

2. 畠山 欽(東京工業大学)

「科学推論のための自己学習を行う大規模言語モデルの構築検討.」

リモートで行われた講演の概要は以下の通りである。

- モデル開発は日本が遅れており、経産省などがモデル開発の援助を進めているものの、昨年までの開発規模はOpenAIなどのトップランナーに比べ0.01~0.1倍程度である。最先端クラスの1 T パラメータ程度のモデルを作る際には、できれば数十T tokenのデータが欲しいが、テキストデータが枯渇しはじめている。こうした背景も受け、AIが自ら学ぶ新たなパラダイムのシフトが生じている。
- 化学推論においても、学習に自由に使える学術論文が少ないという点で、課題が似通っている。化学実験に関する計測データに記載される実験条件と実験結果から、GPT-4Iに「なぜそれが引き起こされるのか」を考えさせる検討を行った。この作業により、数値のみが記載された物性データベースから、LLM用の学習用テキストを生成することが可能になった。
- 上述の手法によって生成したテキストデータ、例えば10件程度をLLMに学習させるだけで、未知の物質に対する物性の予測が可能になることを確認した。この際、AIが「理由を考える」過程が非常に重要なことが分かった。実験条件と結果の関係性のみを学習させる、つまり“Reasoning”のステップを除外した場合には、精度が大幅に下がることを確認した。
- ローカルLLMが“Reasoning”と学習を自己回帰的に行わせることで、言語モデルが与えられた実験データを矛盾なく説明できるような「理論体系」を構築できるかを検証した。このような自己改善ループによって、自律的にAIの予測性能を高められるほか、人間にも納得可能な説明体系を作れる可能性があることを見出した。一方で、学習途中で精度が頭打ちになってしまうこと、改善精度が基盤モデルの性能に大きく影響を受けてしまうなどの課題が明らかとなった。そのため、科学技術の基盤モデルの構築の必要性が求められている。

なお、発表後はアクティブラーニング向けロボット開発についてや、自己改善の限界についての質疑があった。

【発表資料】

https://drive.google.com/file/d/1jAbTRXMf9Ru_S3ljwAinO5-5EcEGH4b1/view?usp=drive_link

3. 熊谷 亘(東京大学)

「機械学習の自動研究に向けて。」

講演の概要は以下の通りである。

- 研究開発のペースが非常に加速しており、約23ヶ月ごとに倍増している。これらの成長は人類にとって基本的にはプラスだが、先端の研究にキャッチアップすることの難しさをもたらしている。AIを活用した自動研究によって、AI研究者の複製性や、コンピューティング技術とアルゴリズムの急速な進歩に対応することについて検討している。
- 研究プロセスを以下のように分解することで、現時点でほぼ全てのステップが機械学習的なタスクとして定義可能である。
 1. 問題定義段階(ツール利用、文献理解、問題の特定)
 2. 研究実行段階(研究計画、理論的分析、実装)
 3. 知識共有段階(論文執筆、スライド作成)
- 現在は、機械学習モデルのコンポーネント分割と、各コンポーネントの自動改善コンポーネントをLLMによって生成することによって、新しい機械学習モデルを探索する方法について研究している。

なお、発表後は探索の範囲についての質疑があった。

【発表資料】

https://drive.google.com/file/d/1zZuxvz84lYANIR9oGVE96wacJRX2bXvJ/view?usp=drive_link

4. 五十嵐 康彦(筑波大学)

