット駆動科学の推進について議論を行った。また、ICRA2024 と目標 3 公開シンポジウムにて展示を行い、研究内容を紹介した。スウェーデン王立工科大学とシンポジウムを共催し、産業用ロボットや精密工学技術のバイオメディカル分野への応用における課題についての講演を行った。

(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については、東京大学及び名古屋大学が中心となって、データマネジメントの方針を決定し、各研究機関との合意を得ながら、データの管理を行う。当該年度は、引き続きソフトフェアの公開を行った。

4. 当該年度の研究開発プロジェクト推進体制図



5. 当該年度の成果データ集計

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	1	0	0	0
登録件数	0	0	0	0
合計(出願件数)	1	0	0	0

会議発表数			
	国内	国際	総数
招待講演	32	14	46
口頭発表	32	23	55
ポスター発表	21	5	26
合計	85	42	127

原著論文数(※proceedings を含む)			
	国内	国際	総数
件数	1	26	27
(うち、査読有)	0	25	25

その他著作物数(総説、書籍など)			
	国内	国際	総数
総説	3	4	7
書籍	8	0	8
その他	0	0	0
合計	11	4	15

受賞件数		
国内	国際	総数
5	4	9

プレスリリース件数
2

報道件数
6

ワークショップ等、アウトリーチ件数
9