

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

年次報告書（本格研究）

令和 2 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:長藤 圭介]

[東京大学大学院工学系研究科・教授]

[研究開発課題名:マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築]

実施期間：令和 6 年 4 月 1 日～令和 7 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

(1) 「システムアーキテクチャ」グループ（東京大学）

① 研究開発代表者:長藤 圭介(東京大学大学院工学系研究科、教授)

② 研究項目

・仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型研究開発のシステムアーキテクチャの開発

(2) 「オートノマスプロトタイピング」グループ（東京大学）

① 主たる共同研究者:一杉 太郎（東京大学大学院理学系研究科、教授）

② 研究項目

・成膜合成に基づく自律マテリアル探索システムの開発

(3) 「マテリアルドック」グループ(大阪大学)

① 主たる共同研究者:小野 寛太（大阪大学大学院工学研究科、教授）

② 研究項目

・試作材料の自動測定解析システムの開発

(4) 「データ科学」グループ（物質・材料研究機構）

① 主たる共同研究者:長田 貴弘（物質・材料研究機構、グループリーダー）

② 研究項目

・サイバー空間の材料データと実験データを統合するデータシステムの開発

(5) 「機械学習」グループ(オムロンサイニクエックス株式会社)

① 主たる共同研究者:牛久 祥孝（オムロンサイニクエックス株式会社、リサーチバイスプレジデント）

② 研究項目

・ハイスループット自律探索システムの要素技術をデータでつなげるデータクレンジング技術開発

§2. 研究開発成果の概要

マテリアル探索空間拡張プラットフォーム(MEEP; Materials Exploration space Expansion Platform)では, 3 つの POC(自律探索, 仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型開発, ナレッジシェアリング)を, 固体電池材料探索のハイスループット化を題材に実施する. MEEP 第1~2年度で, 各研究グループの要素技術開発とその統合と位置づけて研究開発を進めた. 第3年度では, リバプール大学, トロント大学をはじめ, 海外のベンチマークプラットフォームの加速が相次いだことから, ①自律型マテリアル探索システム(AMES; Autonomous Materials Exploration System)を外部ユーザに供用開始, ②粉体プロセス自動化の実証, ③NIMS-RDE の機能向上, ④マテリアルズマップの活用方法の開発に着手, などを実践した. それに続いて本年度である第4年度では, AMES の外部ユーザへの共用とユーザインタフェースの改良(オートノマスプロトタイピング G), ②粉体粉砕プロセスにティーチング機能を追加(マテリアルズドック G), ③AMES から RDE に実験データをアップロードするための基盤技術構築(データ科学 G), ④トランスフォーマおよび言語モデルを用いた Li イオン伝導体のファミリー分類法の開発(機械学習 G)を実践した.

【代表的な原著論文情報】

Yuto Yotsumoto, Yusaku Nakajima, Ryusei Takamoto, Yasuo Takeichi and Kanta Ono,
“Autonomous robotic experimentation system for powder X-ray diffraction”,
Digital Discovery 3, 2523 (2024).
<https://doi.org/10.1039/D4DD00190G>

Tatsunori Taniai, Ryo Igarashi, Yuta Suzuki, Naoya Chiba, Kotaro Saito, Yoshitaka Ushiku, Kanta Ono
“Crystalformer: Infinitely Connected Attention for Periodic Structure Encoding”,
The Twelfth International Conference on Learning Representations, 2024.
<https://openreview.net/forum?id=fxQiecl9HB>

Shinjiro Yagyu, Michiko Yoshitake, Takahiro Nagata, Takeshi Yasuda, Takatsugu Wakahara, Yubin Liu, Yoshiyuki Nakajima
“Automated analysis of photoelectron yield spectroscopy spectra interpreted via power laws”
SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS: METHODS 5, 2465257 (2025)
<https://doi.org/10.1080/27660400.2025.2465257>