

機械学習とロボット技術を活用した研究室のデジタル化

～「研究開発の進め方」のパラダイムシフト～

一杉 太郎 (東京工業大学 物質理工学院) e-mail: hitosugi@mac.titech.ac.jp

Autonomous laboratory for materials science

If you have been doing research for a long time, you will encounter opportunities for major changes in the way "research is conducted." The introduction of personal computers to the laboratory in the 1980s, the emergence of the Internet in the late 1990s, and the COVID-19 pandemic in 2020 are a few examples. Each time, researchers have searched for a new way to adapt to the change. Nowadays, the introduction of machine learning and robotics is shifting a paradigm in laboratories. Here, I discuss the impact of "autonomous materials laboratory" using machine learning and robots. This article reviews the realities of actual research in our lab, in terms of science and technology, and in terms of mindset and thinking.

1. はじめに

材料科学には夢がある。

人類がこれまで合成した物質は、考え得る化合物のほんの一部である。一説には 10^{60} 以上の物質があるという[1]。ドーピングした物質や準安定構造を含めると、無限大といっても良い。このように、**巨大な物質探索空間**が我々の目の前に存在し、その中に**社会の課題を解決する有用な物質が多く眠っている**。つまり、宇宙開拓や深海探査のように、**物質・材料探索は人類のフロンティア**と言え、私はワクワクしながら探索を進めている。

この巨大な探索空間から我々の**予想外の材料をいかに速く見つけ、実用化につなげるか**。そして、新原理に基づく革新的材料を、「システムティックに、かつ、継続的に発見」するにはどうすればよいのか。それを徹底的に考えた。その結果、材料科学にも宇宙探査機や深海探査艇のようなツール、つまり、「**材料探索機**」が必要であるという結論に達した(図1)。

この「材料探索機」は、研究の進め方に変革を起こすのは確実である。その変革の段階は二つに分けられる。

段階1. 人間が指定した探索空間内を自動的・自律的に調べ、短期間で最適物質・材料を見つけ出す[2]。

段階2. **人間が予想しなかった新物質の発見と新学理を構築する**[3]。さらに、**実用化までの時間を短縮する**[4]。

現在、変革の段階1については、世界の各所で実証が進み[5]、**Proof of Concept は完了した**と言って良い。ここで「自律」とは、次になすべき実験をコンピュータが判断し、ロボットが実験を進めるということである。その際、人間の介入は不要である。

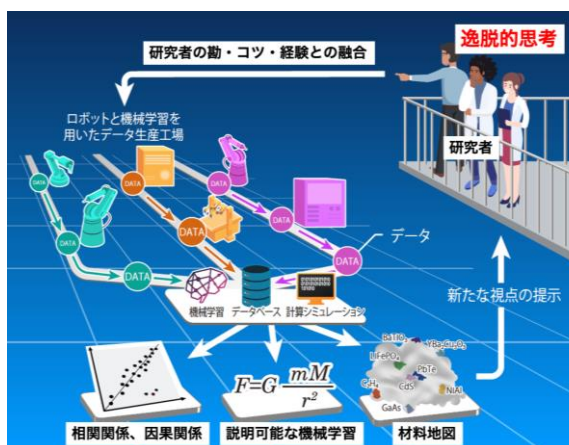


図1. 材料探索機のビジョン。匠の技を埋め込んだ自律ロボットが、人間では取得できない量のリアル実験データを生成する(データ生産工場)。そのデータを機械学習が構造化して「材料地図」やモデル(数式)、相関関係、因果関係を提示する。そして、研究者の予想外の材料や、材料地図を俯瞰的に見て「知」を生み出す。複雑現象を解きほぐして本質を抜き出し、人間の発想を広げることが必要である。以上より、材料開発を加速する。このサイクル全体が材料探索機と言えよう。

このようなシステムは「使いものになるか?」と問われたら、自信を持って、「非常に有用である」と答える。ある物質の周辺を網羅的に探索する場合、この方法で飛躍的に高速化できる。実験現場における最適化に機械学習やロボットが導入されていくのは確実であり、この「自律」技術の適用範囲を広げる段階にある。

そして、現在の焦点は、「段階2」である。ここで重要なことは、機械学習やロボットを活用して研究を進めることにより、**我々の研究の進め方に大きな変化が起きる**という点である。特に、自律的に研究を進めることにより、大きな質的転換が起きる。そして、ラボ内の変革に留まらないことを認識する必要がある。それがマテリアルデジタルトランスフォーメーションである(図2)。働き方が変わる。研究の進め方が変わる。そして、企業の構造も変わる。それを議論したい。

