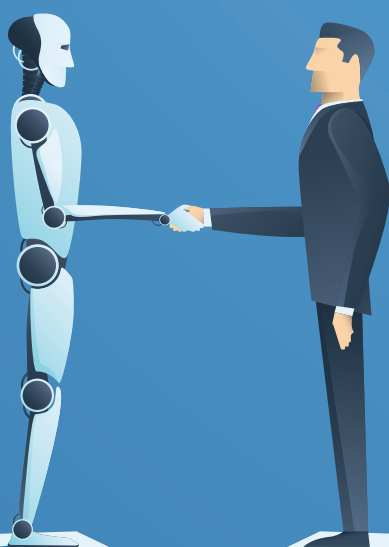


人と共生する

AI革命

活用事例からみる生活・産業・社会の未来展望

監修 栗原 聡



第1節 AIとロボットを融合した全自動システムによる機能性薄膜創製

東京工業大学/科学技術振興機構さきがけ 清水 亮太 東京工業大学 一杉 太郎

1. はじめに

「機械学習」「ビッグデータ解析」「人工知能（AI）」といった単語が新聞などの報道で駆け巡り、世の中のあらゆる局面において情報科学的手法の重要性が叫ばれている。将棋や囲碁の世界においては、今やAIがトップ棋士を圧倒していることから、大量のデータに基づくAIの予測精度はその道の第一人者を凌ぐフェーズに至ったといっても過言ではない。そのような技術を新物質合成に応用し、いち早く有用な物質を生み出すとともに、新しい物質科学を切り拓くことが強く望まれている。

現在の物質開発の潮流を概観すると、物質を探索する範囲が急拡大しており、効率的な新物質開発が強く望まれている。まず探索範囲の拡大を感じるのが、物質を構成する元素数とそれぞれの元素の比率（組成）である。もはや、単純な元素組成や構造の物質では、現代社会が要求する性能・機能を満足させることは難しい。一例として全固体Li電池に向けた固体電解質開発を考えると、現在最高のLiイオン伝導度を有する固体電解質（ $\text{Li}_{9.54}\text{Si}_{1.74}\text{P}_{1.44}\text{S}_{11.7}\text{C}_{0.3}$ ）は5つの元素を含み、その組成も非常に精密に調整されている¹⁾。物質研究者は今後、より多くの元素や複雑な構造を有する物質をますます扱う必要があることは想像に難くない（図1）。

このように探索空間が指数関数的に増大する中、膨大なデータベースとAIを利用し、新たな物性・機能を示す物質を探索するマテリアルズインフォマティクスが注目されており、物質材料開発の高速化への期待が高まっている。しかしながら、現状のマテリアルズインフォマティクス

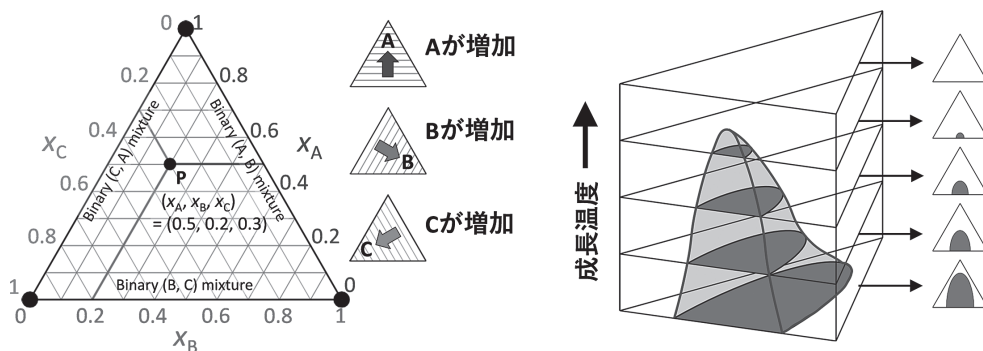


図1 多元素での物質合成の例

3元素では三角相図が用いられるが（左図）、この3元相図に温度のような合成時の制御因子が加わると三角柱型となり、探索空間は拡張する（右図）。元素の数は5つ、制御因子が温度・圧力・成長速度などが加わると探索空間は膨大となり、高効率かつ高精度な探索手法の導入が強く要請される

