

AI、ロボット、研究者が協働する デジタルラボトリ

AI、ロボット、そして、
研究者の経験・勘・知識を
融合した研究開発に向けて

研究者にとって良い時代がやってきた!

東京工業大学
一杉 太郎

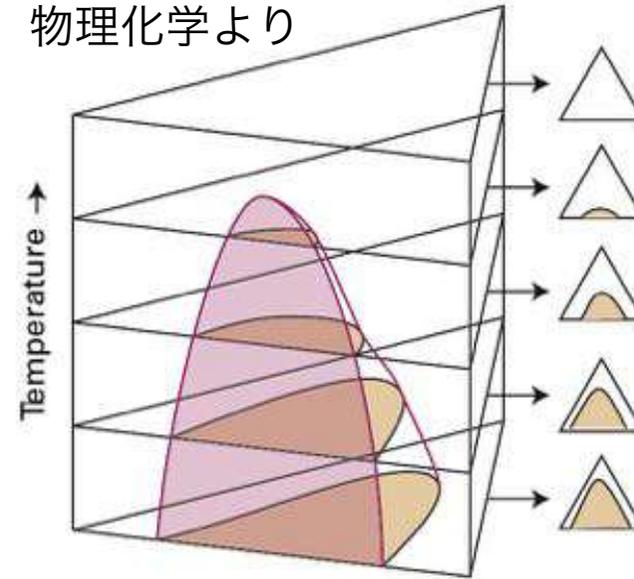
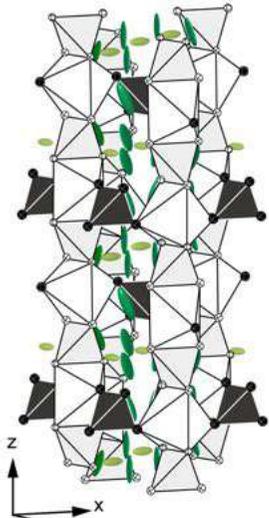
我々が手にした物質・材料は 全体のほんの一部

Li_{9.54}Si_{1.74}P_{1.44}S_{11.7}Cl_{0.3}

アトキンス
物理化学より

全固体電池用材料

Kato *et al.*,
Nature Energy
(2016)



元素数、実験パラメータ数(温度、分圧等)が増大
→ **多次元探索空間**

より高機能な材料が眠っているが、

見つけられていない! 材料開発は**夢**がある!

新材料を探し出し、それを実社会で利用する

イノベーションの70%に、
“材料(マテリアルズ、ナノテクノロジー)”
が関わっている
(EUの資料より)



将来の科学研究 研究者、AI、ロボットの3つが協働して共進化

2020

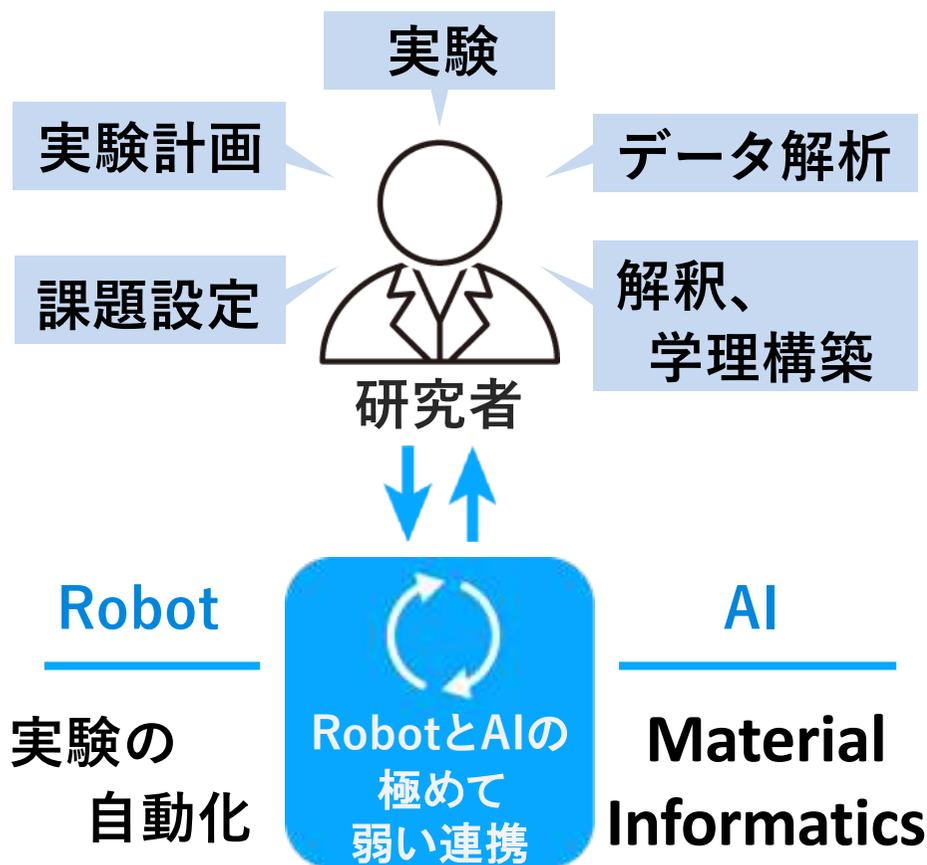


2030

マテリアルビッグデータ

AIが本質を抽出し、
研究者の創造性、発想を刺激

わくわく！



AIがビッグデータを
シンプルなものに
落とし込み、
研究者の「ひらめき」
を生み出す



Human-in-the-loop



(マテリアル分野) 研究者、AIとロボットが
相互に刺激し合い、高度な科学的原理を発見する

ハイスループット実験技術
と高度なマテリアル予測技術

2050年には様々な自然科学分野へ

研究者・材料開発者の仕事

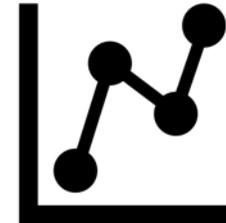
●研究者がやるべきこと: **やはり研究者が主役**

- クリエイティブな仕事
 - 新研究アイディアの構想、学理構築、研究者間交流
 - 実用化への道筋を作る、ビジネス展開
- 視点の転換
 - 俯瞰的に見る能力が必要:
 - データベース内の膨大なデータを俯瞰して本質を見出す
 - どのような切り口で、データを解析するか、
どこに着目するかがますます問われる
- 教育の観点: 全く新しい視点を得るための経験ができる
 - 従来は一つ、二つの材料で学理構築をしていたが、
これからは俯瞰的に物質・材料を見ることができる
 - 社会の課題を解決するために広い目を持ち、
物理・化学・材料・リベラルアーツの知識を
広く持つことが必要