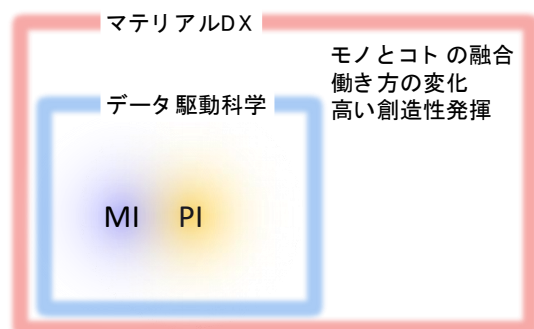


図2. マテリアルズインフォマティクス(MI)やプロセスインフォマティクス(PI)によるデータ駆動科学は、ラボの中だけに留まらない。研究者の行動変容や、企業の仕組みまで変革する。それがマテリアルデジタルトランスフォーメーション(マテリアルDX)である。

本稿では2, 3節でビジョンを述べ、4節にて世界の状況を紹介する。現在の課題は、**この技術がまだまだ広がっていないこと**である。そこで、5節にて、実際に我々がこのような装置を使って感じる手触り感を紹介する。6節では企業への期待を述べ、自律的な実験システム導入に向けて考えるべきことを紹介する。本稿を通じ、**人間の研究者は何をすべきかを考えながら読んでいただきたい。**

2. なぜ、今か?

研究を加速するために何をすべきか。

諸外国との材料開発競争が激化し、産業基盤の強化が急務である。CO₂削減も待ったなし。日本では若者の数は減る一方である。ワークライフバランスを考え労働時間の管理が厳格化しつつある。匠の技、すなわち「暗黙知」の継承も課題である。次なるコロナ禍への備えも進めなければならない。課題は書き切れない。

それら課題解決に向け、「マテリアル(化学・材料・物性)分野における研究の進め方」を変革することが必要である。ここでいう研究の進め方とは、単に高速な実験条件最適化(段階1)では

なく、**段階2**として議論を進める。これを達成するために、**人工知能研究者、数理科学者、ロボット研究者、理論化学者を含むマテリアル研究者が協調し、ハイスループット実験技術と材料予測技術を開発し、データを活用することが重要である**(図1)。

これまでも自動実験システムが存在した。しかし、革新的新材料が次々に生まれるという評判は聞かない。では、なぜ「今がチャンス」なのか。それは近年、下記の点で急激な進歩があり、研究室のデジタル化が可能になりつつあるからである。

1. シミュレーション技術、機械学習技術の急速な発展
2. ロボット技術の向上と適用範囲の拡大
3. 自律実験の実現

そして、もっとも重要である**段階2**に向けてどうすれば良いのか。そのためには上記技術を使いこなし、「**人間の発想を超える仕掛け**」が重要である。つまり、**自律的に実験を進め、予想外の結果を得る確率を上げる**ことである。それにより、これまでの学理や経験に囚われない「**逸脱的思考**」を進めたい。そして、このシステムに、「**暗黙知**」である**研究者の勘・コツ・経験を埋め込み、皆でシェアリング**する。さらに、**データの共有を進め、シミュレーション技術と組み合わせた高度な材料予測技術**を手にする。

以上を活用し、**人間はより創造性の高い仕事に取り組む**(図3)。**研究室のデジタル化**は、研究者が発想を直ちに実現でき、人間の発想を拡大するための仕掛けである。それを実現するための大きな方向性として、**マテリアルズインフォマティクスやプロセスインフォマティクス**が注目されている。そしてそれらを包含した**材料探索機**への期待が高まる。

3. これまで誰も考えなかった材料を作るには: 課題と処方箋

段階2を達成するには多くの道を切り拓かねばならない。その課題と処方箋を整理する。

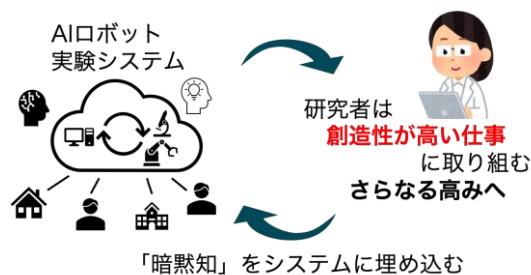


図3. いつでも人間の研究者が主役である。**研究者のために材料探索機がある**。これら技術により、大量のデータをもとに、**高い予測性能で物質を絞り込み、ピンポイントに材料合成実験を進めることが可能となる**。そして、**研究者は創造性が高い作業に取り組み、さらにレベルが高い「暗黙知」を獲得する**。次に、**その知を再びデジタル化する**。このサイクルを繰り返すことが肝要である。