の利用は「予測」に留まっている。予測された物質を速やかに合成し、さらに実用材料へと展開させなければならないが、物質合成はいまだに「人力頼み」である。

その物質合成という面においても、合成条件の探索範囲は拡大している。昨今の合成装置の精緻化に伴って多様な合成パラメータを調整することが可能となり、合成条件最適化に多大な労力を要している。例えば、広く用いられるスパッタ成膜法による薄膜作製を考えてみよう。成膜条件として、ガス圧、投入電力、温度、原料などの多数の合成パラメータがあり、これらを最適化する。しかしながら、実際の作業には繰り返しの手順も多く、研究者の貴重な時間が単純労働に奪われている。スパッタ成膜法の場合、研究者が真空チャンバーの中に試料を入れ、真空排気されるまで待機する。次に所定量の雰囲気ガスを導入し、スパッタ電源の出力を調整した後に成膜を開始する。成膜後に試料を取り出して物性評価を行い、その結果に基づいて次の成膜条件を決定し、成膜を開始する。この「成膜・評価・条件決定」という一連の流れを、従来は研究者が繰り返し行ってきた。もちろん、一部を自動化する実験装置は存在したが、とりわけ条件決定においては研究者・技術者の判断が必要となるため、研究スピード向上の律速となっている。喫緊に求められていることは、研究者をこのような単純なルーチン作業から解放し、さらに付加価値の高い仕事へシフトすることにより新たな発想を生み出し、それに基づいた物質・材料の研究開発を加速させることである。

さらに、研究者を取り巻く環境の変化も、研究の進め方自体の抜本的な見直しを迫っている。世界レベルで物質・材料開発の競争は激化しており、物質合成の生産性向上は急務である。また、働き方に対する考え方も変化し、労働時間と人口が減少していく中、どのようにして効率的に研究開発を進めるのか。そして、どのようにして技術を次世代へ伝承していくのか。このように変化する研究環境において、どのようにして物質開発を行えばよいのだろうか。

以上の問題意識を念頭におき、筆者らが取り組んでいるのが、AIとロボットを導入した新たな物質研究スタイルの構築である。このような研究スタイルは、すでに液体を用いるバイオ系、有機合成化学では実践例が増えてきているが²⁾、無機物質では主に固体を対象とするためほとんど進んでいない。そのため、少なくともこの20年間、生産性の向上は微々たるものであったと感じられる。そこで本稿では全固体Li電池の新固体電解質開発に焦点を当て、新物質を薄膜状に作り、高速に物質開発を行う仕組みを紹介する。究極の目標は、「望みの物性を指定した後は研究者が介在せず、すべての判断をロボットが行って物質合成を完了すること」「多くの物質の合成を通じて『新たな物質科学を切り拓く』こと」である。本稿ではさらに、AIとロボットの導入によって新たに創出される意義や価値観を紹介し、その将来構想についても簡単に紹介したい。

2. 新材料設計システムの概要

筆者らはベイズ最適化と呼ばれる手法と自動合成、自動物性評価を組み合わせたシステムを開発している。その概念図を図2に示す。最良の物性値をベイズ最適化によって導出する「AI部」と、全自動搬送・成膜・評価を行う「ロボット部」から構成される。「AI部」から指示された合成条件に従って「ロボット部」が合成・評価を行い、結果を「AI部」に報告する。更新された