Conventional Materials Science

CASE in mobility: Connected, Autonomous, Shared, Electric

経験、勘
気合い、
根性



CASH in Materials Science

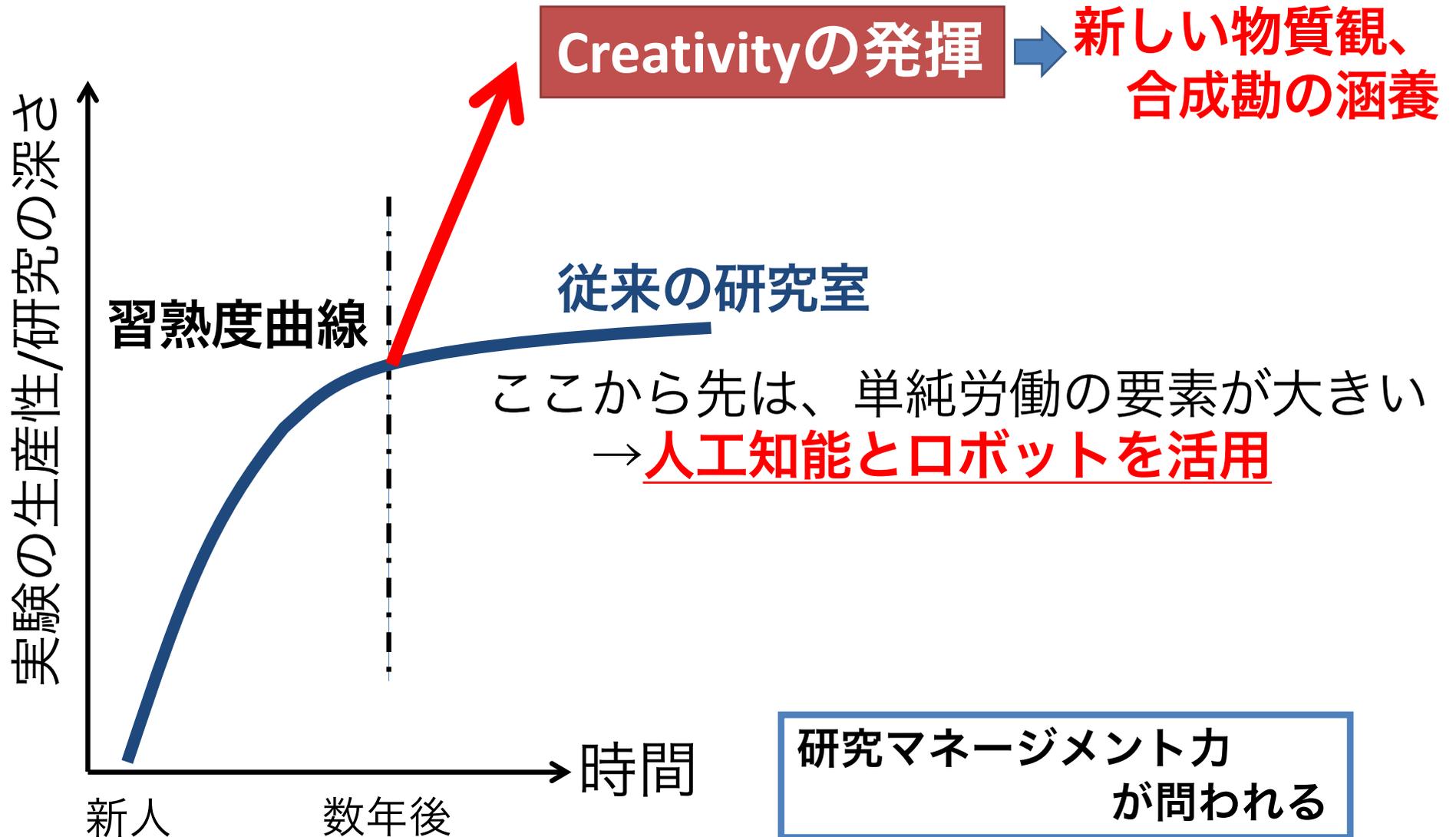
CASE in mobility: Connected, Autonomous, Shared, Electric



Connected, Autonomous, Shared, High-throughput Platform

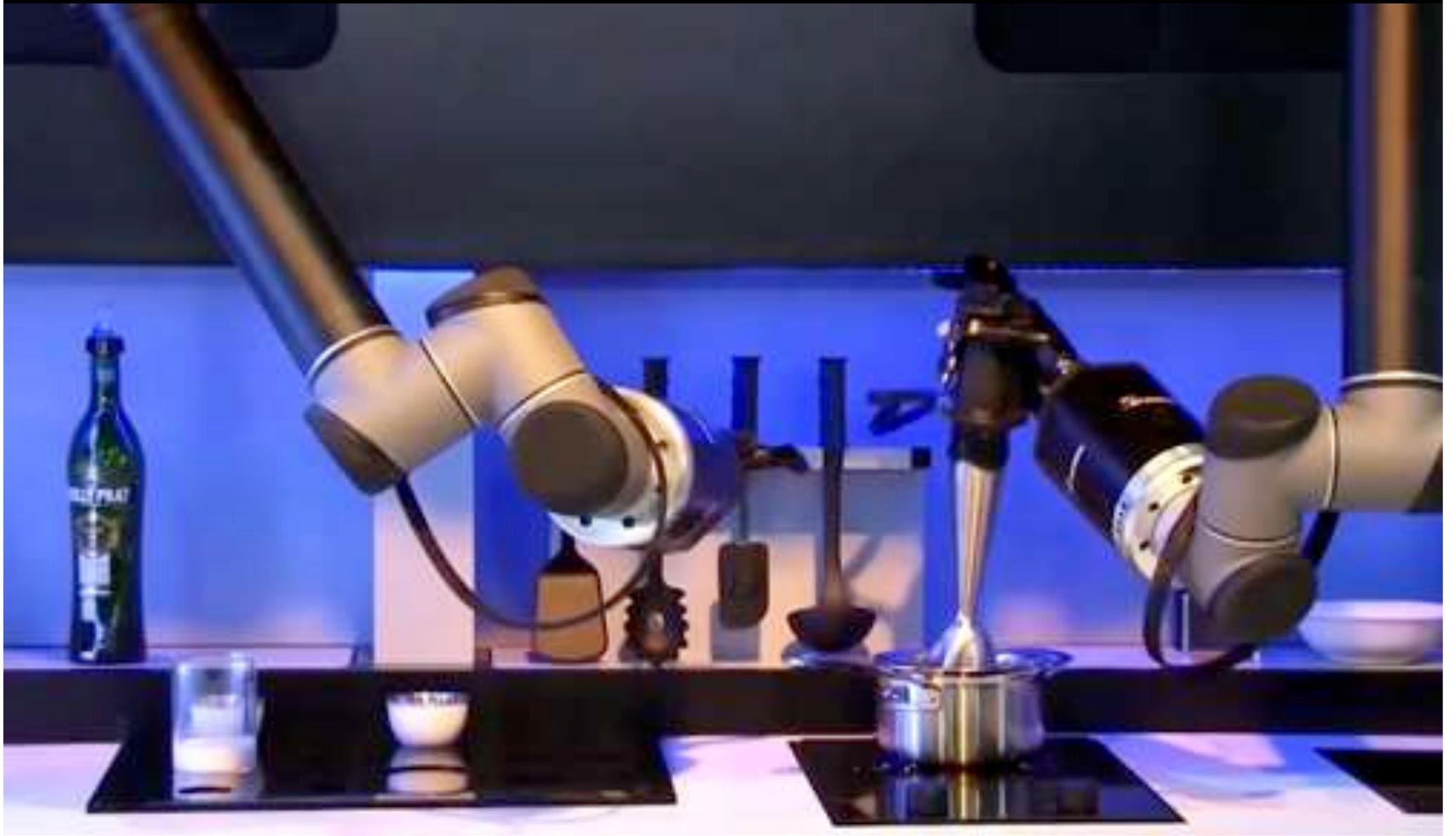
Integrate researchers' knowledge, experience, and intuition

Creativityがより発揮できる環境へ





2017年1月30日 NHKニュース
これが研究室だったら???