3.1 材料データが不足してマテリアルズインフォマティクスによる探索が進まない

再現性があり、構造・物性が紐づいた、**信頼できる材料実験データが不足**しているため、高精度な予測モデルを構築することができない(図4)。そのため、**大量のリアル実験データが必要**である。特に、繰り返し実験の場合、人手で実験を行い、データを手入力しているようでは、全く研究スピードは上がらず、データは集まらない。

このとき、自律実験システムはすべて**デジタル化している**ので**作製プロセス(合成条件や実験環境)をデータとして容易に蓄積**できる。ベストではない特性のデータ(ネガティブデータ)をも活用することが可能である。つまり、今までノートに埋もれていたデータも活用することができるため飛躍的にデータ数が増し、機械学習の予測精度が増す。さらに、人に依存することがないので再現性が高い。そのため、どのプロセスパラメータが物性に関連しているのか、詳細に解析することができ、合成プロセスを予

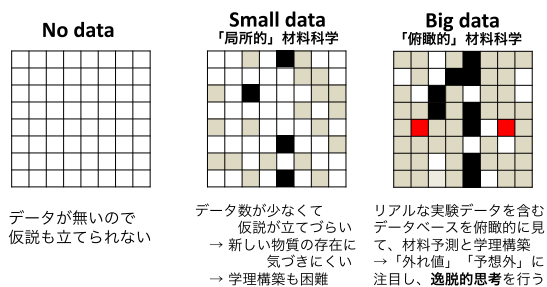


図 4. データの重要性。このタイルの中に数字が隠されているとする。(a) データが無ければ、何も予想できない。(b) タイルの情報に関し、少量のデータがあれば、仮説を立てることができる。この図に1が隠れているとは、通常の研究者は予測できない。しかし、勘・コツ・経験に優れた研究者のみ、「1」の存在を見抜くことができた。これまでは「**局所的**」材料科学であった。(c) そのような優れた研究者に頼るばかりでは、革新的材料を継続して生み出すことはできない。そこでデータを増やし、俯瞰して考える。赤の「**外れ値**」に着目すれば、「1」ではなく、「4」という**真実が見えてくる**。すると、新しい学理の構築が可能となる(俯瞰的材料科学)。

ある指標で分類すると
良い触媒材料(青)が集まっている。
その中に、未評価の材料がある(赤)。
これは良い触媒の候補

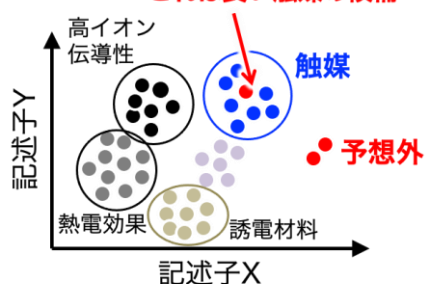


図 5. 「材料地図」を作成し、未開拓材料や領域を特定する。**リアルな実験データ(数千)と世界有数規模の計算データ(数10万)**を使って材料地図を作成する。ここで、「予想外」の実験結果に注目し、その周囲を探索する。自然言語処理も活用する。

測する技術にもつながる(**プロセスインフォマティクス**)。

実際に物質探索範囲をどの程度広げることができるのだろうか。まず、実験の高速化については、薄膜作製であれば数10倍と見積もられる。すでに我々のラボでその程度の高速化を実現している[6]。次に、計測データ取得の高速化を行えば、それも10倍以上、加速できるだろう。現在、研究者は、複数の分析装置に自ら試料を持っていき、物性評価を行っている。正直に言うと「**研究者は試料の運び屋ではない!**」と強く思う。後述する我々のシステムでは複数の実験装置を連結し、次々と自動計測するように構築している。また、最近では計測インフォマティクス技術も発展しつつあり[7]、短時間で高精度な測定が可能になってきた。以上より、実験効率は大いに向上するだろう。

さらに、マテリアルズインフォマティクスを活用し、材料界の地図(**材料地図**)を作り、戦略的に探索を進めると、探索範囲は1,000倍以上広がると考えている。次にその材料地図について考察を進める。

3.2 俯瞰的に見る学理の構築

材料探索機は探索空間内をやみくもに探索するのではない。前節で説明した大量のデータをもとに、俯瞰的に材料界を見る「材料地図」を作成する(図5)。

具体的には、膨大な多次元データを**人間に分かる形で構造化・可視化**する。ハイスループット第一原理シミュレーションによる**計算データとリアルな実験データを融合**させる。このとき、リアルな実験データは、各所から寄せ集めたデータではなく、自律実験システムが収集した**信頼性が高い材料データ**となる。この膨大なデータに、既報データを重ね、「材料地図」を作成する(図5)。

