

AI×ロボットによる触媒開発の自動化へ AMD EPYC™ プロセッサが支える 世界初の「触媒開発ロボットシステム」



お客様

業界

大学・研究所

課題

「人の知識や経験に依存しない触媒開発」
の実現

解決策

触媒インフォマティクスに基づく「AI×
ロボット」による触媒開発の自動化

結果

「自律型流通系固体触媒評価ロボット」の
開発推進

AMD テクノロジ概要

AMD EPYC™ 7003 シリーズプロセッサ

テクノロジー パートナー



北海道大学 大学院 理学研究院
Faculty of Science,
Hokkaido University

北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 情報化学研究室

触媒インフォマティクス(Catalysts Informatics)の先端研究で世界をリードする北海道大学の研究チームが、触媒開発を自動化する「AI×ロボット」の実現に向けて着実に成果を積み上げている。2024年度JST戦略的創造研究推進事業「さきがけ」に採択された、大学院理学研究院 化学部門 助教の高橋ローレン氏の研究「自律型流通系固体触媒評価ロボットの開発」は、人の知識や経験に依存しない触媒開発に向けたチャレンジであるとともに、熟練研究者の減少で危機的な状況にある我が国の触媒開発を、再び世界の最先端へと引き上げる取り組みとしても注目されている。AI×ロボットで触媒開発の常識を変える高橋ローレン氏の先端研究に迫る。



北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 情報化学研究室 助教 高橋 ローレン 氏

触媒インフォマティクスに立脚した「AI×ロボット」による触媒開発

メタンをエチレンに変換する、CO₂と水素から合成燃料を生成する、水から水素を作り出す——これらを実現する革新的な触媒開発に向けて、世界中の企業や大学・研究機関が熾烈な競争を繰り広げている。カギを握るのは「触媒インフォマティクス(Catalysts Informatics)」によるデータ駆動型のアプローチであり、AIとロボットを統合した触媒開発の自動化である。この分野で世界をリードする先端研究に取り組む北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 助教の高橋ローレン氏は次のように話す。

「触媒インフォマティクスは、触媒ビッグデータからAIや機械が触媒開発を行う手法であり、これを実現するための理論、計算、データサイエンス、実験を包括する学術分野です。情報化学研究室(Takahashi Group)では、触媒インフォマティクスによる『人の知識や経験則に依存しない触媒開発』を実践し、高性能新規触媒の発見など数多くの成果をあげてきました」

高橋ローレン氏らの研究を支えているのは、情報化学研究室が持つ10万件を超える世界最大規模の触媒ビッグデータ、触媒インフォマティクスの先駆者としての高度な知識と技術、そして研究に対する圧倒的な熱量だ。

「日本の触媒研究は多くの優れた技術者の努力によって支えられてきました。しかし現在、多くの技術者が現場を離れ、長年培われてきた技術や暗黙知が失われつつあります。私はこの課題を、AIとロボットのかで解決したいと考えています。熟練者の経験をデータとして捉え、ロボットが自律的に実験・解析を行い、その知見を次世

代に残す。こうした『知の継承システム』が確立されれば、日本の触媒研究は再び世界をリードし、未来の宇宙産業や次世代エネルギー開発にもつながっていくはずです」

高橋ローレン氏は、アリゾナ大学で言語学の学士、ヨーテボリ大学応用情報学部で修士、東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学科で博士号を取得。国立研究開発法人 物質・材料研究機構を経て、北海道大学 化学部門で助教を務めている。

「世界を見渡すと、材料開発のロボット化は欧米と中国が大きく先行している状況です。私たちは、触媒インフォマティクスにおける研究資産をもとに、まだ世界で例のない『触媒開発ロボットシステム』の実現を目指しています。日本発の技術で主導権を握り、触媒開発のイノベーションを通じて日本の触媒研究の進展に寄与したいと考えています」(高橋ローレン氏)

化学デジタルトランスフォーメーションの民主化

カーボンニュートラル、資源循環、グリーンケミストリーの機運が高まる中、安定的に高い性能を発揮する新規触媒へのニーズは世界中で高まっている。だが、その開発には多くの難題が立ち塞がる。中でも、数万種類の材料から候補を一つひとつ試して性能を評価する工程は、いまだ多くの研究者を悩ませている。