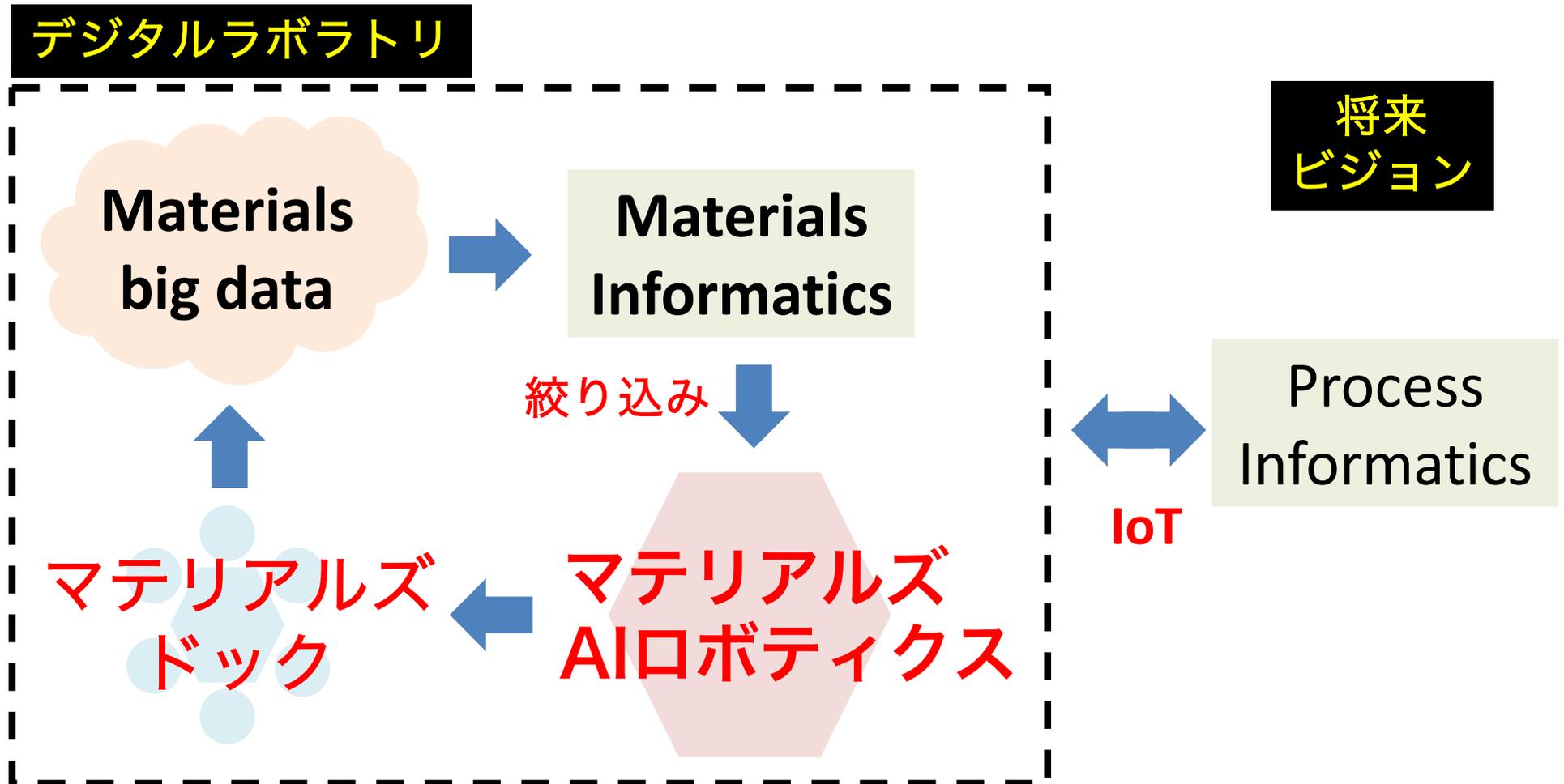


<https://www.youtube.com/watch?v=KGtAFZuomU0>

(産総研)汎用ヒト型ロボット"まほろ"による ベンチワークの高度化



研究環境へのインパクトと展望



- ・ 新材料と新物質観の創造
- ・ 予測から生産まで一体とする

実験補助者

ロボット科学者プロジェクト

材料技術