この「材料地図」には、次に実験的に検証すべき未開拓かつ有望な領域が可視化されている。これは**研究者の発想を刺激し、既成概念にとられない逸脱的思考を助ける**。そして、閃いた

アイデアをすぐにロボットに指示して試し、考察を進める。

材料-特性間、あるいは材料-プロセス間の隠れた相関関係と因果関係を抽出すると学理の構築が進む。その際、その相関関係・因果関係にしたがわない「**予想外の実験結果**」を活用することが楽しい結果につながるだろう。これまで「予想外」「外れ値」は、実験やシミュレーションの誤りか真実かの区別がつかず、無視されてきた。しかし、今回はロボットが合成しているので、再現できる。したがって、**外れ値は無視できず、それをも含めた新しい学理**を作ることが可能となる。

膨大な材料データを俯瞰的に見るには、人間にわかりやすい形で見せる技術が必要である。特に、説明可能な機械学習(関数同定問題)と多次元空間の情報を次元削減により可視化する技術の開発が望まれる。

3.3 暗黙知を再現するロボット技術の開発

従来型ロボットは、「精度追求により誤差をゼロ」に抑え込もうとする高剛性で「堅いロボット」である。If~then~とプログラミングされて初めて動作し、状況変化に対して臨機応変に対応することはできない。したがって、匠の「暗黙知」を埋め込むことが難しい。

それと一線を画す、「しなやかさ」を有するロボットが必要である。**しなやかロボット**は、柔らかな制御と柔らかな構造で誤差・外乱を吸収し、停止や破壊に至ることなく動作する。**目的実現まで臨機応変に対応するロボット技術**を開発することが重要である。

現在、「段階1」が広がらないのは、適用できる実験の範囲が狭いからである。しなやかロボットが安価で利用できるようになれば、多くの研究現場でロボット導入が進むはずである。その際、標準化を世界で進めなければならない。その点については後述する。

4. 自律実験システム: 世界の状況

4.1 自律的合成技術における現在の到達点

以上でビジョンについて述べ、課題を整理してきた。次に、世界最先端の状況について紹介する。これについては、科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CRDS)が編纂した報告書が現在一番まとまっている[8]。非常に高い熱量で書かれているので、一読をお勧めする。

実は、自律的に研究を進める仕組みについては、日本の研究者が先駆的な役割を果たしている[9]。現在の最先端を以下に記す。

1. 自動的に有機薄膜作製と評価を行い、狙った特性を有する新材料組成を探索する[10]。
2. 有機分野では、反応合成経路まで予測し、それに応じて実験を自律的に組み替えて自動的に合成する[11]。
3. ロボットが実験室を動きまわり自律的に実験を進める[12]。人間が実験を行いたいときは、実験装置を使えるようになっている。つまり、人間-ロボットシステム共生型と言える。

4.2 我々の取り組み

これまで、無機材料を固体のままハンドリングして自律的に合成・評価する報告は無かった。我々は機械学習とロボット技術を活用し、世界で初めて無機薄膜合成プロセスの自律の実験に成功した(図6)。概念実証としてTiO₂薄膜の低

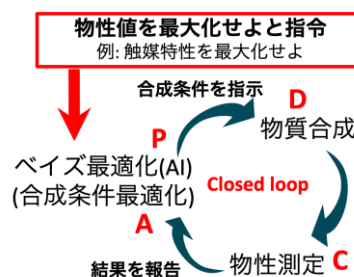


図6 我々が開発した自律的な物質合成・評価装置。人間が関与することなく、最大の物性値となる物質を自律的に合成する。自律化すると大きな質的転換がある。1)実験がすべてデジタル化されているので、プロセス条件を含め、すべてデータ化することができる。2)再現性が向上する。3)暗黙知をデジタル化して埋め込むことが可能となる。

抵抗化を自律的に進めるシステムを構築し、実験スピードを数十倍速めた。技術の詳細については、プレスリリース[6]や文献[13, 14]をご覧ください。

前節で、「予想外」を起点とし、その周辺の材料データを第一原理計算により拡張し、実験へと展開することを述べた。そのアプローチに加えて**多角的な物性評価**を行えば(図7)、さらに予想外の事象に遭遇することができるだろう(計画されたセレンディピティ)。すでに我々は、図6のシステムを用いて、「固体電解質」として合成したが、「電極材料」を発見したという経験をしている。