「そうした課題を抜本的に解決するのが、私たちが研究を進める『触媒開発ロボットシステム』です。目標は『24時間自律的に稼働する』『安価で汎用性の高い』『ガス流通型不均一触媒評価ロボット装置』の開発であり、これまで研究者が自ら行ってきた作業の全過程を自動化するものです。これを実現するために、ロボットシステム



を構成する主要部品から、触媒評価装置、ガスライン、電子基板、制御ソフト、データサイエンス手法、触媒データベースまでを自作します」と高橋ローレン氏は力を込める。

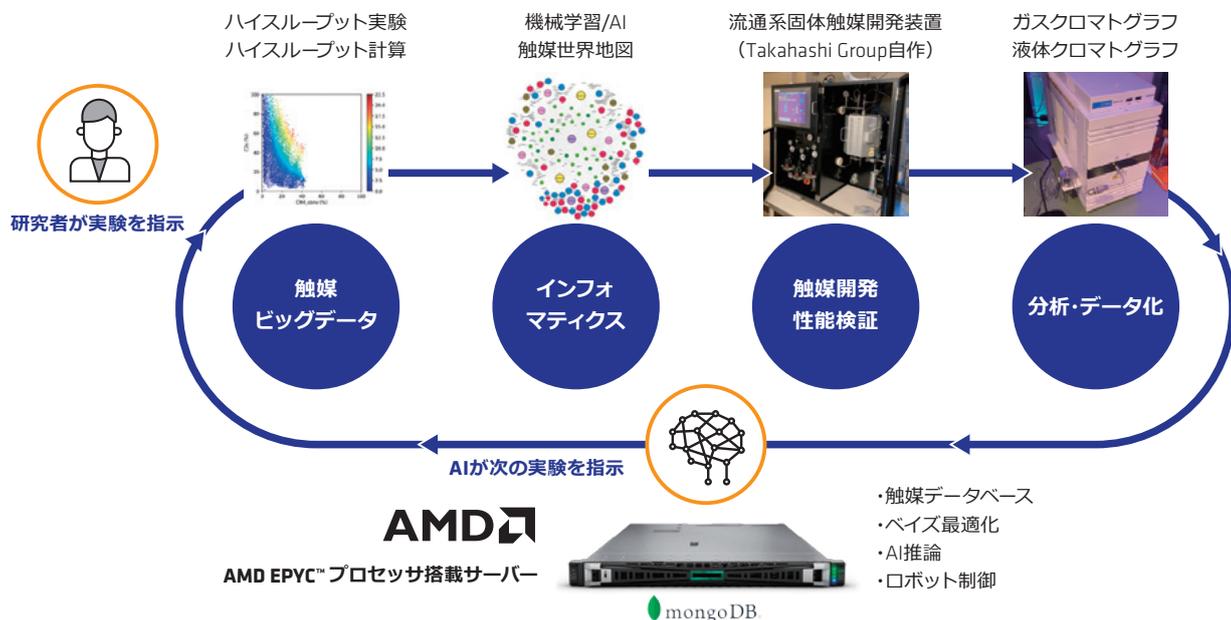
Takahashi Groupでは、あらゆる研究者がこの「触媒開発ロボットシステム」を自由に製作しカスタマイズできるよう、オープンソース化する方針を示している。