デバイス技術

マテリアルズ
インフォマティクス

人工知能・数理科学

ロボット技術

IoT

日本の強み

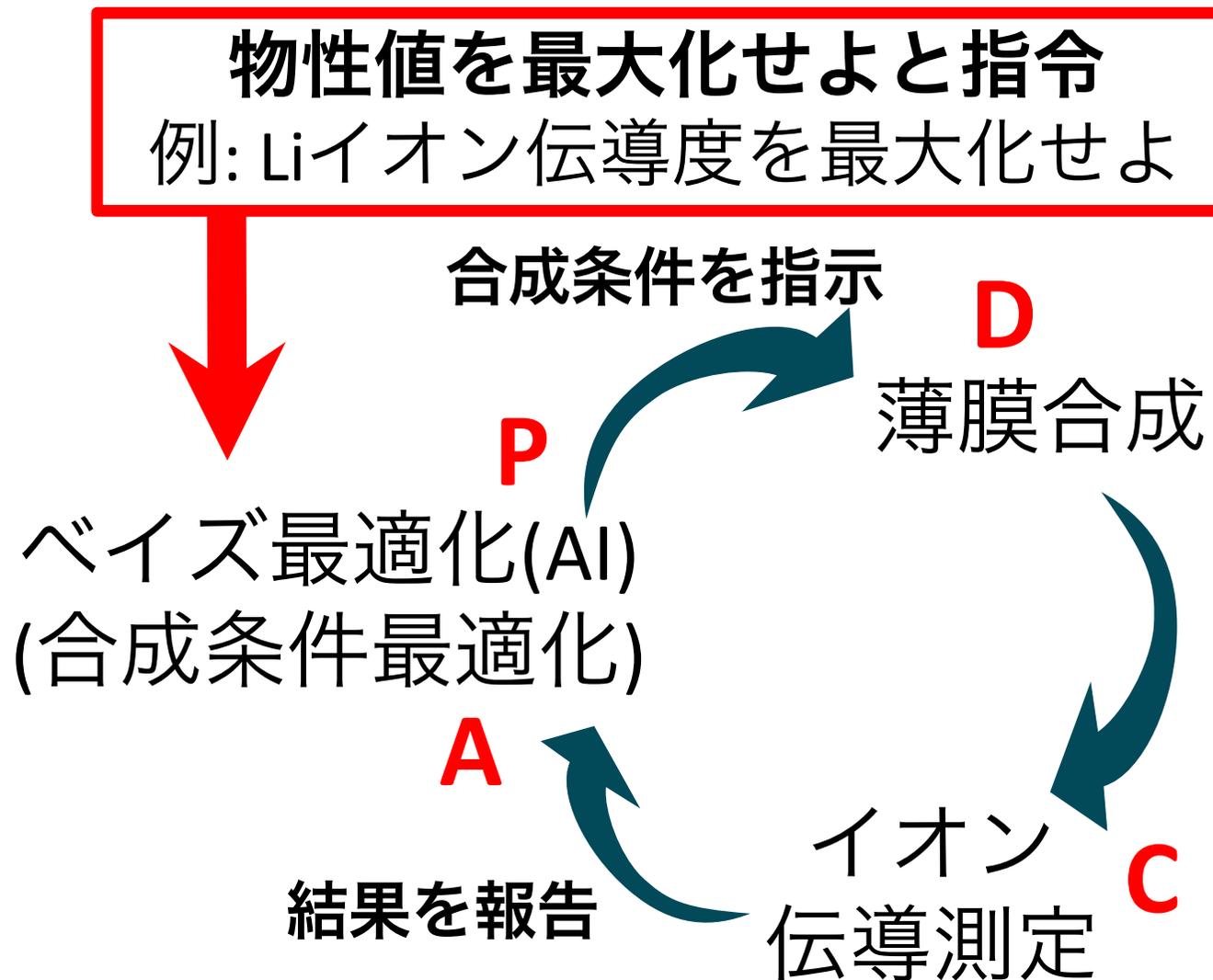
自ら考え、実験し、パブリッシュする
ロボット科学者

**ナノテク・材料研究の
飛躍的な生産性向上**

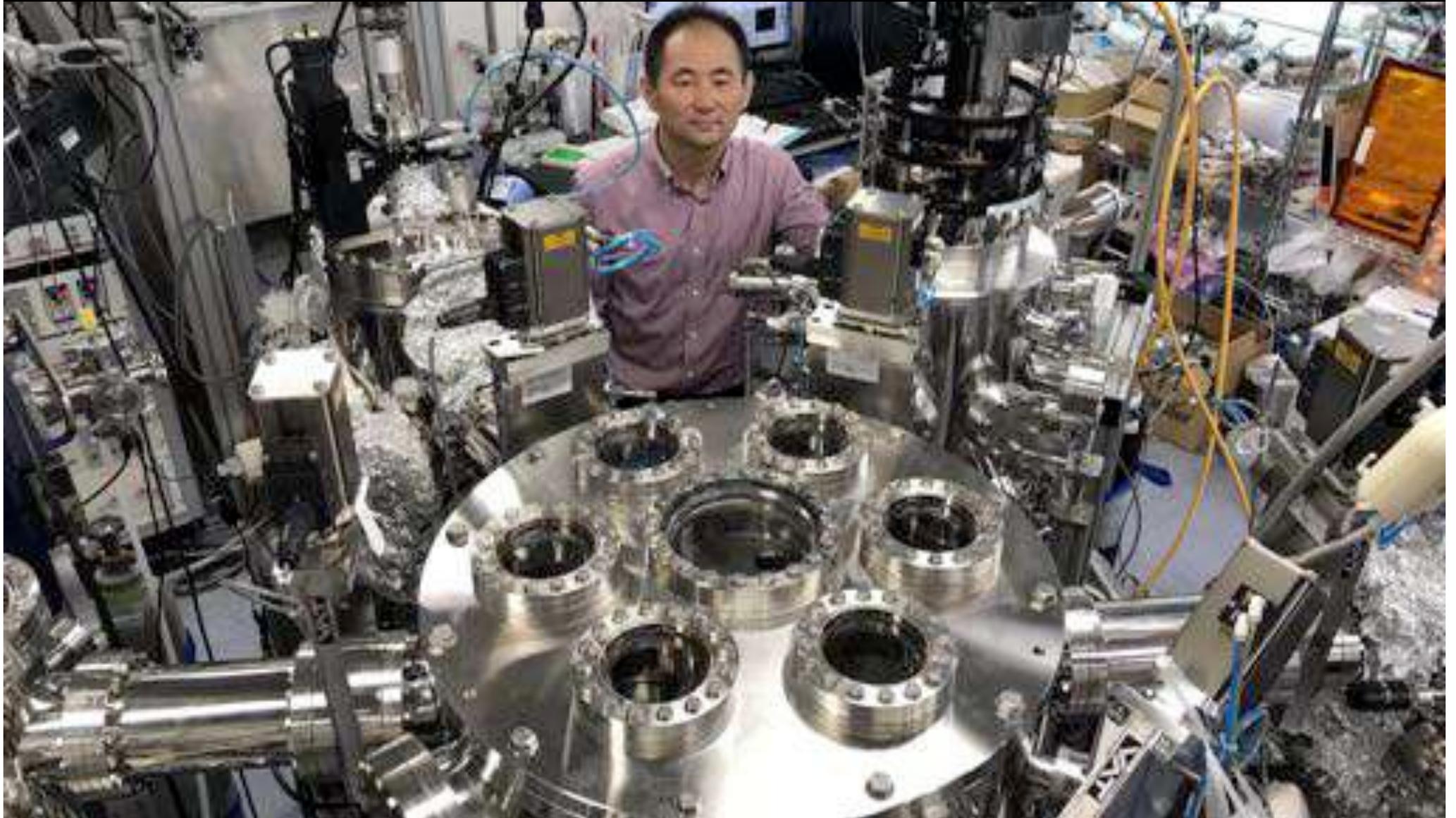
すでに稼働中!