「大規模言語モデルによる文献知識を組み合わせた少数化学実験データ解析への展開。」

講演の概要は以下の通りである。

- 現在「スパースモデリング」を脳科学や宇宙科学に展開し、最近では物質化学の解析を実施している。スパースモデルはデータが高次元になると仮説提案が困難になるため、LLMなどで仮説の最適化ができないかというテーマで検討している。
- 線形回帰の場合、変数を刈り込むことで仮説を刈り込むことができる。検証する対象を絞れば今までの科学者の仕事と同様なものができるのではというスタンスで研究をしてきた。機械学習において自動的に優れた変数を選択することは難しいため、人間が数個の変数を選択し、それに基づいてスパースモデルをして刈り込むと良い結果が得られた。また、規模言語モデルによりAll descriptors → Knoeledge-orientedとすることや、専門スパースモデルでData orientedの仮説に絞り込むとさらに良い結果が得られる。スパースモデリングによる記述子抽出では、どの記述子が重要かを考えた時に、 2^p 通りの組み合わせを評価すればよいと考えた。
- 科学の素材探索などは、実際は機械学習をするほどデータ量がないため、データ科学と経験やカンの適度な融合が重要である。LLM登場により何かできないかと検討を開始した。線形回帰モデルで事後確率の平均値を求めたところ以下のことが分かった。
 1. データが多くなれば信頼度が増加する
 2. ただし、科学の事前知識のある専門家はそのモデルの存在に気づいていた
- 以上の現象を踏まえ、事前情報としたLLMを活用し、大規模言語モデルで事前知識を導入した場合にどうなるかを検証した。まず、LLMによる記述子の信頼性を向上させる指標を模索したところ、実際に多く選ばれている単語があることを確認した。また、少量のデータであっても、LLMの事前確率により、よりたしからしさの高い因子が選ばれた。

なお、発表後は検討の手法についての質疑があった。

【発表資料】

機密情報が含まれるため非公開

5. 松田 翔一 (NIMS)

「ロボット実験と自律実験支援ソフトウェアNIMOの連携による蓄電池用電解液材料探索。」

講演の概要は以下の通りである。

- 蓄電池におけるAI駆動材料開発としては、結晶性材料があれば第一原理計算を用いて、性能の予測ができるようになってきている。一方で、電極・電解液界面の構造は、計算的に取り扱うことが難しい。さらに、実用的には、複数の添加材が界面被膜形成のために利用されており、その材料設計は非常に難易度が高い。このような電解液材料の最適化において、実験的スクリーニングを自動化することができれば、検証作業が楽になるのではないかと考えた。具体的には、バイオ領域から分注装置や搬送装置を利用し、マイクロプレートで電池評価セルとして使うことにより、電池に対する添加液の組み合わせを高いスループットで評価できるようなシステムを構築した。これにより様々な添加剤の組み合わせを検査できるようになり、人の場合は1日当たり10個程度で心が折れる作業であったが、ロボット化によって1日1000このサンプルの評価が可能となった。このようにして開発したロボット実験システムを用いて、20万通りの候補の中から性能の良い添加剤の組み合わせを発見することができるようになった。
- ベイズ最適化を含む様々な探索手法を用い、有望な添加剤の組み合わせを探索した。初期効率でスクリーニングしているので、まだ長期効率はわからないが、2倍程度の改善まで達成することができた。今後は、長期寿命予測の技術と組み合わせた展開が期待される。
- HILLにおいて、人の介入がボトルネックになっているが、データプラットフォームを使用し、AIが分からなくても解析できるようにし、自律実験支援ソフトウェアNIMOを開発・配布している。これは、ai_tool.pyに対して複数のアルゴリズムをすでに搭載している状態で提供されるので、Cnadidate / Proposals fileを共通化することだけで、簡単に導入することができる。

なお、発表後はアカデミアプラットフォームと企業プラットフォームの扱いについての質疑があった。松田氏はこれらが乱立していることに触れ、今後は集約されるべきであり、集約の過程で良いものが残るのではないかと回答した。

【発表資料】

<https://drive.google.com/file/d/1gpQEO6B7m0KnQxhp3-i8DQmp0a8JiCTm/view?usp=sharing>

6. 吉川 成輝(トロント大学)

