

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究)

令和元年度 研究開発年次報告書

令和元年度採択研究開発代表者

一杉 太郎

東京工業大学・教授

研究開発課題名：マテリアルズロボティクスによる新材料開発

実施期間：令和元年 11 月 1 日～令和 2 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

(1)「実験」グループ(東京工業大学)

① 研究開発代表者:一杉 太郎(東京工業大学 物質理工学院、教授)

② 研究項目

1. 「本格研究」に向けたチームビルディング
2. マテリアルズドックシステムの設計、試作

(2)「機械学習」グループ(産業技術総合研究所)

① 主たる共同研究者:安藤康伸 (産業技術総合研究所 CD-FMat, 主任研究員)

② 研究項目

1. マテリアルズロボティクス技術を確立するためのデータベース等の構成検討
2. マテリアルズドックに向けた取得データからの自動情報抽出技術の開発

§2. 研究開発実施の概要

【「本格研究」に向けたチームビルディング】

「マテリアル分野における研究の進め方」を変革するために何をすべきか、10名以上の研究者と議論を重ねた。その目標を、「AIやロボットを活用し、科学的原理・解法や新マテリアルを自律的に発見する」としたとき、AI研究者、ロボット研究者、マテリアル研究者が一堂に会し、ハイスループット実験技術と新マテリアル予測技術を実現することが重要であると結論した。これにより、「本格研究」におけるビジョンが明確になった。以下に示す。

1. マテリアル科学は複雑化する一方である。元素数は増え、部材の複合化が進んでいる。したがって、複雑現象を解きほぐして本質を抜き出し、人間の発想を広げることが必要である。しかし、そのような仕組みが存在しない。
 - ハイスループット実験技術確立し、マテリアルビッグデータを生成する。そして、AI技術を活用して本質を抜き出し、人間にわかりやすい形とする。それにより、研究者に「ひらめき」をもたらす。また、マテリアルインフォマティクスと組み合わせ、高度なマテリアル予測技術を構築する。
2. 旧態依然の研究スタイルで研究を進めていては、マテリアル開発競争で後れをとる。現状は、勘、コツ、経験に頼り、遅々として研究が進まず、研究力で他国に抜かれている。AIやロボットを活用してマテリアル開発を加速するという文化を創らねばならない。
 - 実験室で活用できるようなロボット技術が必要である。「自ら学ぶロボット」「自ら実験を工夫するロボット」を開発し、マテリアル研究に投入する必要がある。

以上を考慮し、研究計画を練り、準備を行った。

【マテリアルズドックシステムの設計、試作】

メカ的な面とソフトウェアの観点からシステム設計を行った。

メカの観点から、二つの搬送ロボットをつなぐための中継チャンバーの設計を行った。また、試料を作製するための基板を自動で供給できるよう、試料ホルダの再設計、試作を行った。現在、ハイスループット実験の律速となっているのが、この基板の供給である。1日に12試料を作製するという驚異的なスピードであるので、人間が基板を供給することを怠ると、実験が止まってしまう。したがって、そこもロボット化の準備を進めた。

システムの観点からは、多数の計測装置が接続できるよう、モジュール化に対応するシステム設計を行った。LabViewから制御できるように整備すると共に、シーケンサとの役割分担を明確化した。試料ホルダ形状や受け渡しのための情報、さらに自動制御システムとの接続方法を「仕様」として公開できるよう、準備を進めた。

さらに、新型コロナウイルス感染拡大へ対応すべく、出勤停止となった後も遠隔操作できる環境を構築した。そのような技術が構築できれば、上記を実現するシステムをシェアリングできるようになり、多くの研究者が利用可能となる。そして、データも集まるようになり、システムがさらにブラッシュアップされる。