全自動でPDCAサイクルを高速に回す

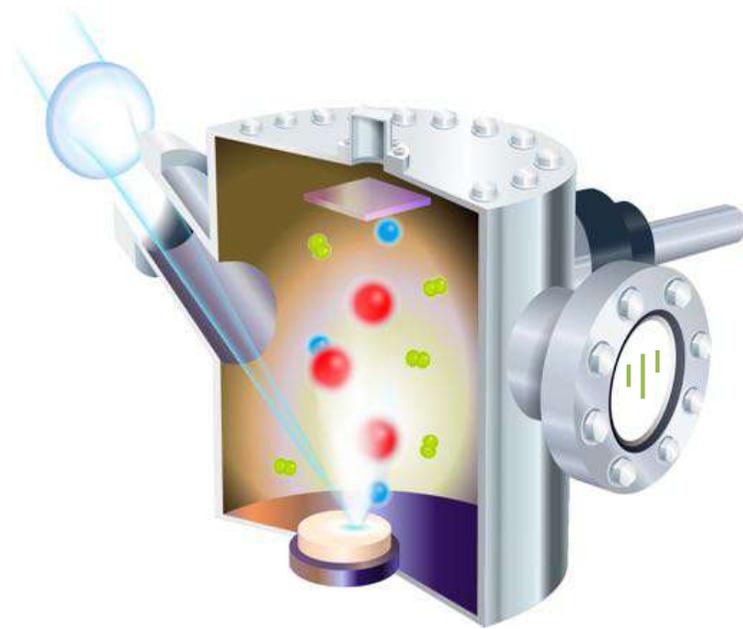


PDCAサイクルを、全自動で回す



清水亮太助教、小林成

従来の実験プロセス: 成膜を例に



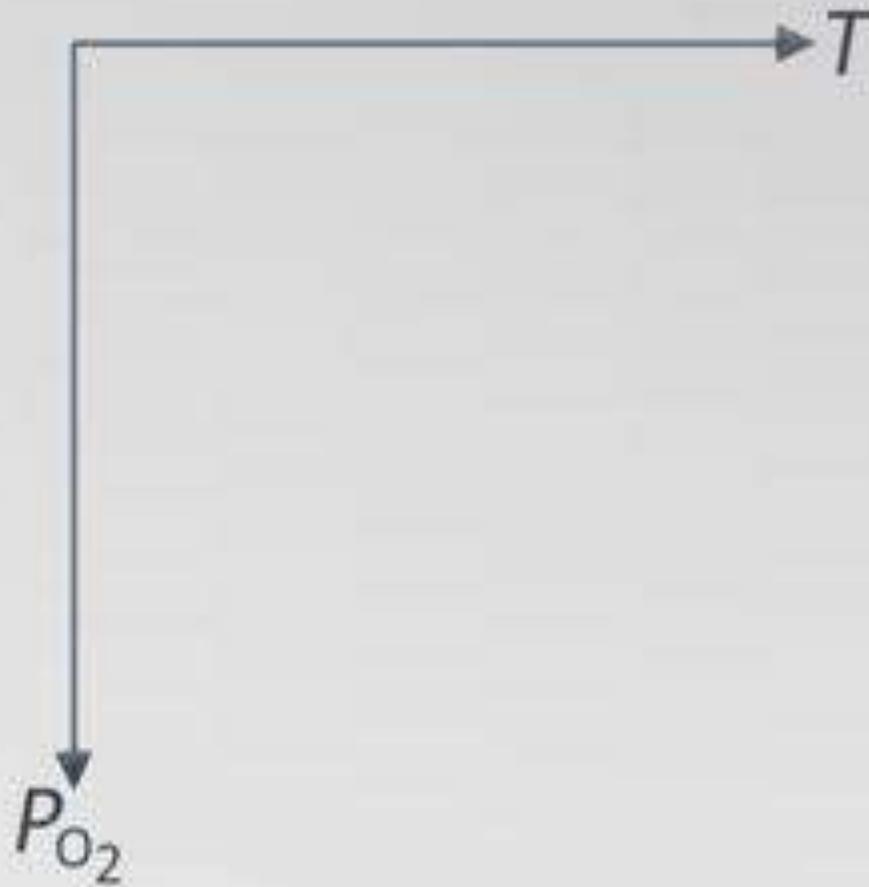
パルスレーザー堆積法 (PLD)、
スパッタ等、成膜装置

基板温度

酸素分圧

△	△	△	×
○	best ◎	○	×
△	△	△	×
×	×	×	×

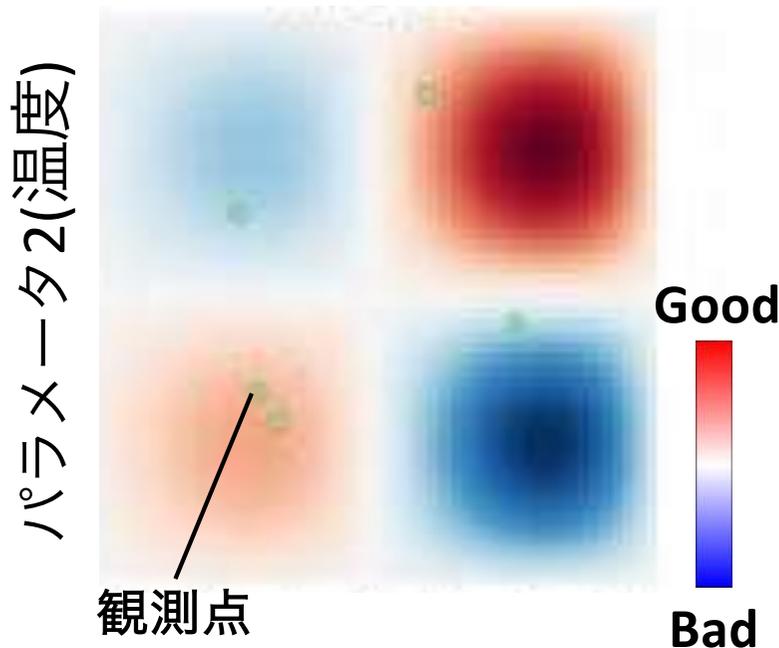
人間が振りやすい二つのパラメータを選び、
表を作って埋めていた
探索空間の一部のみ探索 → 最適化したつもりになっていた
→ もっと良い性能を出せる可能性がある



人間が振りやすい二つのパラメータを選び、
表を作って埋めていた
探索空間の一部のみ探索 → 最適化したつもりになっていた
→ もっと良い性能を出せる可能性がある

ベイズ最適化を用いた合成条件探索

パラメータ1(酸素分圧)



二次元ベイズ最適化

薄膜合成パラメータは5次元以上

- ・原料組成
- ・成膜温度
- ・放電出力
- ・N₂分圧
- ・Ar分圧
- etc

網羅的探索(グリッドサーチ)には、**4⁵ = 1024 (回)** の成膜が必要
(4条件ずつの成膜)



5%の誤差内でのベイズ最適化

5 × ln(1/0.05) ~ 15 [回]

Kawaguchi *et al.*, Advances in Neural Information

Processing Systems 2809 (2015).

- ・ 1/10以下の少ない試行回数で最適合成条件を探し出す
- ・ 多次元(成膜)パラメータをまとめて最適化できる

70 trials

- Human
 - 2 samples per day
 - 35 days
 - White lab (do not work in the weekend, go home at 17:00)
 - Meetings, report
 - 2 months
- AI/Robot-driven Materials Research
 - 2 hours per sample, 12 samples per day
 - 6 days

RobotによるNb(1%):TiO₂薄膜作製

Target: Nb(1%):Ti₂O₃

ガス: O₂(1%)/Ar(99%) + Ar(100%) (<-- 1次元ベイズ最適化)

全圧: 1 Pa(固定), 全フローレート 10 sccm (固定)

RF 150 W, 30 min. 堆積 (膜厚: 30 nm)、室温蒸着後に真空下で400°C加熱

Date	n	O ₂ (1%)- flow rate (sccm)	Resistance (Ohm)
----	1	10.0	1.00E+08
----	2	2.50	1.69E+05
2019/11/24 19:25	3	0.40	5.94E+04
2019/11/24 22:43	4	9.96	1.00E+08
2019/11/25 0:01	5	0.44	3.96E+04
2019/11/25 2:47	6	0.48	3.29E+04
2019/11/25 4:37	7	5.48	1.00E+08
2019/11/25 6:42	8	0.70	5.16E+04
2019/11/25 8:08	9	0.81	2.45E+04
2019/11/25 10:24	10	0.74	3.73E+04