「汎用ロボットアームによる化学実験の自動化。」

講演の概要は以下の通りである。

- 汎用ロボットによる実験自動化は、汎用性、既存の実験装置の活用、コストの観点で有益である。
- 自然言語を用いて自動化機器を操作できるようになれば、プログラミングの専門知識がない利用者にも使いやすくなる。この際ハードウェアに依存しない中間言語XDLの導入が有用である。中間言語は実験プロトコル記述の標準化にも役立つ。LLMによる自然言語からのXDL生成を試みたが、出力には文法エラーが含まれていた。そのため、iterative promptingを開発した。これは、LLMの出力を検証する外部プログラムを利用することで、文法エラーがないXDLを出力する手法である。実際に開発したシステムは、XDL開発元の手法を上回る性能を示した。また、XDLからロボット動作を生成することで溶解度測定などの実験を実行することができた。
- より高度な実験の例として、Cyclic voltammetryを実施した。この実験では電極の研磨が必要だが、研磨時の電極の動かし方について異なる意見が存在するため、まずは最適な研磨動作に着目した。検証のためロボットアームと電極を接続し、研磨機で電極を磨くように設計した。腐食、測定も一連の動作を自動化し、手での研磨含む5通りの研磨方法を検証したところ、異なる研磨動作間で目立った違いはないこと、ヒトによる研磨と同程度のレベルで研磨できたことがわかった。次に酸化還元電位のpH依存性評価を検証したところ、文献値と矛盾しない結果が得られた。3Dプリンタにより自動ピペットも自作するなど、汎用ロボットアームと安価な装置を組み合わせることで、複数の実験に対応できるようにした。

なお、発表後はiterative promptsの失敗例や成功の理由について、汎用ロボットの現実的な課題、検証データの詳細についての質疑があった。

【発表資料】

https://drive.google.com/file/d/1RRAchvWHmovYIsI2C1khCLJdT5vF1laF/view?usp=drive_link

7. 長田 裕也(北海道大学)

「理論化学と情報科学を活用した有機合成化学研究の自動化及び自律化.」

講演の概要は以下の通りである。

- 従来の有機合成手法では、木から仏様を彫り出すような長い修行が必要であったが、合成装置やロボット制御ソフトの普及により、ワンクリックで実行可能な状況が整いつつある。これにより、昼夜を問わずに有機合成の実験が行えるようになっている。
- 有機合成において専門ロボットを利用する理由は、化学反応を阻害する酸素や水分等を簡便に除外することができ、非常に高い再現性で実験を実行することが可能だからである。また、他の研究分野と異なり、既存の人間が使用している機器をそのまま利用するといったニーズが少ないことも理由として挙げられる。
- 本講演で紹介した有機合成専門ロボットは、合成反応の実験からクロマトグラフィー等の分析まで人の手を介すること無く連続して実行することができるようになっている。このロボットを用いた研究例として、フラグメントディスクリプターを用いたクロマトグラフィーにおける保持時間の予測などは、外挿データに対してもかなり良い精度が出る。
- Closed-loop反応条件最適化においては、複数の物質の組み合わせによる生成可能物に対して、目的物はプラス、対象外のものはネガティブになるように目的関数を設定して探索を行ったところ、50実験ほどで目的が達成され、擬似的なランダム試験と比較しても比較的良好な結果を得られた。得られた候補フラグメントは通常の有機合成の中ではほとんど用いられないものであり、それが候補として得られたことは非常に興味深い。また、ベイズモデルの部分はGPTを始めとする各種LLM等と置き換えて予測させることも可能であるが、GPT内部で回帰モデルを作ってしまうなど、使い方には課題がある。

なお、発表後は探索結果の所感について質疑があった。

【発表資料】

機密情報が含まれるため非公開

8. 尾崎 遼 (筑波大学)