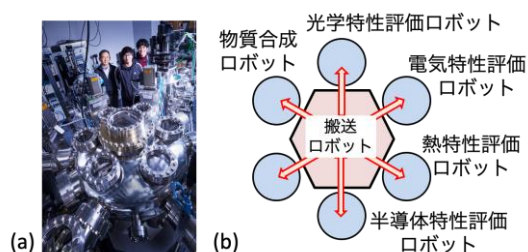


図7 (a) closed-loop 実験装置の写真。すでに筆者の研究室では closed-loop で新マテリアルを合成することに成功している。(b)マテリアルビッグデータを生み出すシステム(多角的評価)。物質合成ロボットで作製した試料について、様々な評価・分析を行い、データを自動収集する。それが予想とは異なる結果の検出につながり、セレンディピティにつながるだろう。

5. 一番考え方が変わったところはどこか？肌感覚。

実際に自律実験システムを構築し、運用を始めている中で気がついた点をまとめる。この取り組みを私をはじめたのは2015年である。はじめた当時と、段階1の自律実験が可能になってきた今、考え方が変わってきたことも述べる。

5.1 適切な課題設定が重要: それを見抜く目を養う

すべての実験操作を機械学習とロボットに任せることは現実的ではない。**高い効果が得られ**

る適切な課題を見抜く目が重要である。それを間違えると、機械学習やロボットは役に立たない。

自動的・自律的な実験技術をどのような研究課題に適用すべきかと問われたら、「マニュアルがしっかりと整備され、多くの人が繰り返し実験するプロセス」と答える。**マニュアルが整備されている定型的業務はロボット化の可能性が高い**。また、多くの人が利用し、繰り返し再現性が高く、波及効果が大きな作業は、自動化・自律化したときの費用対効果が高まる。つまり、「**皆が使う枯れた汎用技術**」から自律化に取りかかると良いだろう。我々も、多くの人が使っているスパッタ装置を自動化・自律化した。

もう一つ重要なことは、原料をセットすることや、試料ホルダを洗浄するのは人間であり、**人間とロボットの協働作業は欠かせない**という点である。ロボットのスケジュールに人間が合わせて作業する場合もあり、ロボットに人間が使われている感覚に陥ることもある。このような作業は研究者が担うのではなく、メンテナンス人材が実施するマネジメントが必要になる。

5.2 コストの問題

このような取り組みはコストがかかるので導入が難しいのではないかと頻繁に問われる。それに対して三つの回答をしている。

一つめは、ロボットの低価格化が進み、適用範囲が拡大しているという事実である。我々が用いている搬送ロボットは一台数百万円である。もし、位置精度が低くて良いならば、数十万円ですぐに入ります。それで24時間、7日間、正確に働く。したがって、人件費から考えると安いとも言える。ただ、ソフトウェア作製にもコストがかかる点を忘れてはいけません。これについては、最近ではLabVIEWやPythonで動かせるようになってきており、プログラミング環境が整いつつある。このように、低価格化が進み、**研究現場に導入できる時代になってきた**。今後、ロボットに操作を教えるティーチング技術の開発が重要だろう。また、ロボット導入に向けては、気軽にロボットに触れて、自分の研究に導入でき

るかを判断できるオープンラボの設置も重要となるだろう。

2 つ目の観点、シェアリングを進める、つまり、「**実験室のクラウド化**」という流れである。自律化システムは 24 時間稼働するので、費用対効果は高まる。さらに、世界中どこからでもインターネット経由でアクセスすることができる。現状、研究室にある装置は、平日の昼間にしか使われておらず、フル活用しているとは言えない。自律化やシェアリングにより、24 時間フルに活用すれば、費用対効果が高い。

企業では、各事業所に実験装置を持つのではなく、中央的な事業所に自律システムを配置し、世界中の事業所とシェアすることも考えられる。つまり会社としての組織構造にも影響を与える。また、在宅でもものづくりが進められるようになり、働き方の改革ともリンクする。

最後に、**多面的特性評価**の観点である。前述のように、**複数の計測器を連結しておき、自動的に多様な特性評価を進める**。これまで研究者が費やしてきた計測に要した時間を、付加価値がより高い仕事に振り分けることが可能となる。つまり、自動化・自律化は費用対効果が大きい。

5.3 人材育成

研究室でなぜ DX が進まないのか。それは、**それを推し進める人材が極めて少ない**からである。マテリアル(化学・材料・物性)研究者は、「どの程度のコストで、ロボットがどのようなことができるのか」について、理解が進んでいない。一方、ロボット研究者はマテリアル実験の現場を知る機会が少ない。したがって、研究に適切な自律実験システムが生まれにくい。それを解消するには、**マテリアルに精通しつつ、機械学習・ロボットを使いこなす学生、研究者の育成を進める必要がある**。

ここで、マテリアル系の学生や研究者は、情報科学をどの程度理解すれば良いのだろうか。私は、**ツールとして情報科学やロボットを自在に使いこなす程度が良い**と思っている。ワードやエクセルを使うような感覚である。困ったら、

