

2023 年 9 月 5 日

報道機関各位

東京工業大学、東京大学大学院理学系研究科 一杉研究室

データ・ロボット駆動科学を推進する デジタルラボラトリーの開発

－新しい研究開発の進め方で世界をリードする－

【要点】

- さまざまな物質合成、計測・分析装置を**相互接続**し、実験室をシステム化
- 得られたデータを**共通データ形式**でクラウド上のデータベースに収集し、利活用
- **自動・自律実験**により、新規物質を探索することが可能

【概要】

東京工業大学 物質理工学院 西尾和記特任准教授、相場諒特任助教、東京大学 大学院理学系研究科 小林成特任助教、清水亮太准教授、東京工業大学 物質理工学院 特任教授（東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻 教授）の一杉太郎らは、日本電子株式会社、株式会社堀場製作所、株式会社リガク、株式会社島津製作所、株式会社デンソーウェーブ、株式会社パスカ、株式会社テクトスとともに、ロボットと機械学習を活用した「データ・ロボット駆動科学」を推し進めるデジタルラボラトリーを構築した。

近年、化学や素材、自動車、エレクトロニクス産業など広い分野でマテリアル(材料)研究の加速が求められている。材料探索のための合成・評価を加速するため、ロボットと機械学習を組み合わせる取り組みが世界中で進められている。今回構築したデジタルラボラトリーは固体材料に関わるデータ・ロボット駆動科学を推進する世界初のシステムであり、固体材料開発において日本が世界をリードし続けることを可能とする。

その特徴は以下にまとめられる。

1. 各種実験装置が物理的に**相互接続**され、材料合成から表面微細構造観察、X 線回折パターン、光学特性などの物性計測まで、全自動で行うことが可能である。
2. 計測データは、日本分析機器工業会と経済産業省が策定した**共通データ形式** (MaiML フォーマット：用語説明参照)でクラウド上のデータベースに収集される。さらに、クラウド上のソフトウェアでデータを解析し、利活用することを可能とする。
3. 機械学習とロボットが**自動・自律的**に材料探索を行うことが可能である。

デジタルラボラトリーを活用して材料探索を行うことにより、膨大なデータより研究者はインスパイアされ、より創造的な研究に取り組むことができる。詳細は日本分析機器工業会と日本科学機器協会が主催する JASIS(Japan Analytical and Scientific Instruments Show、2023 年 9 月 6 日(水) - 8 日(金)、幕張メッセ)にて展示される。

●背景

機械学習とロボットが、「自動的・自律的」に実験を進めることが可能になってきた。まさに、実験室に大きな変革が起きている。今や、実験室は「実験装置の置き場」ではない。実験室は、「**実験装置群がシステムとして動く、新物質とデータの生産工場**」と捉えることができる。この動きは、機器の標準化やデータ収集の自動化と連動し、研究者の働き方や研究開発の進め方に大きな変化をもたらすのは確実である。

その現状と将来展望について、今、議論し、我が国がいかにしてこの動きを先導し、研究力を強化するのかについて考えねばならない。特に、協調領域と競争領域を切り分け、**皆で協調領域の研究開発に取り組み、研究力と産業競争力の基盤を底上げ**することが重要である。さらに、そのような動きをリードする人材の育成が急務である。そのような背景のもと、本研究を進めた(参考文献 1-4)。

新規材料の開発のためには組成、温度、ガス雰囲気などの複数の合成パラメーターを最適化する必要がある。合成装置の精緻化や部材の複雑化によって設定すべきパラメーターの範囲が拡大しており、研究者自身の手による探索は困難になってきている。そのような背景の中、材料開発における国際的な競争は激化している。日本が世界をリードするために、少子高齢化による人手不足や働き方に関する考え方の変化等、社会の動きに対応した研究開発の進め方に向けて、変革が強く求められている。

近年では機械学習とロボット技術を組み合わせ、広大な探索空間の中から材料探索することが可能になってきた。実験の繰り返し作業を機械学習により制御されたロボットシステムに任せることにより、膨大な数の試料とデータを生成することが可能である。このデータを活用して研究開発を進める**データ・ロボット駆動科学**の動きが世界で活発化している。これまで、液体を用いる実験分野での実践例が報告されているが、固体試料を扱う分野においてはまだまだ発展途上である。したがって、固体材料開発の分野で実験室のデジタル化を進めることにより、日本が世界をリードしつづけることが望まれる。

