

# 現代化学

# 3

No. 612

## CHEMISTRY TODAY

## 2022

特集

### データ駆動型の化学

何ができる、何ができない？

座談会

### はたらく分子マシン

ナノ世界のエネルギー変換へ

オミクロン株はどう変異したか

東京化学同人



れば0.5 mmol程度の合成をけなげに実行してくれる。しかし、反応カートリッジは数万円する。ラボスケールから生産までの一貫性を考えれば、マイクロフロー合成を利用するのがよく、MITの研究者が主体となっているモジュール型フロー装置は、ロボットアームがモジュールを交換してくれる自動化の最終ステージを感じさせる(ASKCOS)。ただし、フローケミストリーに限定される。汎用ではなく、ある種の限定を設けた装置が可能であるということは、AIシステムの命題である「フレーム問題」を彷彿させる。どんな有機合成にも対応できる自動装置は、不可能なのだろうか。そんなこ

とはない。なぜなら、数種のガラス器具しか用いない研究室で、人の手を経れば、新規分子ができるのが有機合成である。その人の手は、熟練の技をもっているわけではなく、有機合成を始めて数カ月の学生の手であるかもしれないからだ。

ただし水を差すようだが、自動合成には大きな問題がある。そのとき使う原料の分子は、誰かが合成している。ちょうどパン焼き器のように、小麦と塩と水とイーストを入れれば、パンができるといわけではない。どこかで人の手を経たものを、部分的に自動化しているだけかもしれない。しかし、必要なのは、MI研究者に有機合成の力を与え

ること……。これ以外にMIの本当の進展は望めないのである。

### 参考文献

文中の装置などは、YouTubeの動画として見ることができる。

YouTubeの検索ワード: 1) リリーライフサイエンススタジオラボ, 2) CHEM-SPEED ウェビナー「Combining AI and Automation Towards The Prediction of Crystal Structure Landscape」, 3) Explore Synthia™ Retrosynthesis Software, 4) SYNPLE-Comparison of manual and SYNPLE automated synthesis, 5) chemputer, 6) 次のURL参照. <https://askcos.mit.edu>

## 04

# AIロボット

## ——何ができて、何ができない？——

— 杉 太 郎

「新物質探索」は人類のフロンティアである。

われわれの目の前には巨大な探索空間が存在する。ある文献によると、 $10^{60}$ 以上の物質が存在するという。準安定構造や階層構造を考えると、実際には無限大といってよいだろう。そしてわれわれ人類がこれまで合成してきた物質は、その探索空間のほんの一部である。いまだ広大な探索空間が残されており、私はワクワクしながら未知物質の探索を進めている(図4・1)。

この巨大な物質探索空間から、科学者の好奇心をかき立てる物質や、社会の課題を解決しうる有用な物質を「いかに早く」発見するのか。それも、「予想外」の物質を見つけたい。化学の醍醐味は、

「予想外の発見」にあるのだから。

そのためには、これまでの延長線上ではない方法が必要となる。つまり、新しい「研究の進め方」である。ここでいう「研究の進め方」とは、実験条件最適化を高速に行うことにとどまらず、「新たな発想を得る」ということである。これは、「質の転換」であり、研究者の「頭の使い方」「化学センス」「働き方」の革新にもかかわる。その変革を担うのが、ロボットと機械学習(以降、AIロボット)を活用した新しい化学研究の進め方である(図4・2, 文献1~4)。

この新しい進め方を推進すればするほど、「人間の研究者は何に注力すべきか」について、深く考えさせられる。最新研究として、ロボットが実験室を動き回

り、有機物を主体とした光触媒に関する自律的な実験を8日間で688回も行うという報告がある(文献5)。また、化学反応経路を予測し、それに応じて実験系を自動的に組替えて自動合成する報告もある(文献6~8)。そのような進展があるなか、筆者らは自律的に薄膜作製条件を最適化するデモンストレーションを行った(文献9, 10)。ここで自律とは、次の実験条件を人間が決めるのではなく、コンピュータが状況を判断して実験条件を決定することをさす。このように、実験室の自動化、自律化が急速に進みつつある(文献11)。