その道の専門家に頼れば良い。まずは、情報科学やロボットを気楽に使える人材(**マテリアル×デジタル人材**)育成が重要である。

東京工業大学では文部科学省の卓越大学院プログラムのもと、**物質・情報卓越教育院**を立ち上げ、27 の企業とともに協同教育を進めている。筆者は本教育院の副教育院長を務めている。この教育院は社員教育の場ともなっており、実際に学生と社会人が机を並べ講義や演習を受講している。他にも、企業の抱える課題に対して、マテリアルと情報科学の知識を活用したコンサルティングも行っている。詳しくは、本教育院のホームページや文献[2]を読んでもらいたい。現在、**会員企業を募集中**である。

ここで一つ注意すべきことがある。それは、「**全研究者がこのような研究スタイルをとることはない**」という点である。今後、全研究者のうち何割かの研究者が材料探索機を活用しながら研究を進めるのであろう。**新しい合成法の開拓などは、現在のような研究の進め方が重要**である。したがって、今までの研究の進め方と材料探索機のハイブリッドになっていくと予想している。

「**学生は何をするのか?**」という問いも頻繁に受ける。材料探索機は研究者が楽をするためにあるのではなく、**研究を深めるため**にある。どのような切り口でデータを解析するのか、マテリアルを使った新しいサービスとは何か、新しい学理は何かと考えるべきこと、やるべきことは山ほどある。単純繰り返し作業から解放し、その時間を創造的な研究に活用する。学生、研究者は手を動かしているだけではダメで、もっと頭を使うようになる。それにより、マテリアル研究、産業が活性化することであろう。

5.4 実験の順序

従来は、合成する物質を事前に決め、実験を進めていた。つまり、物質合成した後に組成分析や構造解析を行い、狙った物質が合成されていることを確認した上で、特性評価をしていた。

しかし、この進め方が変わった。良い物性を得ることが目的であるので、**何を合成するのか事前に決める必要は無い**。ロボットに合成させて良い特性が得られたら、その後、組成分析や構造解析を行い、物質を同定すれば良い。気楽に実験に向き合えるようになった気がする。今は装置の改良を進めつつという段階だが、完成度が上がるほどそれを実感するだろう。

5.5 デバイスとしての評価

その流れで、デバイス作製の考え方も変わってきた。実用となるデバイスの特性を最大化することが目的であるので、材料の詳細を知らなくても良いことになる。つまり、デバイスまで自動的に作製し、その後、自動で特性評価し、その結果をもとに次の材料を自律的にチューニングすることが考えられる。ここでも、どんな材料を作ったのかを事前に調べなくても、良いデバイス特性が得られたら評価すれば良い。現在、薄膜合成からデバイス作製まで自動的に進める実験環境を構築しつつある。

5.6 データの取り方

これまで、物質合成条件を解析しようとする、人手でコンピュータに入力して蓄積する必要があった。しかし、今は欲しいデータがあれば計測器を取り付け、**合成前後、最中のすべてのデータを記録**することが可能となった。そのため、プロセスインフォマティクスで知見を得ることが可能になった。これは、クルマでいうとドライブレコーダーがついた感覚に似ている。いまやIoT技術により、容易にデータが集まるうえ、保存するコストも安い。データさえとっておけば、あとでいかようにでも活用できる。そのような発想に変わった。

5.7 チャレンジ精神

アイデアがすぐに試せるので気楽に実験できるようになった。今までは、学生さんに実験の意義を丁寧に説明し、かつ、少ない試行回数で実験を進めることが必要だった(ブラック

と思われたいよう)。しかし、思いつきのアイデアでも、相手がロボットであるし、実験回数も増やせるので、気楽に実験ができるようになった。

そして、私自身も物質探索を進めたいと思うようになった。これまでは、絨毯爆撃がしばしば必要な物質探索には真剣に取り組んでこなかった。そのため、メカニズム解明を主とする研究に集中していた。しかし、今は、**自律実験システムを活用した物質開発**に興味がある。

5.8 理論化学者のことがうらやましい

材料探索機が本格稼働しはじめると、**理論化学者の活躍の舞台が広がるのは確実**である。いつの時代も、「アイデア」を持つものが勝つ。**理論化学者が計算で良い材料を予測したら、インターネット経由で材料探索機にログインして新物質合成ができる**時代になる。現在、我々は、「 $A_xB_yC_z$ を合成せよ」とシステムに指示を出すだけで、自動的に物質を合成し、X線回折装置で自動的に解析して目標との差を定量化して、次の合成条件にフィードバックするシステムを作っている。2年以内には、理論化学者の方が使えるようにしたいと考えている。

