第2回「自動・自律的実験」に関する研究会

日時: 2022 年 10 月 14 日(金) 13:00 – 16:30 Zoom によるオンライン開催 参加登録用 URL:

https://zoom.us/meeting/register/tJAsceGrpz0rGtwlOEjtOo2V7lAoONqQST4j(登録後、ミーティング参加に関する情報の確認メールが届きます。参加費無料)

[主催] 東京大学大学院 理学系研究科 化学専攻 一杉研(固体化学研究室) 東京工業大学 物質理工学院 応用化学系 一杉・清水研究室

[協賛] 東京工業大学 物質・情報卓越教育院

JST-未来社会創造事業「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」 応用物理学会 インフォマティクス応用研究会 東京大学 再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点

機械学習とロボット技術を活用して、実験を「自律的」に進める時代が到来した。この技術を活用して、いちはやく新材料を発見し、実用化に結びつけることが強く望まれている。そこで本研究会では「自動・自律的実験技術」に集中して、情報交換と議論を行う。マテリアルズインフォマティクスや自律実験技術の重要性はすでに理解しているという前提で、「自動・自律技術を使いこなすには」という視点で話を進める。化学、材料、物性実験の研究者がベイズ最適化を使いこなすコツを、リラックスしつつオープンに議論する場としたい。

「プログラム]

13:00-13:10 開会挨拶

東京大学/東京工業大学 一杉 太郎

"機械学習とロボットは、研究者を「自由」にする"

座長 清水 亮太

13:10-13:45 講演 20 分、質疑 15 分

豊田中央研究所 鈴村 彰敏

"電解液探索の自律化"

13:45-14:20 講演 20 分、質疑 15 分

NIMS 松田 翔一

"「実験自動化ロボット+機械学習」による新規電解液探索システム"

14:20-14:40 休憩 20 分

座長 中山 亮

14:40-15:15 講演 20 分、質疑 15 分

統計数理研究所 日野 英逸

"ベイズ最適化の停止基準について"

15:15-15:50 講演 20 分、質疑 15 分

株式会社ハカルス 増井 隆治

"スパース推定を用いたベイズ最適化による実験計画アルゴリズムの活用"

15:50-16:00 総合討論、閉会挨拶 一杉 太郎

16:00-16:30 相談会・質問会 具体的案件に関して相談する時間を設けます。 各講演者のブレークアウトルームに入室ください。

[問い合わせ先]

東京大学/東京工業大学 一杉 太郎 hitosugi@g.ecc.u-tokyo.ac.jp 東京工業大学 中山 亮 nakayama.r.ad@m.titech.ac.jp

「予習用 URL」ハイパーリンクになっているのでクリックしてください。

- 1. 一杉・清水研の AI ロボット関連ホームページ
- 2. 一杉太郎 messages
- 4. <u>LabView ユーザ紹介</u>(一杉・清水研究室のデジタル化について)
- 5. <u>自</u>律的に物質探索を進めるロボットシステムを開発 (東工大プレスリリース)
- 6. 研究者と AI, ロボットが協調しつつ進める新しい研究開発の姿 (日本化学会 情報化学部会誌特集記事)

[予習用動画] ハイパーリンクになっているのでクリックしてください。

- 1. 「固体物理・固体化学と電気化学の交差点に未来がある」 一杉太郎・清水亮太研究室 — 東工大 物質理工学院研究室紹介
- 一杉太郎「まだ見ぬ災厄に向け、研究の進め方に変革を」
 ※ 鈴木悠太 Tokyo Tech DLab "STAY HOME, STAY GEEK" 研究者インタビュー
- 3. AI、ロボット、研究者が協働するデジタルラボラトリ