しかし、AIロボットがどんな実験でもしてくれると考えるのは誤りである。それらが「できることとできないこと」



をしっかりと認識し、われわれは、人間にしかできないことに注力する、つまり、われわれ研究者は創造性がより高い仕事に取り組むということである（図4・1）。AIロボットの可能性と限界を見極めることは、どの研究課題にAIロボットを投入するのか、という判断力につながる。AIロボットは適切な研究課題に適用しなければ、無力である。したがって、人間の課題設定能力がきわめて重要である。

以下に、AIロボットは何ができて、何ができないのかを記す。

## AIロボットは何ができるのか？

1. 科学的原理の発見 実験データと物性の相関関係について明らかにする。課題によっては因果関係も明らかにできる。また、実験装置やデータの共有が進み、知識が集積するスピードが増す。それをもとに、皆で議論することが可能となる。

**人間の役割** 他学問分野と連携して体系化し、学理構築を行うところにこそ、人間の力量が問われる。研究者はこれまでは考えられないほどの大量のデータを検討することが可能となる。それらを通じ、これまで獲得できなかった、新たな科学的知見や俯瞰的視野が得られる。

2. 新物質の発見 AIロボット導入により、実験回数が増え、探索範囲が飛躍的に広がる。そのため、データ数が増大する。そのデータを基盤とした機械学習と計算シミュレーションから、有望な物質群を探り出し（マテリアルズインフォマティクス）、それをロボットが自動的に合成して特性を評価する。

**人間の役割** 新しい実験技術や合成技術の開拓、あるいは、実験装置を構築し、システムとして稼働させるのは人間の役割である。実験全体のデザインにこそ、人間の力量が問われる。また、多数の階層をもつデバイス開発に貢献するのも人間である。



図4・1 われわれの目の前には、巨大な物質探索空間が広がっている。皆さんが冒険心をもち、この人類のフロンティアを楽しみながら開拓することを願う。

3. 匠の技（暗黙知）のデジタル化・見える化 AIロボットに実験を任せることは、暗黙知であった匠の技をコンピュータで扱えるようにすることである。そのためデジタル化が進み、技術の継承や定量的な検証が可能となる。その際、実験プロセスの透明化にもつながり、見える化が進む。

**人間の役割** 人間の研究者は、さらに高度な暗黙知を生み出すことが最重視される。そして、それをシステムに埋込むというサイクルが重要となる。また、デジタル化により技術がコピーされやすくなるため、セキュリティ管理が重要である。

4. セレンディピティー 一度合成した物質について、さまざまな物性評価を自動的に進めることが可能となる。これにより、意外性のある物質に遭遇するチャンスが増す。

**人間の役割** 「社会の課題にこの物質の特性が活用できるのではないか」という発想と、それを判断するための幅広い知識と教養が要求される。異なる研究分野についても大量にデータが出てくるので、一つの研

究分野にとどまっていたはならない。広い視野（俯瞰的視野）がますます重要になる。

5. 研究者の働き方の変革 これまでは実験室に研究者が行かねば、合成実験ができなかった。今後、場所にとらわれずに「ものづくり」ができるようになる。また、理論家がコンピュータに指示を出すだけで新物質を合成する時代となる。予測後の実証に要する時間が短縮するため、早期の実用化が期待できる。