「生命科学の実験自動化に向けたバイオインフォマティクスの取り組み。」

講演の概要は以下の通りである。

- バイオインフォマティクスでは、狭義では大規模データからの発見・予測が、広義では研究の自動化が行われている。狭義のバイオインフォマティクスでは、タスクを切り分けてモジュールを構築しており、モジュールの組み合わせや連携が重要である。また、データから疾病を予測する場合、機械学習手法と undersampling 手法の最適な組み合わせや、1 細胞RNA-seq データQC自動化を行うことで、コマンド一つで全てのワークフローを実行でき、バイオインフォマティクスのフィードバックを待たずに実験を進めることができる。
- このようなタスクの切り分けとモジュールの連携は、研究の自動化にも適用可能であると仮説を立てたが、半分ぐらいは合っていて、半分ぐらいは間違っていた。異種類ロボット・機器連携のための並列スケジューリングを構築し、細胞の劣化など時間制約やタスク間の依存性を考慮して最適化できるようにしたが、求められた最適は、人が組むスケジュールよりも遅かった。結果的に、研究設備の構成によってスケジュールを最適化することは、ある意味のシミュレーションとして評価できることが分かった。自動化実験において異常が起きた場合、デバッグのための動画があり、これを検索可能にするために物体検出システムを利用し、効率化を図っている。
- 搬送系による機器連携やAIとの連携においては、人とロボットの連携として、自然言語からロボットを動かすPythonスクリプトを生成し、Pythonコードを自動分注機のシミュレータで評価することを行った。これは、GPT-3.5からGPT-4に変わったタイミングで精度が大きく向上した。
- 遺伝子のオン・オフを制御する転写因子がヒトゲノムのどこに結合するかを計測するChIP-seq実験データは、すべての転写因子とサンプル(組織・細胞株)の組み合わせで実施されてはいない。そのため、実験が未実施だけで実際には転写因子が結合しているという「データの不在」を前提にして評価を行う必要がある。未だ計算機的予測が難しいこともあり、これまでの少数の実験ではまだ予測できておらず、蓄積されたデータベースにも含まれていないが、実際には存在しているということもあり、データの不在を前提にして評価を行う必要がある。転写因子の研究では、一般的に研究が進んでいるものほど詳細になっており、未計測のChIP-seqデータが数千種類存在している。計算的なアプローチにより、転写因子の必要データ数を検討している。解析が可能なデータ量についての理解を深めることで、既存のデータ解析から脱却し、どの程度進めるべきかを検討する材料になる。

【発表資料】

機密情報が含まれるため非公開

9. 光山 統泰(産総研)

「双腕ロボットによる実験自動化とデジタルツインによるロボット操作技術。」

講演の概要は以下の通りである。

- 大量生産の現場では、しばしばライン生産方式が用いられる。生産工程ごとに特定の作業を担当する複数のロボットがそれぞれ限られた範囲の作業を分担する。そのためロボットの作業はそれほど複雑にはならないが、複数のロボットによる連携動作が必要である。対照的に、バイオ実験では一人で全ての作業を行う。これはセル生産方式ともよばれる。LabDroid Maholo(双腕ロボットによる汎用実験自動化システム)は、まさにセル生産型の自動化システムである。2本の多軸アームだけで、すべての工程を実行可能なように設計されており、ライン生産方式で用いられるロボットでは考えられないほど多様な道具をロボットが扱えるようになっている。汎用ロボットアームのアプリケーションとしてかなりチャレンジングな課題を解決している。
- Maholoは人間の視点から実験作業を行うため、作業を転写するのに適したシステムである。ロボットが何を行っているのかを人が理解しやすい点が、属人性の高い作業を自動化するうえでは大きなアドバンテージとなっている。ロボット実験を実行する仕組みは、ビジュアルプログラミングによって構築することができ、エンジニアリングを専門としていなくても簡単に指示が出せる。
- 一方で、顧客の仕様に応じて簡単に実装を拡張できるような形にしたいと考えている。特に研究目的であれば、すぐに利益に結びつくものではないことから、ロボットの機能拡張に大きな投資をすることは難しい。研究者が思い描いたものを、簡単に試せるようになると良い。
- これを実現するためには、Maholoを仮想空間にモデル化する必要があり、CADモデル化を進めてきた。現在は、実機の精密測定とCADの動作の補正により、0.1mm程度の補正でデジタルツインを実現している。例えば、細胞培養の回収作業自動化(ティーチング)は、ペンダントを使用するもので非常に困難であり、また細かい操作を設計することが難しく、泡立つなどの問題が発生していた。これをCAD上でのオフラインティーチングにすることで、吐出を途中で止めるなど非常に細かく精密な条件を設計でき、作業効率と品質が向上した。
- 現在は仮想空間内でのティーチングバックや、ロボットアームの起動精製を試行している。

なお、発表後はMaholoの開発期間や仕様についての質疑があった。

【発表資料】

https://drive.google.com/file/d/1QJcgaldAZ9NikENmhdGsvlfKJPMufFxS/view?usp=drive_link