●自動試料合成と物性計測分析モジュールの相互接続

デジタルラボラトリーは、実験機器が相互接続され、全自動で物質合成・計測を行うシステム(図 1)と、データ収集と解析を行うシステムから構成されている。前者はモジュール化された試料合成および物性計測を担う装置群によって構成されている。

物質合成・計測システムを構成するモジュールは以下の通りである。

1. **【薄膜合成モジュール(パスカル社製)】** スパッタ成膜装置により基板上に薄膜試料を合成する。
2. **【走査型電子顕微鏡モジュール(日本電子株式会社製)】** 試料に電子線を照射し表面の凹凸を可視化する。また、電子線照射により生じる特性 X 線を検出し、元素・組成分析を行う。
3. **【X 線回折モジュール(株式会社リガク製)】** 試料に X 線を照射し、回折パターンを得る。定性分析、定量分析、結晶構造解析を行う。

4. 【ラマン分光モジュール(株式会社堀場製作所製)】 薄膜試料にレーザー光を入射してラマン効果によるラマンスペクトルを得る。スペクトルから分子構造同定や不純物相の特定を行う。
5. 【透過率測定モジュール(株式会社島津製作所製)】 波長ごとに単色化した光線を試料に照射し、透過光の強度を計測する。スペクトルから吸光度、透過率を求める。
6. 【試料搬送ロボット】真空チャンバー内と大気圧下のそれぞれに設置されたロボットアーム(デンソーウェーブ)によりモジュール間で試料を搬送する。

デジタルラボラトリーは、中央コンピュータから各種モジュールに対してタスクを指示することによって自動的に実験を行う(図2)。各実験装置がモジュール化されていることにより、システム全体の拡張性が増し、多様な実験に対応が可能である。

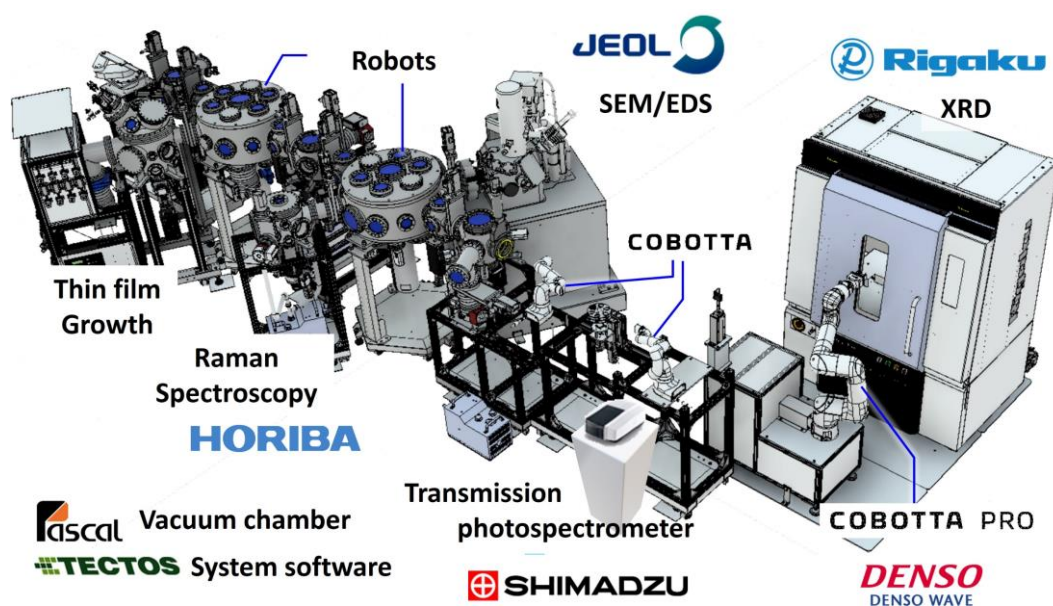


図1：自動・自律実験を行うシステムの全体図。モジュール化した合成装置(スパッタ成膜装置)と各種計測・分析装置が接続されている。試料ホルダの形状や、各モジュールを接続した際の通信プロトコルを公開している。