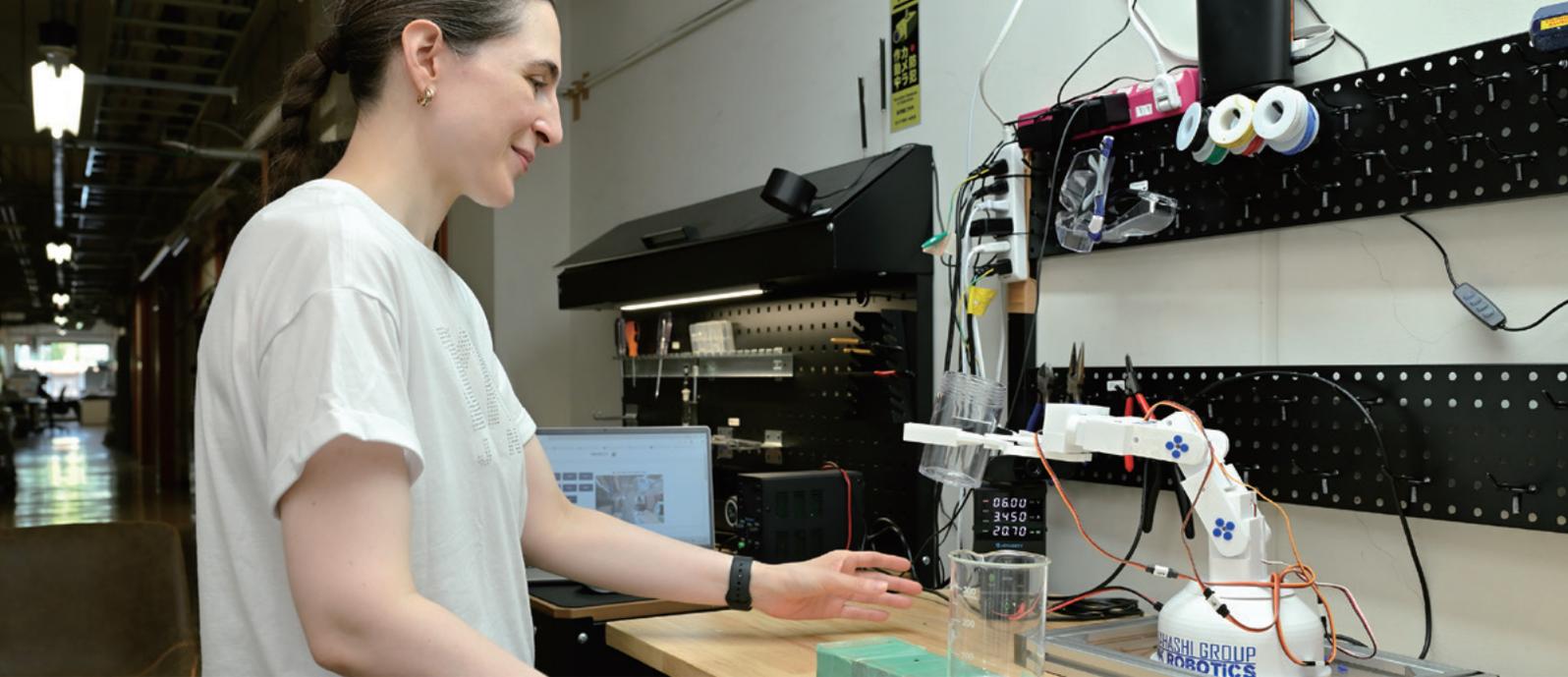
「設計図や電気回路図、組み込みシステム、組み立て方法、3Dプリンターデザインファイル、ロボット制御ソフトウェアのソースコード、使用した部品のリストなどを公開することで、誰でも自由にこのロボットを利用・改良できる環境を整えていきます。これにより『化学デジタルトランスフォーメーションの民主化』を大きく進展させたいと考えています」(高橋ローレン氏)

欧州製のロボット合成装置はおよそ4億円——研究チームが手がける触媒開発ロボットシステムのコストはその1/1000に満たない。桁違いのコストパフォーマンスが、高橋ローレン氏の言う「民主化」を実現し、日本の触媒研究を加速させることが期待される。

「初期の研究成果として、2025年4月に触媒材料の合成を担うロボット『FLUID』の完成を発表しました。安価で誰もが手に入れられる汎用部品を使用し、高価な化学ロボットと同等の機能を圧倒的な低コストで実現するものです。独自に動作機構を設計し、独自開発の制御ソフトウェアを組み込むことで、溶液の供給速度や混合プロセスの緻密な制御を可能にしました。実際に、FLUIDを使用してニッケルとコバルトの酸化物を人の手を介さずに合成することに成功しています」

触媒開発ロボットシステムの全体像





FLUIDの完成を受け、民間企業との協力による「材料合成ロボットの事業化」に向けた検討も始まった。「ひとつの産業が、私たちの研究室から生まれることになるかもしれない」と高橋ローレン氏は期待を示す。

FLUIDには「触媒開発ロボットシステム」の主要部を構成するコンポーネントとしての位置づけもある。その技術情報は完全オープンソース化され、誰でも自由にFLUIDを製作して利用できる。