こう考えていくと、理論化学者に多くのチャンスがあることがわかる。比較的単純な物質合成技術は確実にブラックボックス化していくだろう。それを活用するためには、やはりアイデア勝負である。そのため、データを自在に操る上、シミュレーション技術を持つ理論化学者がうらやましい。

6. ものづくり業界への期待と警鐘

2021年になり、企業の方々から受ける相談内容が大きく変わった。それまでは、「どのようにしてマテリアルズインフォマティクスを進めるのか」という漠とした話だったが、今は、「この特定テーマで自律化を進めたい。具体的な方策を教えて欲しい」という内容に変わった。

「誰かが成功したら、我々も取り組もう」と考えているようでは、手遅れになる。それは、

データの覇権争いであるため、あとから参入しようとしてもなかなか追いつけないからである。成功したところにはデータが蓄積し、それを活用する。データ量が大きいほど予測性能が増すので、**先行した者が勝つ。自ら先導しないと世界に負ける。**

経営者が決断して、DXを押し進めなければならぬ。これまで、日本は半導体、太陽電池もLiイオン電池も先行したのに、その後凋落することを経験してきた。その原因として、経営戦略を策定して投資判断を行う経営陣の責任は重い。投資判断を先送りして、今、DXに乗り遅れると、取り返しがつかないことになるだろう。DXにて研究開発が何倍にも加速し得るため、その投資効果は大きい。経営者には、DXを進める決断を是非していただきたい。

政府も「**マテリアル革新力強化戦略**」[15]を立案し、2021年よりスタートした第六期科学技術・イノベーション戦略に盛り込んでいる。ここでもマテリアル分野のDXは最重要課題の一つであり、人材育成、ルール整備、共用設備や研究助成の充実と、国全体としてDXへの後押しをしている。下記に、今後、研究環境に起きると思われることについて、いくつかの論点で議論を進める。

6.1 ラボシステムインテグレータにデータを吸い取られる

ラボがシステム化していくのは自然な流れである。すると、**誰がラボを作るのか？** 近々、**ラボシステムインテグレータ(ラボSI)が出現するだろう。** そのラボSIは海外企業になってもおかしくはない。世界中でビジネスをしているのでノウハウもあるだろう。そのラボSIにラボ設計を任せると、**データもそのラボSIの元に入る仕組みになることを危惧する。** そして、そのシステムに日本発の合成・分析機器は採用されなくなり、合成・分析機器メーカーが凋落する可能性がある。それも恐ろしい。

実際に世界では、実験機器のメカ機構やインターフェースのフォーマットを揃えようという

動きがある。我々のなじみがあるGP-IB、LabVIEW、すべて舶来ものである。ラボSIも標準化やデファクトスタンダードが鍵であり、早く技術を立ち上げ優位な交渉を進めなければならない。マテリアル関連企業側からすると、**ラボSIに丸投げするのか、自社内でその能力を持つのか、**判断が迫られている。もちろん、体力がある企業は後者を選ぶべきである。

6.2 仕事の進め方の変革

研究室のDXは、企業の組織構造や仕事の進め方が変わることでもある。従来の研究スタイル(勘・コツ・経験、精神主義、竹槍主義)に加え、本稿で紹介する研究スタイルが並立するようになるだろう。いずれのスタイルにおいても、**研究者を実験室に縛り付けてはならない。単調繰り返し実験に時間を奪われることなく、時間を有効活用でき、自由な発想ができる研究環境**を構築する必要がある。マテリアル合成は在宅でもできる時代になりつつある。そのような状況に適した企業の組織構造・仕事の進め方を考えていかねばならない。

6.3 どこから、どのように始めるのか。

段階1の自動化・自律化実験に向けて、どこから手をつけるべきか。私は複数社でそのお手伝いをしている。特定の課題を決め、**マテリアル合成・評価、ロボット、機械学習、全体システム制御をインテグレート**する作業のお手伝いである。その経験を踏まえると、成功の秘訣を以下のようにまとめる。

1. 5.1節で述べたように、適切な課題を設定し、ワークフローを明確にすること。まずは、**小さなサイクルで小さな成功体験を作る**ことが重要である。社内のDXを進める上で、小さな成功体験を見せる必要がある。

2. 自社内の情報科学がある程度分かる人材をプロジェクトに含めること。それも物質についての素養を持っている人が望ましい。自律化技術を社内に根付かせるためには必須な人材である。

3. 生産技術部門の人を入れると良い。コストを考えながら進められる。また、装置の制御、システム化の観点で協力が得られる。

4. デジタル化(自動化・自律化)を強く推進したいと考えるマテリアル研究部署があること。それをマテリアルズインフォマティクス推進部門が支援するという形を作る。推進部門ががんばるだけでは、社内にDXを根付かせることができない。