●共通データ形式を用いたデータ収集と利活用

各計測・分析装置から得られたデータは標準データ形式(MaiML フォーマット：用語説明参照、参考文献 5)で学内ネットワークを経由し、クラウド上のサーバーにアップロードされる。図 2 にデジタルラボラトリーのアーキテクチャーとネットワーク構成図を示す。中央コンピュータと各モジュールは Ethernet ケーブルで有線接続されている。今回は Amazon AWS を利用した。クラウド上に蓄積された多様なデータを、クラウド上で動作するソフトウェアで処理することが可能である。

従来はクラウド上のサーバーにデータを蓄積したとしても、データ活用のためには研究者自身のコンピュータにデータをダウンロードし、専用ソフトウェアでデータ加工を行う必要があった。しかし、デジタルラボラトリーでは計測装置から直接データのアップロードが行われる上、そのデータに対してクラウド上のアプリケーションで加工することを可能としている。これにより、時間と場所を選ばず、皆でデータを利活用することが可能となる。

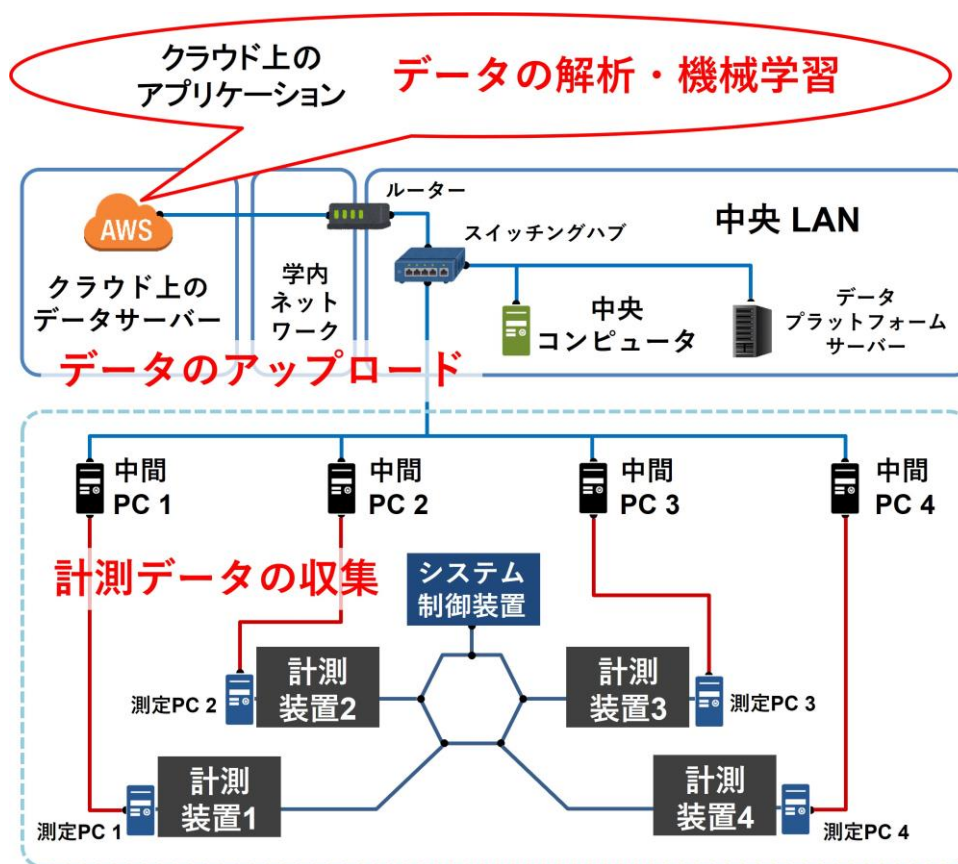


図 2：システムのデータの階層構造とネットワーク構成図。各合成・計測分析モジュールは中間 PC を介して中央コンピュータと接続されている。学内ネットワークを経由してクラウド上のデータサーバーとも接続されている。

●自動・自律的に材料探索

本システムは機械学習とロボットを活用した自動・自律実験が可能である。一杉、清水らは 2019 年に自動・自律実験に成功し、2020 年に論文出版とプレスリリースを行った(参考文献 6、7)。