Date	n	O ₂ (1%)- flow rate (sccm)	Resistance (Ohm)
2019/11/25 14:10	11	0.78	3.61E+04
2019/11/25 15:37	12	0.85	2.13E+04
2019/11/25 18:30	14	0.51	3.85E+04
2019/11/25 19:56	15	0.55	2.56E+04
2019/11/25 21:22	16	0.59	2.92E+04

26時間で
13サンプル
(人間だと最大3)

人間ドックの材料版: マテリアルズドック

	Ionic conductivity	Magnetism	Thermal properties	Optical properties	Synthesis parameter 1	Synthesis parameter 2
Material A	✓			✓		
B		✓	✓			
C	✓	✓		✓		
D	✓	✓	✓	✓	✓	✓

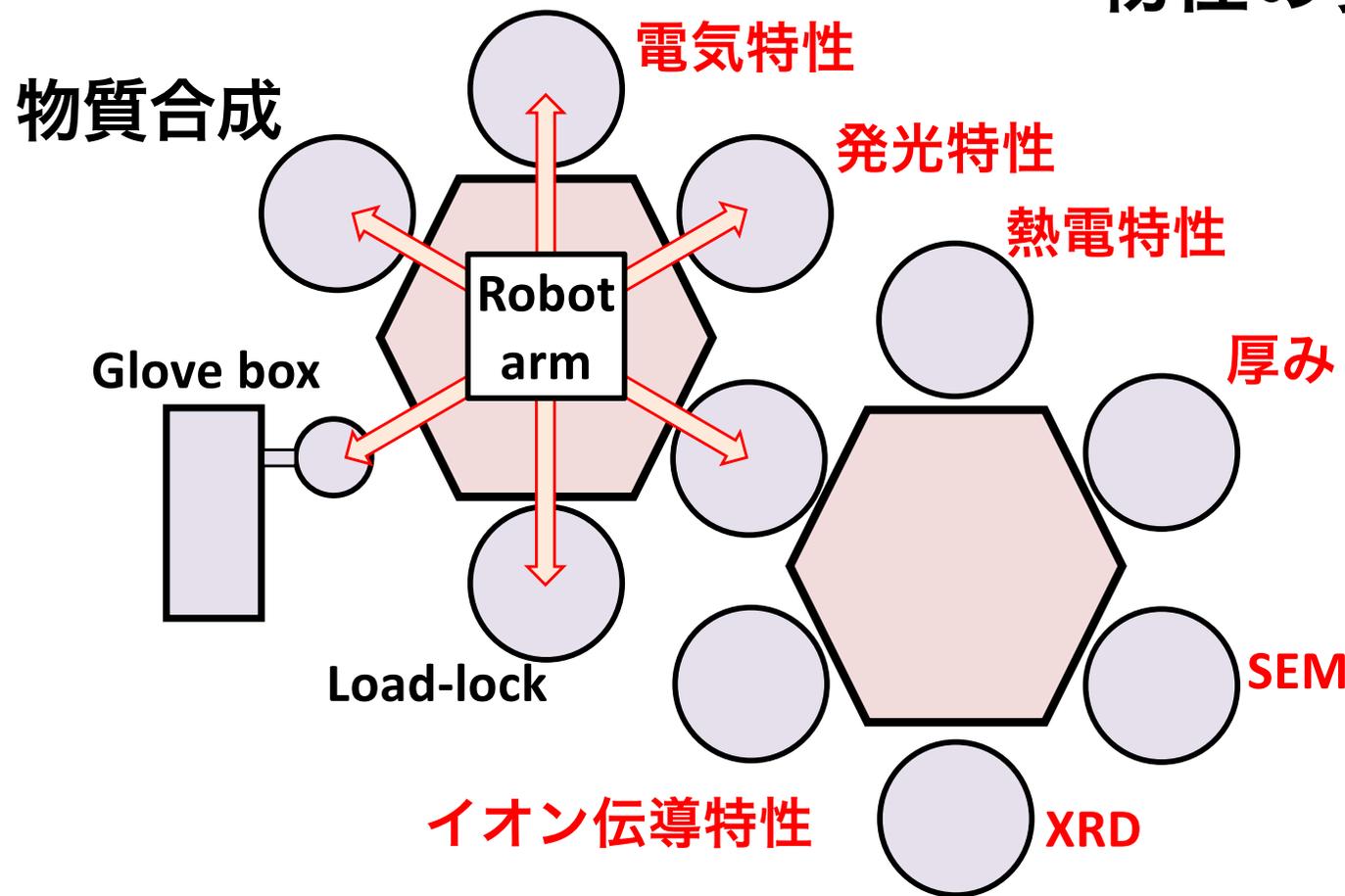
- 研究者は「自分が興味ある一つの特性」のみ物性測定してきた
→ **データセットは虫食い状態**
- 信頼性が高く、ベストではないデータも公開

すべてのデータセットを公開して研究者間で共有

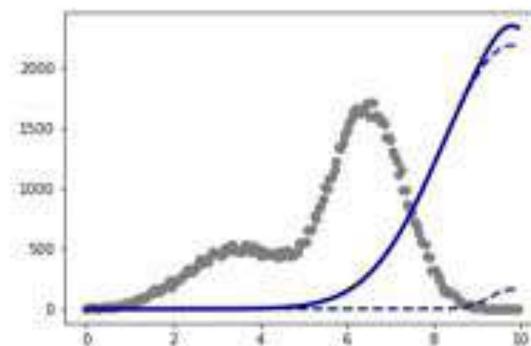
{組成、**成膜条件**、電気抵抗、イオン伝導、光学特性、誘電率、…、…}

マテリアルドック

人間ドックの材料版: マテリアルズドック 物性の多角的評価



計測結果の解釈



EMアルゴリズム
安藤康伸
(産総研)

各要素がそのまま企業のニーズに合致

プラットフォームを構築

固体材料ならではの面白さ、課題

1. プロセスが非常に重要

- TiO_2 と言っても、
プロセス次第で金属から絶縁体まで変化
(分子は、構造が決まれば、物性は決まる)
- プロセスのデータをしっかりと取得することが重要

2. 合成と評価が自動化できれば、

様々な例へ適用可能

3. ポリマーやセラミクスへの展開

- 多くの相談を受ける
- プロセスのロボット化の前に、課題設定が重要
- 研究だけではなく、量産工程にも展開可能

発展戦略

デジタルラボラトリ

世界標準化(規格)
シェアリング

家内制工業から
データ生産工場へ

プラットフォーム化
マテリアルズ
ファウンドリ

均質なデータが得られる
すべてのデータセットを
(管理しつつ)公開

計画された
セレンディピティ
(探索空間の拡大)

ハイスループット
計測・分析技術

マテリアルズインフォマティクスの
基礎データベース → 新物質の予測

本システムへ入力

世界の状況

Manchester大、Glasgow大、British Columbia大

Robot scientist, Robot chemist, Chemputer

という言葉が生まれつつある。

→ しかし、**諸外国はバイオ系、有機分子など、
液体系に強み**

無機・固体材料はこれから

日本の産業の根幹である材料技術について
研究開発を二桁加速できる

Als direct search for materials breakthroughs

Decision-making algorithms transform how robots evaluate and synthesize solar cells and more

