

# AI操る「ロボ科学者」

研究開発

## DX始動

Ⓜ

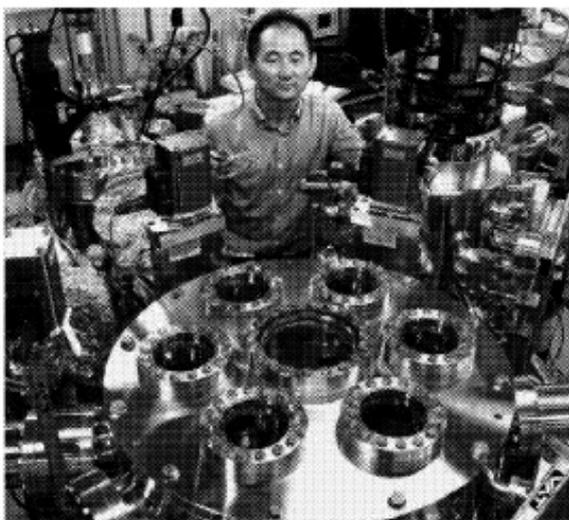
東京工業大学（東京・目黒）の物質理工学院の一杉太郎教授の研究室では、新規材料開発を担当する「ロボット科学者」が働いている。薄膜材料などを様々な実験条件で自動的に試作・評価する実験装置だ。

## 新材料・薬の探索に革新

の探索実験ができる装置は世界で初めてという。電子部材に使われる二酸化チタン材料の電気抵抗が最小になる合成条件をこの装置を使い見つけることに成功した。人手による実験と比べ探索時間は約10分の1で済む。「AIによる材料探索では欧米が先行している。ロボットによる試作・評価機能をアラスしたこの装置で巻き返したい」。次世代の全固体電池の研究で知られ、政府のメテリアル戦略有識者会議のメンバーでもある一杉教授は語る。

## 最速計算機で世界に対抗

雑な研究対象を最新のデータ科学で解き明かしたりする。科学の姿もデジタルで変わる。「AIが発見した薬剤候補」の初めての臨床試験が現在、日本で進んでいる。大日本住友製薬がAI創薬技術を持つ英エクスシリア社と共同開発した強迫性障害向けの候補物質「DSP-1181」だ。



物質探索ロボットシステムは全自動で実験ができる―東京工業大学提供

通常4年半程度かかる探索研究をAIを使うことで約1年に短縮した。創薬分野では自然言語処理AIで学術論文を読み込んで候補物質を探すが、様々な情報技術が研究に使われ始めている。AIに物理現象の正確な解析ができるのか。長年の難問に日本の研究グループが答えを出した。神戸大学の谷口隆晴准教授と大阪大学の松原崇准

教授らは、エネルギー保存則などの物理法則が成り立つことを保証しながら、物理現象の予測やシミュレーション（模擬実験）ができる新たなAI技術を開発した。波の伝播（でんぱ）や液晶成長、材料の亀裂の進展といった様々な物理現象の解析を、観測データをもとに正確に進められるという。両氏の論文は2020年12月にオチオミックス解析」という手法で解析した。作物や微生物、土壌の各要素の複雑な連関をネットワーク解析した。市橋氏は「従来経験に基づいていた農業ノウハウの理論づけができた。農業を工業のセンスで推進する道が開かれた」とデジタル化の意義を説明する。

研究開発のデジタル化には計算機資源が不可欠だ。世界最速のスーパーコンピュータ「富岳（ふがく）」が20年に稼働したほか、産業界技術総合研究所のAI専用スパコン「ABC1」も増強された。「一時期のように計算パワーで日本が海外に力負けていた状況は変わりつつある」（辻井潤一・産総研人工知能研究センター長）

これらの計算インフラを活用し、AIやデータを科学など次世代の研究手法を「自家薬籠中の物」にすることが急がれる。（編集委員 吉川和輝）