自動実験と自律実験について、言葉の定義を説明する。「自動実験」は人間が指定した実験を、ロボットが繰り返し正確に進めることを意味する。一方、「自律実験」は、コンピュータが次に進める実験内容を指定し、ロボットが指示通りにその実験を実施する。そして、その実験結果をコンピュータにフィードバックし、次に取り組む実験内容を決定する。このサイクルをクロズドループ(closed loop(図3))と呼び、人間の関与無く、目的の材料を合成するまで物質探索空間を探索する。

この自動・自律実験技術と多面的な物性評価により、巨大な探索空間のなかに分け入って、新規材料を見つけ出すことが可能となる。多面的な評価は予想外の発見につながることを期待される。研究者にとって意外性のある結果が得られたときがチャンスである(セレンディピティ)。これまでの常識・知見にとらわれない発想のもとで研究を進める機会を増やすことが期待され、イノベーションの創出につながる。

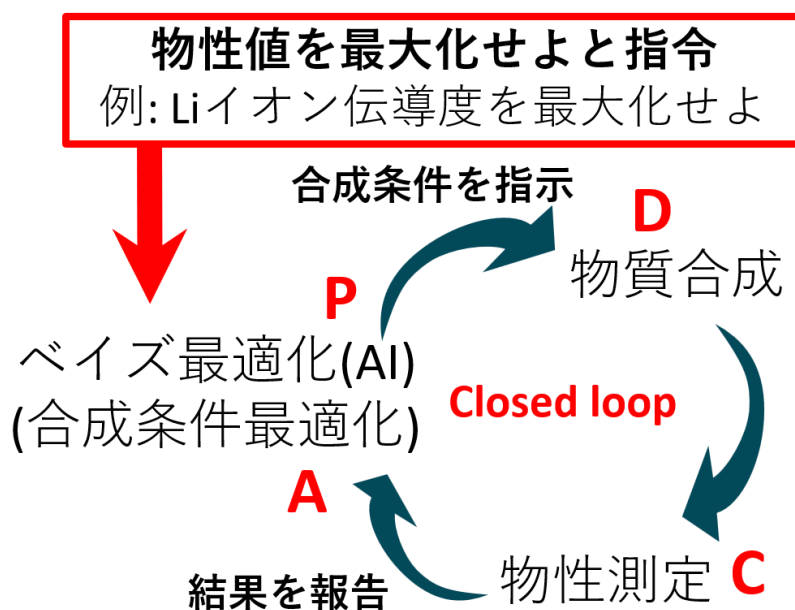


図3：Closed loop の一例。試料の合成と物性計測を全自動で行い、結果をフィードバックして新たな合成条件を機械学習により決定する。合成条件の計画(P)、実行(D)、物性評価(C)、最適な合成条件の推定(A)のPDCAサイクルを自律的に回すことができる。

●今後の展望

【システムの拡張: 適用できる実験範囲の拡大】 物質合成と物性評価に関わる新たなモジュールをシステムに追加し、機能を拡張することが可能である。モジュールの接続は、将来的に Plug and Play になると考えている。各種モジュールを実験室に導入し、相互接続するだけでデジタルラボラトリーが構築できるというものである。接続するための試料ホルダ形状、接続する際の通信プロトコル等を一杉研究室ホームページにて公開している(参考文献 8)。これに準拠した仕様で構築した実験装置を本システムに物理的に接続し、システムとして動作させることが可能である。今後、物質合成の幅を広げ、セラミックスやポリマー、有機材料等の自動合成プロセスの開発を目指す。

【実験装置とデータ共有の推進】 デジタルラボラトリーのシステムとデータを、学内外問わず広く共有する予定である。学外からインターネット経由でデジタルラボラトリーに接続し、自動・自律的に合成実験と物性評価を行うことができるようにする。これは、広い範囲での集合知を得ること、さらにはそれによるオープンサイエンス(参考文献 9)の推進を可能とする。本実験装置は、東京工業大学で研究設備の共同利用を推進する組織であるオープンファシリティセンター・ファシリティステーション(すずかけ台キャンパス)に設置されている。また、この方向性は、2023 年 5 月に行われた G7 科学技術大臣会合、および G7 広島サミットのコミュニケで、オープンサイエンスの推進が明記された方向性と合致する(参考文献 10、11)。セキュリティーを確保しつつ、今後、共有を推進する。