「触媒開発ロボットシステムの研究では、二酸化炭素(CO₂)に水素(H₂)を反応させてメタン(CH₄)を生成する新規触媒の開発をターゲットとしています。高価な貴金属を使わず、低温で活性する高性能な触媒を開発することが狙いです」(高橋ローレン氏)

「CO₂水素化」は、二酸化炭素(CO₂)をメタン(CH₄)に変換する化学反応である。この過程ではメタンと同時に水(H₂O)が生成されることも重要だ。CO₂からメタンと水を生成し、水を電気分解して酸素を得る——といった資源循環サイクルが可能になる。

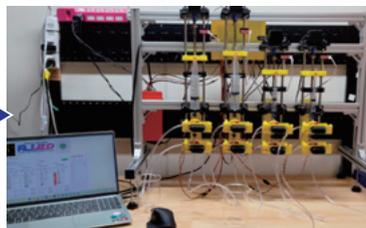
「宇宙開発に欠かせない『炭素エネルギー循環サイクル』の実現が、私自身の大きな目標です。火星の大気に豊富に含まれるCO₂からエネルギーを生み出し、火星の氷から取り出した水素を組み合わせ、酸素やメタンといった材料を現地で作り出すものです。持続可能なエネルギー循環システムを実現することで、人類が火星で自給自足しながら生活できる未来は大きく近づくでしょう。私の夢は、人類の宇宙進出と火星移住に欠かせないテラフォーミングに貢献することです」(高橋ローレン氏)

研究者が実験を指示

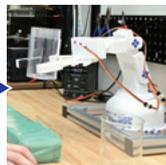


材料合成ロボット「FLUID」の全体像

材料合成装置



実験のプロセス間を
ロボットアームが橋渡し



液体クロマトグラフ



データベース化
ベイズ最適化



分析データ

AIが次の実験を指示



ロボットの設計データや制御ソフトウェアはGitHub(<https://github.com/Materials-Informatics-Group>)にて公開。



「AI×ロボット」を支えるAMD EPYC™ プロセッサ

高橋ローレン氏が研究を進める「触媒開発ロボットシステム」は、材料合成ロボット「FLUID」、バイズ最適化による材料予測、オントロジーによる触媒組成の可視化といった独自開発の機能が統合され、「AIとロボットによる自律的な材料開発」が実現される。このシステム全体を支えるのが、AMD EPYC™ プロセッサを搭載する高性能サーバーである。

「触媒開発ロボットシステムでは、触媒溶液をシリンジからビーカーに注入して攪拌し、合成された触媒を液体クロマトグラフが分析するまでの工程をAIとロボットが自動的に実行します。4本のシリンジからビーカーに注入される溶液の量は、PCからマウス操作または音声認識で指定できます」(高橋ローレン氏)

液体クロマトグラフから得られた分析データは、サーバー上のデータベースに自動的に格納される。このデータに対して「バイズ最適化」を利用できることが本システムの大きな特長だ。

「バイズ最適化は、より高い収率を得られるスコア順に溶液の組み合わせを導きます。ひとつの実験が終わって、次にどの溶液をどれだけ組み合わせれば目的の触媒の収率を上げることができるかを提案する仕組みです。ビーカーの受け渡しなど、実験のプロセス間をロボットアームが橋渡しする仕組みも整えました。これにより『触媒開発ロボット』は、永久機関のように実験を繰り返しながら触媒の性能を高めていくことができます」(高橋ローレン氏)

コンテナ化されたサーバー環境では、ロボットの制御、バイズ最適化、AIモデルの学習と推論、触媒世界地図の生成、これらを支える触媒データベースへの読み書きなど多数のプロセスが統合される。

「複数のアプリケーションを並列稼働させる触媒開発ロボットシステムでは、第4世代のAMD EPYC™ プロセッサのコア数の多さ、コアあたりの性能の高さは大きな優位性となります。また、データベースやAIの推論処理などでは、128レーンのPCIe 5.0がGPUやSSDとのアクセス高速化に寄与します」(高橋ローレン氏)

ゼロからロボットを開発するには、研究チームが想像した以上の困難が伴ったという。

「複雑なことをいかにシンプルに設計するか——FLUIDシステムはシンプルな要素技術の集合体であり、レゴブロックのように組み合わせ積み上げていくことが、最大のチャレンジであり醍醐味でした。私は、この経験を通じて『シンプルこそが強く、美しい』という開発の本質を学びました」(高橋ローレン氏)