AI-Robot-driven Materials Researchの概念

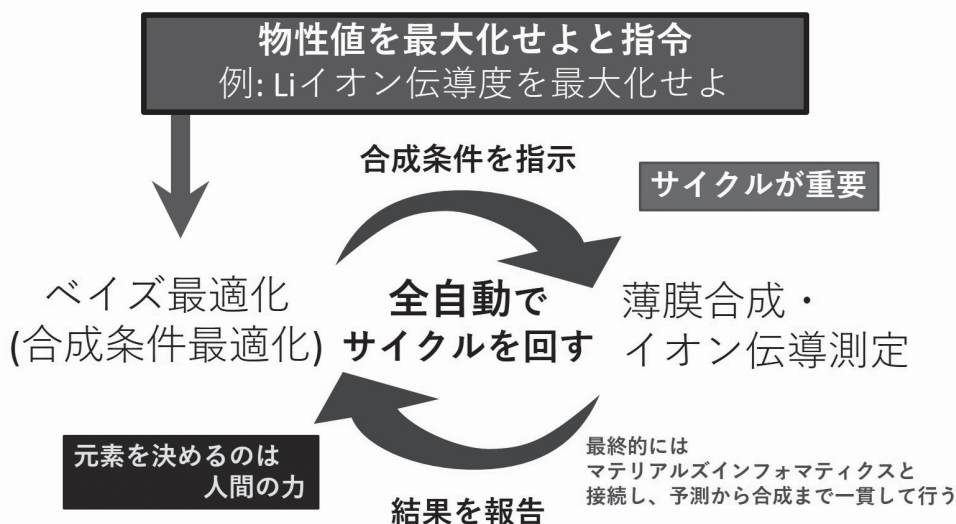


図2 AI-ロボットシステムの概念図

合成条件最適化を行う「人工知能部」と、そこから指示された条件で自動合成・評価を「ロボット部」が全自動で行い、結果を報告するサイクルを全自動で回し、目的の物性値を有する薄膜をいち早く合成することを目指している

データセットから「AI部」が最適条件を再度指示する、というサイクルを回す。

Liイオン固体電解質の例では、「AI部」からの指示どおりに「ロボット部」が固体電解質の成膜とイオン伝導度の評価を行い、結果を「AI部」へ報告する。続いて、「AI部」ではこれらの成膜条件と物性値のセットからベイズ最適化によって予測された次の成膜条件を指示する。この指示された条件に従って「ロボット部」が成膜・評価を行う。この結果を加えて、さらにベイズ最適化を行う、というサイクルを回して学習を続け、収束した時点で条件最適化を完了する。このシステムでは、研究者の介入はサイクルが収束したかどうかの判断程度で十分であり、目的の物性値を有する薄膜をいち早く合成可能となる。

実際に、どれほど効率的に薄膜作製・条件探索が可能になるかについて、「AI」と「ロボット」の両者の観点から概観する。

2.1 AI導入による効果

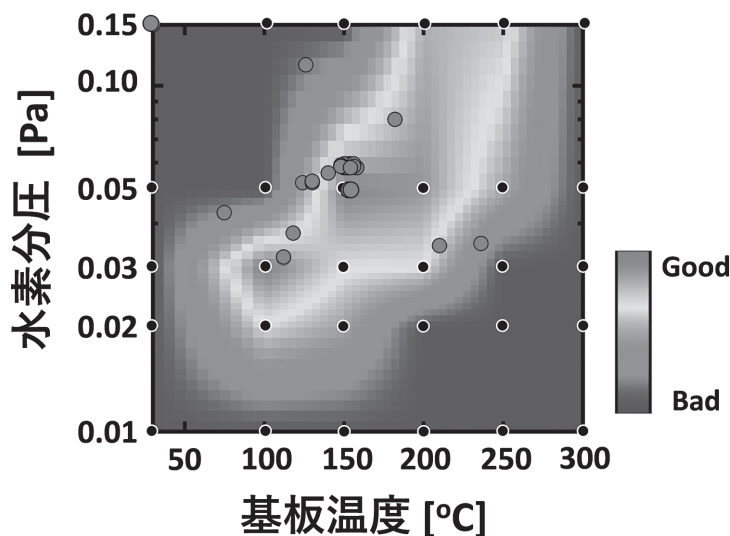
薄膜研究では、試料1つ当たりを作製するコストが大きい割に、成膜時の制御パラメータ（説明変数）が多く、目的の品質や物性（目的変数）が得られる最適条件探索は容易ではない。例えば、5つの成膜パラメータを4つの条件で探索する際には、全状態探索に $4^5=1,024$ 回の試行が必要となる。研究者がこの五次元の探索空間中で最適値を「効率良く、より正しく」探索することは極めて困難である。このような条件探索にベイズ最適化を導入する。ベイズ最適化は任意の n 次元空間の探索に適用可能であり、上記のケースでは5%の誤差を許容すれば15回程度で数学的には最適化が可能である³⁾。

