

実験化学の「身体性」に迫るための AI・自動実験の活用

(東京科学大学 物質理工学院) ○畠山 歓

Utilizing Artificial Intelligence and Automated Experimentation to Explore the Embodiment in Experimental Chemistry (*Materials Science and Engineering, School of Materials and Chemical Technology, Institute of Science Tokyo*) ○Kan Hatakeyama-Sato

In experimental chemistry, embodiment refers to the influence of a researcher's intuition, experience, and physical operations on experimental outcomes. For AI to truly approach human experimental chemists, it is essential to replicate this comprehensive capability, including embodiment, and to develop an understanding of the experimental process. This presentation introduces recent research examples that address this challenge through the utilization of foundational models and automated experimentation technologies.

Keywords : *Materials informatics, generative AI, robotics, laboratory automation*

実験化学における「身体性」とは、研究者の直観や経験的判断、さらには手技的操作が実験結果に反映される諸事象を指す。近年、分子構造や物性データに基づくケモインフォマティクスやマテリアルズ・インフォマティクスといった分野は大きく発展してきた^[1]。しかし現行の手法は化学構造と物性のみを解析対象とする場合が多く、化学的に不適切な予測提案がなされてしまう事例があるほか、少数データへの適合性が低いといった課題がある。^[2]近年登場した GPT-4 に代表される大規模言語モデルは科学理論に裏打ちされた推論を可能とする^[3]一方で、実験室内の情報を十分には学習していないため、実験現場で蓄積される暗黙知的な事象群までは踏み込めていない^[2]。

一連の問題に対処するにあたっては、実験化学者が単に分子構造の特徴や教科書的な記述といった「記号的」な知識を有するだけでなく、実験ノートや日々のディスカッションから得られる知見、さらには実験時に受け取る五感刺激や筋肉の運動感覚といった「身体性」を基盤とする暗黙知を有している点に注目する必要がある (Fig. 1)。

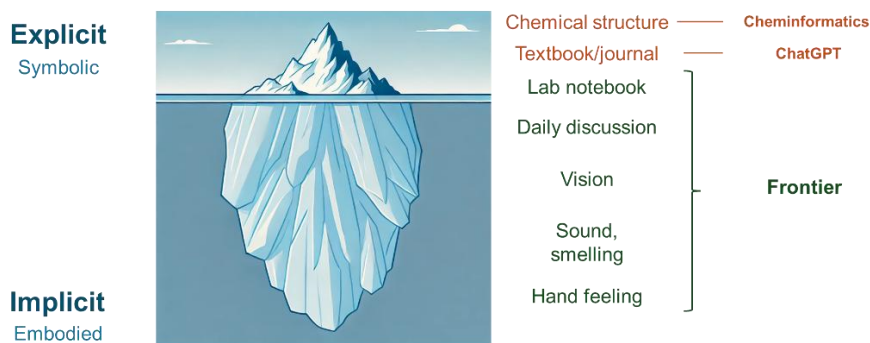


Fig. 1 Symbolic and embodied information.

AI が今後、人間の実験化学者の能力に追従するためには、これら記号的知識と身体

性を包含した多面的な能力を統合し、実験プロセスを包括的に理解する過程が不可欠となる。

本発表では、基盤モデルの活用と自動実験技術の融合により、この身体性を取り込んだ総合的な実験プロセス理解を目指す最近の研究例を紹介する。これにより、究極的には、従来のインフォーマティクス手法では到達困難であった実験空間の理解と、それに基づく新しい知識の創出を目指す道筋を考える。

例として、実験者の手技をウェアラブルデバイスで観察し、その様子をマルチモーダルな生成 AI で解析する手法について報告する。一般常識を含む基礎知識を既に有した基盤モデルを活用することで、特別なモデルチューニングをすることなく、実験作業の様子を一定精度で記述できる。実験者の手技をリアルタイムで観察し、試薬を秤量する様子を自動で読み取って記録したり、フローチャートの形でまとめ直すといった作業が実現しつつある。

カスタムした液体ハンドリング装置とロボットアームを用いた、ポリアミック酸粒子の半自動合成システムについても報告する^[4]。このシステムにカメラおよびマルチモーダルな大規模言語モデルを統合することにより、合成実験を継続的にモニタリングし、その過程を自動的かつ詳細に記録できた。

実験研究に適合した基盤モデルの研究や開発を通し、実験手続き全体の客観性が強化されるとともに、実験条件の再現性や、化学構造—物性—プロセスの相関をつなぐ、新たな実験科学の手法や学理が切り開かれるものと期待される。

[1] A. Mirza, N. Alampara, S. Kunchapu, B. Emoekabu, A. Krishnan, M. Wilhelmi, M. Okereke, J. Eberhardt, A. M. Elahi, M. Greiner, C. T. Holick, T. Gupta, M. Asgari, C. Glaubitz, L. C. Klepsch, Y. Köster, J. Meyer, S. Miret, T. Hoffmann, F. A. Kreth, M. Ringleb, N. Roesner, U. S. Schubert, L. M. Stafast, D. Wonanke, M. Pieler, P. Schwaller, K. M. Jablonka, 2024, arXiv:2404.01475.

[2] K. Hatakeyama-Sato, N. Yamane, Y. Igarashi, Y. Nabae, T. Hayakawa, *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods* 2023, 3, 2260300.

[3] K. Hatakeyama-Sato, S. Watanabe, N. Yamane, Y. Igarashi, K. Oyaizu, *Digital Discovery* 2023, 2, 1548.

[4] K. Hatakeyama-Sato, H. Ishikawa, S. Takaishi, Y. Igarashi, Y. Nabae, T. Hayakawa, *Polym. J.* 2024, 56, 977.