化学の世界におけるロボットの活用はまだ始まったばかりだ。大きな可能性とともに困難もある。「それを乗り越える鍵は、オープンソースやオープンハードウェアの思想にある」と高橋ローレン氏は言う。

「どれほど優れたアイデアや技術も、特定の人や組織に閉じ込めてしまえば、その成長は止まってしまいます。だからこそ、特にこの

触媒開発ロボットシステム全体を管理・制御

AMD
EPYC



AMD EPYC™ プロセッサ搭載サーバー



触媒データベース



AI学習・推論



バイズ最適化



ロボット制御



北海道大学 大学院理学研究院 化学部門 情報化学研究室 教授 高橋 啓介 氏

創世期においては、研究者や技術者が垣根を越えて協力し合い、アイデアや技術を共有しながら業界全体を育てていくべきだと考えています」

人のように考え、意思を持つことができるAI

高橋ローレン氏の特徴ある研究テーマのひとつに、「人のように考え、意思を持つことができるAI」の開発がある。この研究は、現在使われている機械学習や生成AIが、人間が設計した枠組みの中で動いていることに対する問題提起でもある。

「私が目指すのは、AI自身が目的や意思を持って思考し、経験から学び、『自分がどのように学習し、どのように結論に至ったか』を説明できるAIの実現です。ブラックボックス的な従来のAIとは一線を画し、『AIが研究者としての役割を果たす』ための重要な一歩となるものです」(高橋ローレン氏)

この研究は未知の領域が多く、技術的にも哲学的にも挑戦に満ちている。

「そこにこそ科学の面白さがあります。AIが自律的に知を深め、意思を持って研究を進め、自ら研究環境を改善し、新しい科学そのものを生み出す未来——その実現を私は真剣に目指しています」と高橋ローレン氏は力を込める。

人の知識や経験に依存しない触媒開発を推進

情報化学研究室(Takahashi Group)主宰する高橋啓介教授は、2018年に「触媒インフォマティクス」を世界で初めて提唱した触媒化学の若きイノベーターとして知られる。CRESTプロジェクト「実験・計算・

データ科学の統合によるメタン変換触媒の探索・発見と反応機構の解明・制御(2017年10月～2024年3月)」では、世界を驚かせる研究成果を次々と発表し、高い性能を備えた新規触媒の発見でも大きな成果をあげている。

■情報化学研究室(Takahashi Group)の主な研究成果

- 「ハイスループット実験装置」により世界最大規模の50,000件の触媒データベースを構築(2020年)
- 触媒ビッグデータを利用できる触媒インフォマティクスプラットフォーム「CADS」を公開(2020年)
- 触媒活性等の類似性に着目し元素周期表に代わる触媒の記述方法「触媒遺伝子」を提案(2020年)
- 「ハイスループット計算」により8,000件の触媒データを取得し触媒ビッグデータを拡充(2021年)
- 反応メカニズムを可視化する独自のインフォマティクス手法「触媒世界地図」を提案(2021年)
- 「酸化触媒、炭化水素の製造方法」(2023年特許公開)
- 「メタン酸化カップリング触媒組成物及びその製造方法」(2023年特許公開)
- 「データ駆動型触媒研究におけるネガティブデータの価値」(Nature Catalysis 2023年)

「CRESTでの研究を通じて、20%近い収率を示した高性能触媒、450℃という低温で活性する触媒、メタン酸化に伴うCO₂の発生を大幅に抑制できる触媒など、未知の高性能触媒を多数発見しました。研究室には、材料・触媒合成、触媒反応評価、物性評価、計測による物質の状態の評価までを一貫して行える環境を整え、評価装置なども自分たちで設計・製作しました。研究室のメンバーは20名を超え、世界をリードする新規触媒の開発と、産業応用を見据えた取り組みを本格化させています」と高橋啓介氏は話す。



Takahashi Group (情報科学研究室)のメンバー

Takahashi Group は、触媒インフォマティクスにより、40年に及ぶ触媒研究の歴史を上回る成果を2年で達成した。「研究者の恣意性を排除したことで未知の高性能触媒を多数発見できた」という事実注目したい。