6.4 特許とデータ共有の課題

これは別の原稿にてまとめる予定である[16]。

7. おわりに

この研究を進めれば進めるほど、「**人間の研究者は何をすべきか**」について、深く考えさせられる。機械学習やロボットがなんでもやってくれるわけではない。**それらが得た結果から、研究者がインスパイアされる**という使い方が良いと考えている。**我々研究者はもっと創造性を発揮すべきである。そのために機械学習やロボットを使いこなす。**

今、博士課程の進学者数減少が大きな課題になっている。大学の研究室では博士課程の学生が研究の原動力である。博士課程の学生は高いレベルの研究を推進し、卒論生や修士課程の学生はその雰囲気に触れ、薫陶を受ける。博士課程の学生が減ると大学での研究レベルが下がり、新領域を切り拓く気風が学生に吹き込まれない。そのような環境で育ってきた学生は、企業で活躍できるのだろうか。機械学習やロボットを科学研究に活用して、魅力的な研究開発現場を作り、博士課程への進学を促す[17]ことが重要である。そして修士課程の学生でもハイレベルの研究を展開することが求められている。

冒頭で述べたように、マテリアル開発は人類のフロンティアである。**我々研究者が創造的な研究を展開して楽しみつつ社会に貢献する。**それを見た**後進がこの領域に入ってきて、新たなマテリアルを切り拓く。**それが真の正のスパイラルである[18]。

謝辞

本稿をまとめるのにあたり、多くの方々に大変お世話になりました。東京工業大学の大場史康教授、清水亮太准教授、中山亮博士、小林成さん、木村武史さんに、日頃の議論に感謝いたします。石附直弥氏には原稿を整える上で非常にお世話になりました。また、本稿を出版する機会を与えていただき、様々な議論をさせていただいた、大越昌樹様に感謝申し上げます。JST-CREST、JST-MIRAI プロジェクトのメンバーの皆様、ロボットに関してはオムロンサイニックエックスの井尻善久博士、Felix von Drigalski 博士、牛久祥孝博士に心よりお礼申し上げます。

参考文献

- [1] R. S. Bohacek et al., *Med. Res. Rev.*, **16**, 3 (1996); P. Kirkpatrick and C. Ellis, *Nature*, **432**, 823 (2004).
- [2] 一杉太郎, 日本化学会情報化学部会誌, **38**, 2 (2020).
- [3] 北野宏明, 人工知能, **31**, 275 (2016).
- [4] 「材料創製技術を革新するプロセス科学基盤～プロセス・インフォマティクス～」, 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター (2021).
- [5] T. Dimitrov et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 24825 (2019); N. J. Szymanski et al., *Material Horizon*, *in press* (2021).
- [6] 東京工業大学・科学技術振興機構・産業技術総合研究所 プレスリリース, <https://www.titech.ac.jp/news/pdf/web-tokyotechpr20201119-shimizu-m15g8osq.pdf> (2020).
- [7] 鷲尾隆, 岡田真人, 人工知能, **34**, 622 (2019).
- [8] 「リサーチトランスフォーメーション(RX)ポスト/with コロナ時代、これからの研究開発の姿へ向けて」, 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター (2021).
- [9] R. Matsuda et al., *Chem. Pharm. Bull.*, **36**, 3512 (1988).
- [10] B. P. MacLeod et al., *Sci. Adv.*, **6**, eaaz8867 (2020).

- [11] IBM RXN for Chemistry, <https://rxn.res.ibm.com/>
- [12] B. Burger et al., *Nature*, **583**, 237 (2020).
- [13] R. Shimizu et al., *APL Mater.*, **8**, 111110 (2020).
- [14] 船津公人監修, 「データ駆動型ケミストリー(仮題)」, 株式会社エヌ・ティー・エス, *in press*.
- [15] 内閣府, 「マテリアル戦略」, <https://www8.cao.go.jp/cstp/material/material.html>
- [16] 石附直弥、清水亮太、一杉太郎, *in preparation*.
- [17] 「「博士」のすゝめ」, <https://www.tacmi.titech.ac.jp/pdf/hakasenosusume.pdf>
- [18] 半年後以降に、日本物理学会誌にまた記事が掲載される予定である。それについては原稿を一行もまだ書いていない。論考の発展についても興味を持つ方は、そちらも参照いただきたい。

著者紹介

一杉太郎(博士(工学)): [経歴]
1999年東京大学工学系研究科博士課程修了、同年ソニー株式会社に入社。東京大学・助教、東北大学・准教授を経て、2015年から現所属。[専門] 固体化学、表面・界面科学。



受取日: 2021年7月6日

受理日: 2021年7月7日