By Robert F. Service, in Boston

In July 2018, Curtis Berlinguette, a materials scientist at the University of British Columbia in Vancouver, Canada, realized he was wasting his graduate student's time and talent. He had asked her to refine a key material in solar

cells to boost its electrical conductivity. But the number of potential tweaks was overwhelming, from spiking the recipe with traces of metals and other additives to varying the heating and drying times. "There are so many things you can go

cha

thro
Berlinguette says.
So he asked her to refine a key material in solar cells to boost its electrical conductivity. But the number of potential tweaks was overwhelming, from spiking the recipe with traces of metals and other additives to varying the heating and drying times. "There are so many things you can go cha

ment and determined what to synthesize next. At a meeting of the Materials Research Society (MRS) here last week, Berlinguette reported that the system quickly homed in on a recipe and heating conditions that created defect-free films ideal for solar cells. "What used to take us 9 months now takes us 5 days,"

Berlinguette says.

Other material scientists also reported successes with such "closed loop" systems that combine the latest advances in automation with AI that directs how the experiments should proceed on the fly. Drug developers,

geneticists, and investigators in other fields had already melded AIs and robots to speed and refine experiments, programmed to synthesize, process, or characterize materials, making it exponentially more complicated to

"What used to take us 9 months now takes us 5 days."

Curtis Berlinguette,
University of British Columbia

これまで、
9ヶ月かかっていた実験が
5日で済んだ

世界の動きは 速い!

バイオ系に加え、
無機材料にも
広がり始めた

2019年末の記事

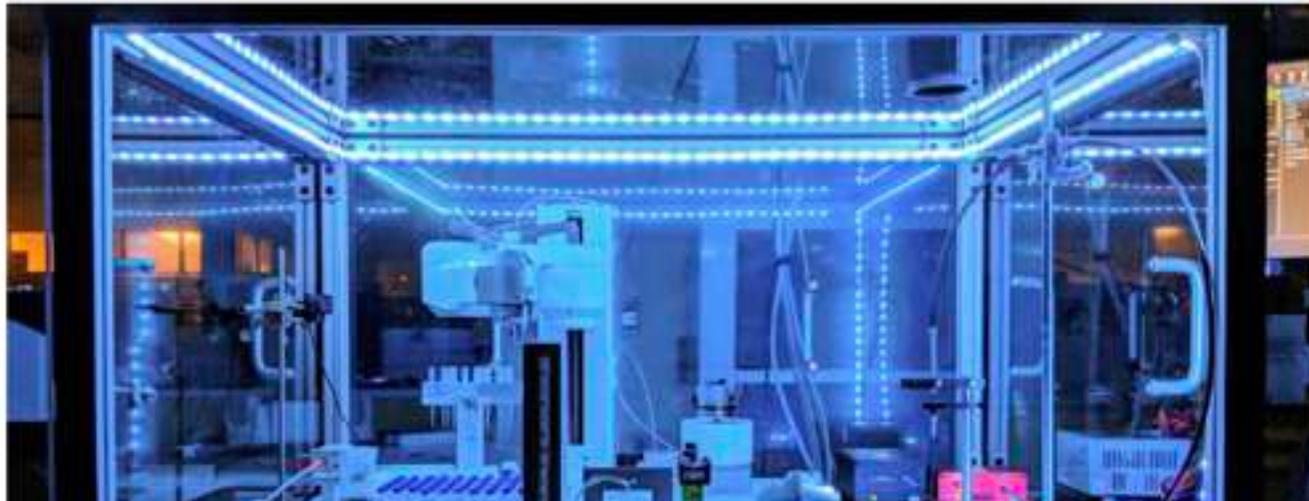
Science 366

(2019) 1295

諸国の状況

UBC robo chemist could speed up discovery of clean energy materials

NOVEMBER 28, 2018



University of British Columbia 8億円の投資

バイオ系では世界に席卷された

→ 材料技術では「**日本**」が世界を主導すべき
今、投資しなければ遅れをとる

探索空間の拡大: 計画されたセレンディピティ

1. 実験室は家内制手工業から「データ生産工場」へ
ものづくりなので、

研究者の勘・知識・経験が最重要

→ 試行回数の減少 → 素早い開発

膨大な数の試料に触れ、物質観を涵養

そして、**AI/Robot-inspired Materials Research**へ

2. AI/Robotは、楽をするためではなく、

研究を深めるために利用

→ **人間だけでは到達できない領域**へ

このシステムができれば、学生さん、研究者は
ますます忙しくなるだろう

ただし、どの課題に適用できるか見抜く目が必要

研究開発の現場に導入するまでの道筋

1. 課題設定が重要

- どの課題にどの技術を導入するか？
- それを見抜く目が必要
- 組織内に成功例を作り、支持者を拡大

2. その見抜く目を養うためには？

- 機械学習やロボットの専門家に
全員がならなくて良い → あくまでツール
- 初歩的なことを理解すれば、
先端研究をある程度フォローできる
- 重要なことは、その道の専門家と
「会話」すること、そして、人脈

自動化は誰でも発想できるはず しかし、なぜ実現していないのか？

自身を振り返って

1. 研究は創造的な仕事ばかりで、ルーチンワークがないという思い込み

2. 勘・経験の向上につながらない、

生産性が低い活動を容認してきた

- ・ 学生に研究の対価を支払っていないため、費用対効果という概念が希薄
- ・ 「修行」という観点

3. 「定番合成条件」のみに執着していた

- ・ 合成装置が高性能化し、様々な物質合成条件が調整可能
→ 昔ながらの勘と経験に頼っていた。

4. 価格が高いという誤解

→ **ロボット価格の安さに驚いた**

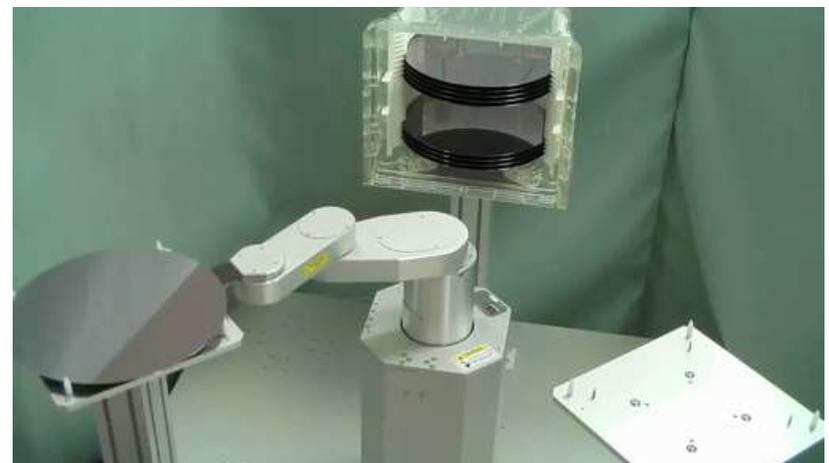
(日本の半導体技術に感謝)