【技術移転の推進】 多くの企業や研究者に技術を移転している。2023 年 4 月からこれまでに 100 社以上の企業、300 名近い研究者が本実験システムを見学を訪れている。今後も技術を広めるために努力を続ける予定である。また、企業における個別案件のデジタル化にもアドバイスをしている。見学は随時受け付けており、次回見学会を 2023 年 9 月 29 日の午後に行う予定である。興味がある方は一杉研ホームページを確認いただきたい。また、日本ファインセラミックス協会(JFCA)と日本分析器工業会(JAIMA)と共にデジタルラボラトリー研究会(参考文献 12)を立ち上げた。

【物質・材料に関わるビッグデータを知識とするための技術開発】 本システムが設置されている建物の入り口には、"Information is not knowledge"という Albert Einstein の言葉が記されている。大量にデータを集めるだけで満足しては不十分で、そこから知識を導く、あるいは学理を構築するための仕組みを作らねばならない(図 4)。そのためには、データを上手に加工して、人間の研究者を刺激するソフトウェア開発が急務である。

●社会的インパクト

1. 【研究開発力の向上】 多くの試料に対して種々の物性計測を行うことにより、材料探索空間を大きく広げることが可能となる。それにより、材料を俯瞰的に捉えることを可能とする。そのようなデータとシミュレーション・機械学習と組み合わせ、新しい学理の構築をすることが可能となる。それにより、新たな材料の予測が可能となる。また、本システムは、合成プロセスにおける各種数値情報(例えば合成が行われている最中での酸素分圧の時間変化や基板の温度変化)もデータとして収集

することができる。物性と合成プロセスとの相関を明らかにすることが期待される。

膨大なデータと機械学習により、ChatGPT のような技術が登場し、世界に大きなインパクトを与えつつある。次に、材料に関する膨大なデータと新しい機械学習技術が、材料研究にどのようなインパクトを与えるのか、見てみたい。

2. 【研究者の働き方の変化】 これまでは実験室に行かねば、実験的研究を進めることができなかった。本システムを用いれば、自宅からでも実験を進めることができ、よりフレキシブルな働き方を可能とする。夜間や休日でも自動・自律的に実験を進められる。また、繰り返し作業を本システムに任せることにより、研究者は創造的な研究に取り組む時間が増える。機械学習やロボットにはできないことを進めることが人間の研究者のオリジナリティとなる。
3. 【研究者が注力すべきことの再考】 社会を俯瞰し、課題を解決する方策を構想し、**実現する力**がますます研究者に要求されるだろう。そして、今後の研究者の育成方針も変化していくことが予想される。**機械学習とロボットができることとできないこと**を正確に理解する人材が求められる。そうしなければ、課題設定さえできない。今後、機械学習とロボットが実現できず、人間だけが成しうること注力することが望まれる。つまり、研究者のオリジナリティ、創造性がますます問われる時代となる。異分野との融合に積極的に取り組み、広い視野で課題を発見し、高いコミュニケーション能力を活用して課題解決する実行力を持つ人材の育成が必要である。**データに科学的な意味を見出し、大局的に判断し、社会へインパクトを与える**ことは人間の研究者の仕事となる。



図 4：デジタルラボラトリーがもたらす新たな物質探索のあり方（参考文献 3）。俯瞰的に膨大なデータを見て大局観を養い、新しい学理や物質の発見を可能とする。人間が得意な大局的な判断や勘・コツ・経験と、デジタル技術等を組み合わせて、新材料をいち早く見つけ出すことが期待される。

●結言

今回、我々は固体薄膜試料について自律的に実験を進めるシステムを構築した。固体材料の分野においては世界的にも実験室のシステム化が発展途上で、日本が世界をリードしていくチャンスである。世界に先んじるために構築したシステムを運用し、材料開発を加速したい。この開発過程で感じるのは、**デジタルラボラトリーを有効活用するためには、化学や材料の知識が不可欠**であるということである。自動・自律実験を導入すれば、すぐに成果が出せるというわけではない。**研究者の勘・コツ・経験と組み合わせ**て初めて成果が出せることを痛感する。**デジタルとアナログの融合**こそが鍵である。物質や材料についての手触り感を体得した研究者が、機械学習やロボットを使いこなす人材を育成することが望まれる。デジタルラボラトリーの開発や活用に積極的に若手研究者を参加させ、将来の学界、産業界を牽引する科学者を育成したいと考えている。機械学習とロボット技術を使いこなし、日本の国際的な競争能力の向上に貢献できる科学者を生み出すこともまた、デジタルラボラトリーの成果となると期待される。

