

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
終了報告書(探索研究)

令和2年度
終了報告書

令和元年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：一杉 太郎]

[東京工業大学 物質理工学院・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3年5月31日

§ 1. 研究実施体制

(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. 研究実施の概要

探索研究期間において、以下のことに取り組んだ。

1. 本格研究の全体構想の構築
 - 本格研究を見据え、複数の研究課題・研究開発代表者と議論した。無機マテリアル創製について、研究開発の方法論を革新する構想と実現方策を立案した。
2. 新材料の創製スループットを 10 倍向上する具体的方策の検討と中核となる技術群の確立
 - 予備的実験と課題の抽出。本格研究の課題推進に向け、全自動でイオン伝導率を測定する技術を確立した。
 - 化学・材料にベイズ最適化を適用するためのノウハウを蓄積した。情報科学と化学・材料の両方の知識がなければ自律実験は実現できない。化学・材料実験に適したハイパーパラメータの設定や運用に関わる技術を集積した。
3. マテリアル・計測業界との連携模索
 - 様々な業界団体や企業と意見交換を行い、ラボの自律化や機器の標準化、データの取り扱いについて議論した。
 - 複数の企業と NDA を結び、自律化技術の技術移転を進めた。
4. ベンチマークのための世界動向把握
5. 内閣府「マテリアル戦略」有識者として、研究室のデジタル化について積極的に発言した。
6. 東京工業大学 物質・情報卓越教育院と連携し、ロボット技術も扱える人材育成に努めた。