目的変数 (y_i) と説明変数 ($\mathbf{x}_i : x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,n}$) のセットにおいて、一般には $y=f(\mathbf{x})$ なる関数 f の詳細は未知であり、解析的に得ることは困難である。しかしながら、ベイズ最適化では事前に得られた ($y_i, \mathbf{x}_i$) のセットを元に確率的に関数 f を予測して、最大値 $y_{\max}$ や最小値 $y_{\min}$ (それを与える説明変数のセットも含む) を探索することができる。地球統計学の分野で鉱脈・鉱床や石油の発掘の際に用いられる Kriging も同様の手法であり、任意の n 次元空間における探索が可能である。

ベイズ最適化を TiH_2 薄膜成長の条件最適化に適用した例を図 3 に示す。基板温度と水素分圧を成膜パラメータ (説明変数) として、X 線回折で得られたロッキングカーブ半値幅 (目的変数) をカラーマップで示している⁴⁾。橙色領域が高品質な TiH_2 薄膜が得られる条件である。このマップを教師データとして二次元ベイズ最適化を行ったところ、10 回程度で最適と思われる橙色の領域に収束した。カラーマップ自体は計 30 回の実験結果を補間して作製したものであるが、ベイズ最適化を用いることで、より効率的な実験計画が可能となることがわかる。

以上のように、ベイズ最適化の導入により理想的には探索空間を自由に拡張できるため、これまで見逃していたような条件での条件探索も可能となる。従来はせいぜい二-三次元の探索空間であったものを飛躍的に拡大することにより、「計画されたセレンディピティ」を実現することが可能となる。

TiH_2 薄膜の成長相図 (基板温度と水素分圧を成長パラメータとして)



※口絵参照

図 3 TiH_2 薄膜成長条件をベイズ最適化で探索した例

高品質な薄膜が得られる条件を赤色、そうでない領域は青色としてカラーマップ表示している。このカラーマップは、実際に黒丸の条件で 30 回成膜・評価をして作成したものである。ベイズ最適化を用いることにより、10 回程度で十分収束可能である

2.2 ロボット部

薄膜研究においては、試料 1 つ当たりを作製するコスト（時間・価格）が一般に高い。1 日に 2～3 試料の作製が関の山であるが、本装置を用いることで大量データ生成によるビッグデータ化も期待できる。

〔搬送〕

近年、半導体デバイス作製技術が進展し、あらゆる工程が全自動化されつつある。その中で、ウエハなどの搬送用ロボットの性能向上は目覚しく、また需要の増加による低価格化にも後押しされ、大学の研究室レベルでも導入可能となった。この搬送ロボットアームが中央に位置し、衛星状に設置した成膜装置や評価装置にアクセスすることで、任意のチャンバーへの試料の全自動搬送を実現している。

〔成膜〕

成膜には研究開発の場で汎用的に利用されているスパッタ成膜法を用いる。スパッタ成膜とは、高エネルギーの Ar ガスを原料物質にぶつけて原料を飛散させ、基板に物質を堆積させる方法である。具体的な手順としては、高真空チャンバー内に～1 Pa の Ar と雰囲気ガス（ O_2 ・ N_2 ・ H_2 など）を導入し、ターゲットと呼ばれる原料焼結体と基板試料の間でプラズマ放電を発生させる。この際に、両電極間に印加された電圧によって高速に加速された Ar^+ イオンがターゲットに衝突し、原料を飛散させ基板上に堆積される。このスパッタ成膜過程の中で、「基板加熱・雰囲気ガス導入・ガス圧制御・プラズマ放電・シャッター制御」などを、提示した条件に従って自動で行うことがすでに実現されており、本システムでもこのような技術を踏襲している。

〔評価〕

作製した薄膜の電気伝導性評価のために、自動のプローブステージを導入した評価部を併設している。光学反射率による非接触の膜厚測定も可能であり、膜厚当たりの観測量として電気伝導率やイオン伝導率などの評価が可能である。

2.3 実験装置の概要

筆者らが実際に構築中のシステムを図 4 に示す。中央に搬送用ロボットアームが存在し、その六角形の面の延長上に自動成膜や自動評価の装置を衛星状に 6 つ設置することで、試料を各装置間で自由に搬送可能となっている。これらを統括コンピュータにより管理し、さらに AI による条件最適化プロセスを行うことで「成膜・評価・最適化」のサイクルの全自動化を達成する。