●謝辞

本研究は、科学技術振興機構(JST) 未来社会創造事業(MIRAI) [JPMJMI21G2]、戦略的創造研究推進事業(CREST) [JPMJCR22O4]、東京工業大学 オープンファシリティセンター、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業 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」(DX-GEM) [JPMXP1122712807]の支援を受けて行われた。大阪大学 小野寛太教授の支援も受けた。ここに厚く御礼を申し上げます。

【用語説明】

MaiML フォーマット：日本分析機器工業会(JAIMA)と経済産業省が策定した共通データ形式。Measurement analysis instrument Markup Language の略。共通のフォーマットを使用することにより複数の異なる機器からのデータの変換を容易とし、データの統合と利活用を推進する。今年度 JIS 公示予定であり、2023 年 9 月時点では MaiML フォーマットの前身となる XMAIL フォーマットで運用している。

COBOTTA PRO および COBOTTA は株式会社デンソーウェーブの登録商標です。

【参考文献】

- [1] 一杉 太郎 「機械学習とロボットは、研究者を「自由」にする」日本物理学会 77, 592-601 (2022).
https://doi.org/10.11316/butsuri.77.9_592
英語のレビュー
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/27660400.2023.2197519>

- [2] JST-CRDS 報告書「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」,
<https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2020/RR/CRDS-FY2020-RR-06.pdf>
- [3] National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. 2022. Automated Research Workflows for Accelerated Discovery: Closing the Knowledge Discovery Loop. Washington, DC: The National Academies Press.
<https://doi.org/10.17226/26532>
- [4] 一杉 太郎「AI ロボット ―何ができて、何ができない?―」『現代化学』612, 東京化学同人, 30-32, (2022)
https://solid-state-chemistry.jp/2022Mar_gendai_kagaku.pdf
- [5] 一村 信吾, 重藤 知夫, 安永 卓生, 井上 信介 (2023)「計測分析機器の出力データフォーマット共通化」『応用物理』92, 応用物理学会, 142-146
https://doi.org/10.11470/oubutsu.92.3_142
- [6] Ryota Shimizu, Shigeru Kobayashi, Yuki Watanabe, Yasunobu Ando, and Taro Hitosugi (2020) “Autonomous materials synthesis by machine learning and robotics” APL Mater. 8, 111110
<https://doi.org/10.1063/5.0020370>
- [7] プレスリリース「自律的に物質探索を進めるロボットシステムを開発 ―物質・材料研究開発の進め方について革新を起こす―」
<https://www.titech.ac.jp/news/2020/048276>
- [8] 一杉研究室ホームページ “図面”
https://solid-state-chemistry.jp/ai_robotics/standardization.html
- [9] 日本学術会議 回答「研究DXの推進―特にオープンサイエンス、データ利活用推進の視点から―に関する審議 について」
<https://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/pdf/kohyo-25-k335.pdf>
- [10] 内閣府ホームページ G7 仙台科学技術大臣会合 (概要)
https://www8.cao.go.jp/cstp/kokusaiteki/g7_2023/2023.html
- [11] 日本学術会議 学術フォーラム「オープンサイエンス、データ駆動型研究が変える科学と社会―G7 コミュニケを読み解く」
<https://www.scj.go.jp/ja/event/2023/339-s-0626-27.html>
- [12] 日本ファインセラミックス協会 デジタルラボ研究会の発足について
<https://www.jfca-net.or.jp/contents/view/4672>

[13] 一杉研究室ホームページのデジタルラボに関するページ
https://solid-state-chemistry.jp/ai_robotics/index.html

【問い合わせ先】

東京工業大学 物質理工学院 応用化学系 特任准教授

西尾 和記

Email: nishio.k.ag@m.titech.ac.jp

TEL: 03-5734-3935

東京工業大学 物質理工学院 応用化学系 特任教授

東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻 教授

一杉 太郎

Email: hitosugi@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

TEL: 03-5841-4353

【取材申し込み先】

東京工業大学 総務部 広報課

Email: media@jim.titech.ac.jp

TEL: 03-5734-2975 FAX: 03-5734-3661

東京大学 大学院理学系研究科・理学部 広報室

Email: kouhou.s@gs.mail.u-tokyo.ac.jp

TEL: 03-5841-8856