「私は、意思を持ったロボットが人間の研究者のように経験を積み、暗黙知を獲得していく未来を描いています。こうしたロボットのAIは、自ら進化を遂げ、ハードウェアまでも自律的にアップデートしていくことが可能になるでしょう。やがてロボットは、単に触媒を開発するだけでなく、自ら研究環境を改善し、実験設備の設計から化学反応そのものの設計まで担う——そうした自律型研究者へと成長します。私たちは『ロボットがロボットを進化させる』世界の実現を通じて、化学の最前線を切り拓いていきます」

Takahashi Groupの研究は、高性能の不均一触媒の開発で画期的な成果をあげ、さらに大きな広がりを見せている。水から水素を製造する水電解技術、水素やCO₂などの貯蔵・回収技術、人工光合成の実現に向けた研究も着実に進む。計測や実験の自動化、そしてAI×ロボット技術の開発は先鋭的だ。高橋啓介氏は、若い研究者の育成にも力を注ぐ。

「これからの時代、私たちに求められているのは、既存の分野や技術に縛られない自由な発想と果敢な挑戦です。『装置やソフトがないと研究はできない』と諦めるのではなく、自分の目標に合わせて必要な装置やソフトウェアを自ら設計し、開発する力を身につけることが絶対に必要です。そうしたスキルこそが、新しい時代の研究者に求められているのです」

「挑戦すべきは、不可能と思われるテーマ」と高橋啓介氏は言う。誰も手を付けなかった課題に挑み、その過程で思いもよらない発見やイノベーションが生まれる。失敗を恐れず試行錯誤を繰り返した先にこそ、真に価値のある成果が生まれるのだ。高橋啓介氏は、若い研究者の社会や世界の問題を解決する力の期待を示しつつ次のように結んだ。

「安定や安心感は心地よいものですが、それに甘んじてしまうと成長は止まります。不安や困難を恐れずに新たな挑戦の荒波に飛び込む勇気こそが、未来を切り拓く原動力です。私がAMDに共感しているのは、ライバルよりもちょっと良い製品を作るのではなく、大胆に設計思想から見直して挑戦するという姿勢です。自分たちの考えを信じて攻め続けたからこそ、AMD EPYC™ プロセッサがこれだけ大きな支持を得たのだと考えています。2017年のAMD Ryzen™ Threadripper™ プロセッサの登場以来、ずっとAMDを使い続けています。研究室のすべてがAMDのCPUによって支えられていると言っても過言ではありません。私たちも挑戦し続けていきます。挑戦こそが、日本の科学技術の未来を創り、世界を変える一歩となるのです」

TD SYNnexについて

TD SYNnexは1962年に日本で創業された関東電子機器販売を母体を持ち、60年以上に渡り日本でITディストリビューション事業に携わってきました。同時に、世界トップクラスのITディストリビューターTD SYNnex Corporationの一員であり、日本とグローバルの二つの側面を持つ外資系IT商社です。日本市場への深い造詣とグローバルネットワークを活かし、多くのお客様がご利用頂ける海外で実績がある最新テクノロジーを、日本市場で他社に先駆けて展開いたします。

AMDについて

AMDは50年以上にわたり、ハイパフォーマンスコンピューティング、グラフィックス、視覚化テクノロジーの革新を推進してきました。世界中の何十億もの人々、フォーチュン500のトップ企業、最先端の科学研究機関は、生活、仕事、遊びを向上させるために、日常的にAMDのテクノロジーを活用しています。AMDの従業員は、ハイパフォーマンスで適応性に優れたプロダクトの開発に日々取り組み、限界に挑戦しています。AMDは現在を見据えながら、未来を形成しています。詳細については、AMD (NASDAQ: AMD) のウェブサイト、ブログ、LinkedIn、およびTwitterページをご覧ください。

すべてのパフォーマンスとコスト削減効果の記載は旭食品により提供されたもので、AMDが独自に検証したものではありません。パフォーマンスとコストのメリットは、さまざまな要因の影響を受けます。本ドキュメントに示されている結果は旭食品特有のものであり、一般的でない可能性があります。GD-181

©2025 Advanced Micro Devices, Inc. All rights reserved. AMD, AMD Arrow ロゴ、Ryzen およびそれらの組み合わせは、Advanced Micro Devices, Inc. の商標です。この資料に使用されているその他の製品名は、識別目的のみに使用されており、所有するそれぞれの企業の商標である可能性があります。