**人間の役割** 何を合成するか、どのように社会につなげるのか、発想を豊かにすることが必要とされる。また、自動・自律実験で得た時間に、最先端計測施設で物性を明らかにするなど、創造的な取り組みが可能となる。

## AIロボットは何ができないのか

これは、「人間の研究者が注力すべきこと」とほぼ同義である。AIロボットが活躍する研究室になっても、人間がいつも主役である。

1. 新しい研究アイデアやビジネスの発想ができない。研究の大きな方向性の設定や戦略立案ができない。





図4・2 化学研究の進め方に大変革が起きている。新たな研究法は、単に効率化を目指すだけではない。それは膨大な量のデータをもとに俯瞰的な視野を獲得し、新たな学理の構築や新物質の発見を可能とする。新たな発想を得ることこそが真の狙いである。

**人間の役割** 社会では何が課題になっていてどう解決するのか、どのようなビジネスを立ち上げて社会に貢献するのかを考えるのは人間である。つまり、課題の発見と解決について、価値判断や意思決定を行うのは人間である。そのために、リベラルアーツ、教養が重要になる。また、人間の好奇心にしたがって探究するのも人間ならではのである。

## 2. 人的ネットワークの構築ができない。

**人間の役割** 別の研究者と、強みと強みを合わせて新しい共同研究構想を描く。多くの人的交流を行い、議論を通じて研究構想を修正・発展させる。学会運営や大学運営など研究コミュニティの育成も人間が注力すべきことである。

## 3. 研究発表の主体になれない。論文のファーストオーサーになれない。

**人間の役割** AIロボットはデータを提供することができるが、研究の意義を語るイントロ部分を考案することはできない。研究の意義を語るには価値判断が必要であり、それは人間にしかできない。つまり、人間

がストーリーをつくる。質の高い論文作成や学会発表により、多くの方に影響を与える仕事は人間にしかできない。研究資金の獲得も人間の仕事である。

## 4. 人の心を動かすコミュニケーションができない。

**人間の役割** 若者に科学のおもしろさを伝え、感動を与える研究ストーリーの構築。熱意と人材を惹きつける魅力を持ち、若手研究者のチャレンジ心や研究者魂に火をつける。

ロボットや機械学習が活躍する時代になっても、人間が常に主役である。ロボットや機械学習の限界と可能性を正確

に理解し、それらを活用すること、これが今、われわれに求められている。

## 参考文献

1. 永野智己 監修・編著、『リサーチトランスフォーメーション (RX) ポスト/with コロナ時代、これからの研究開発の姿へ向けて』、国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター (2021)。
2. 木村康則ほか編、『機械学習と科学』、国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター (2021)。
3. 一杉太郎、日本化学会情報化学部会誌, 38, 2 (2020)。
4. 一杉太郎、理論化学会誌 フロンティア, 3, 171 (2021)。
5. B. Burgerほか, *Nature*, 583, 237 (2020)。
6. IBM RXN for Chemistry (<https://rxn.res.ibm.com/>)
7. C. W. Coleyほか, *Science*, 365, eaax1566 (2019)。
8. S. Steinerほか, *Science*, 363, eaav2111 (2019)。
9. R. Shimizuほか, *APL Mater.*, 8, 111110 (2020)。
10. 『自律的に物質探索を進めるロボットシステムを開発——物質・材料研究開発の進め方について革新を起こす——』、東京工業大学、科学技術振興機構、産業技術総合研究所プレスリリース (2020)。
11. 船津公人 監修、『データ駆動型材料開発——オントロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御——』、エヌ・ティー・エス (2021)。

「AIロボット——何ができて、何ができない？」の原稿内容について、議論いただいた石附直弥 東工大研究生、清水亮太 東工大准教授、中山 亮 東工大特任助教に厚くお礼申し上げます。そのほかにも、紙面に書き尽くせないほど大勢の方と議論させていただきました。心より御礼申し上げます。

## 現代化学合本用ファイルをご利用ください

1 年分 12 冊を綴じ込めます。  
ご希望の方は直接弊社営業部宛に代金 (切手代用可) を添えてお申し込みください。

宛先 〒112-0011  
東京都文京区千石 3-36-7  
㈱東京化学同人 営業部  
振替 00130-0-84301



1部 1000 円 (税、送料込み)