4. 情報科学は難しいという誤解

→ ツールとして使う



1,888,810円



JEL社ホームページより

実際に挑戦してわかってきたこと

1. 人間の知識・経験・勘との統合

それが**事前情報となり、最適化まで時間が短縮**

熱力学の知見、既知情報等を入力しておく

2. 計測装置はものづくりと“直結”すると良い

現在の律速は、計測・分析・評価

計算結果の解釈技術が重要

4. 「このようなものを作りたい」という

アイデアを持つものが最後に勝つ

5. 実際に使用していると、

学生さんの研究進捗が変わることを実感

6. **デジタルラボトリが適用できる例は多数ある!!**

東京工業大学

物質・情報卓越教育院

Tokyo Institute of Technology

Tokyo Tech Academy for Convergence
of Materials and Informatics (TAC-MI)

日本語

English

2019.01.04 物質・情報卓越教育院ホームページ開設



Scroll

物質・情報卓越
教育院とは

イベント

カリキュラム

現在の協力企業(18社) 将来的に30社程度



トヨタ自動車株式会社

TOYOTA MOTOR CORPORATION

日産自動車株式会社

Nissan Motor Co., Ltd.

マツダ株式会社

Mazda Motor Corporation

株式会社 東芝

Toshiba Corporation

JFEスチール株式会社

JFE Steel Corporation

JX金属株式会社

JX Nippon Mining & Metals Corporation

旭化成株式会社

ASAHI KASEI CORPORATION

株式会社 ぐるなび

Gurunavi, Inc.

三菱ケミカル株式会社

Mitsubishi Chemical Corporation

住友化学株式会社

SUMITOMO CHEMICAL Co., Ltd.

東ソー株式会社

TOSOH CORPORATION

三菱ガス化学株式会社

MITSUBISHI GAS CHEMICAL COMPANY, INC.

住友電気工業株式会社

Sumitomo Electric Industries, Ltd.

昭和電工株式会社

SHOWA DENKO K.K.

TDK株式会社

TDK Corporation

LG Japan Lab 株式会社

LG Japan Lab Inc.

パナソニック株式会社

Panasonic Corporation

富士フィルム株式会社

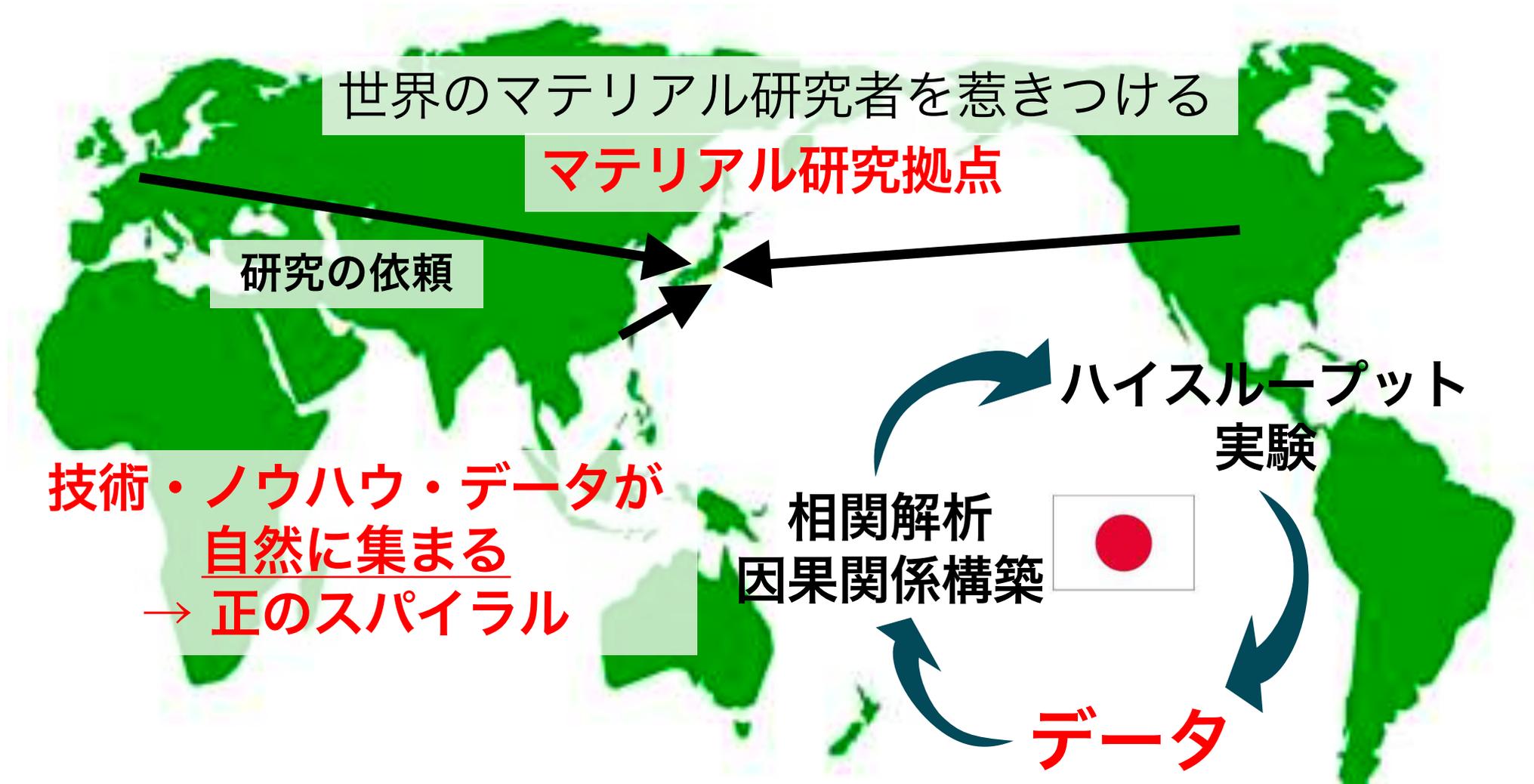
FUJIFILM Corporation



国立研究開発法人 物質・材料研究機構
National Institute for Materials Science



AI研究者、ロボット研究者、脳科学者、マテリアル研究者 が集結し、高度なAI、ロボット技術を開発する



まとめ

1. 人工知能とロボット、そして、

研究者の知識・経験・勘を統合

材料科学は夢がある → 研究を加速

2. 今、世界にさきがけて取り組まねばならない

- **日本の機能性材料産業は強い**

→ そのアドバンテージがあるうちに破壊的イノベーションを起こす

3. 未来に向けた、夢のある前進

- 「研究修行」から解放され、

研究者が創造性豊かな研究に集中

- 若者達が科学技術に興味をもち、研究者を目指す社会へ

研究の進め方について、パラダイムシフトを起こす

Acknowledgment

Ryota Shimizu, Shigeru Kobayashi (Tokyo Institute of Technology)
Susumu Shiraki (Nippon Institute of Technology)
Yasunobu Ando (AIST)



JST-PRESTO、 JST-CREST、
JST-MIRAI