運用例として、全固体 Li 電池の固体電解質における Li イオン伝導度の最適化を示す。イオン伝導率測定用にあらかじめ楕形電極を蒸着した基板材料を準備し、成膜装置へ自動搬送する。成膜装置内において、メタルマスクを利用して固体電解質薄膜を自動堆積する。成膜終了後には伝導度評価装置へ自動搬送され、楕形電極のパッドに電極プローバを自動で押し当てて電気化学インピーダンス測定を行う。また、基板内の別の部位において薄膜の膜厚を光学反射率から算出してイオン伝導率を最終的に得る。

上記のように作製した固体電解質薄膜に対して、次にベイズ最適化による Li イオン伝導率の最適化を行う。目的変数 (y_i) を「固体電解質の Li イオン伝導率」と設定し、複数の成膜パラ

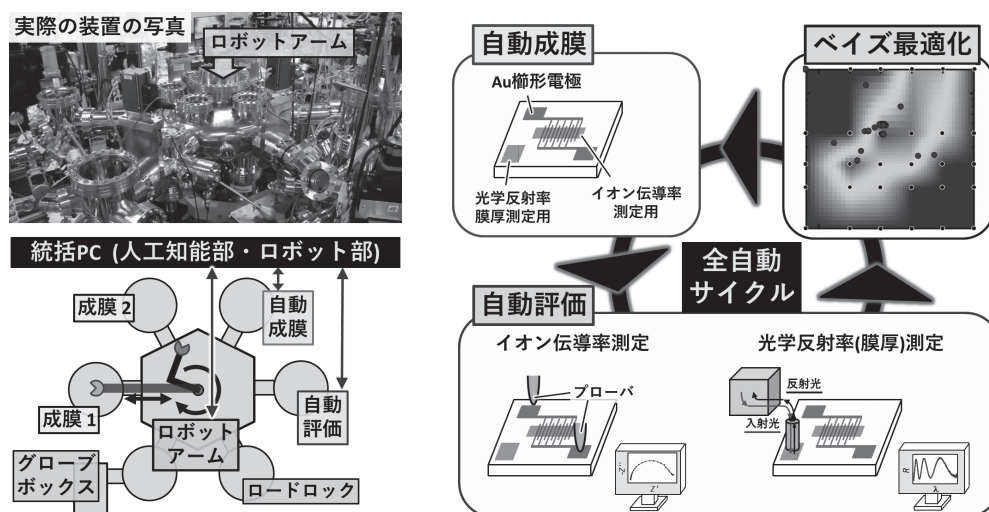


図4 装置の写真と概略図

ベイズ最適化で指示された成膜条件に従い、ロボットが薄膜を搬送・成膜・評価する。これらの成膜・評価・最適化サイクルは上位の統括コンピュータで制御され、研究者が介入する必要がない。研究者はより付加価値が高い仕事に取り組むことができる。

メータ（基板温度・酸素分圧・窒素分圧・成膜レートなど）を説明変数（ $x_i: x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,n}$ ）として $y_{\max}$ を探索する。まず、いくつかの薄膜をランダムな条件で作製してイオン伝導率を評価する。 k 回目の成膜・評価後に、得られた k 個のイオン伝導率と成膜パラメータのセットから、 $(k+1)$ 回目に最適と思われる成膜パラメータをベイズ最適化により導出し、これに従って $(k+1)$ 回目の成膜・評価を行う。次に、その $(k+1)$ 回目の結果も加えた $(k+1)$ 個のデータセットから $(k+2)$ 回目のベイズ最適化と成膜・評価を行う。このサイクルを回して収束した時点で最適化完了とする。このように、研究者の介入はサイクルが収束したかどうかの判断程度で十分であり、目的の物性値を有する薄膜をいち早く合成可能となる。

3. 本システムの運用による薄膜研究における新たな価値観の創出

〔2.〕で紹介したように、本システムの大きな特長の1つは、目的の物性値を有する薄膜をいち早く合成できることにある。しかしながら、本システムの波及効果はそれだけに留まらない。「成膜・評価・最適化」の全自動サイクル化を達成することで、単一の薄膜物性研究を超えた新たな価値観の創出が期待される。

3.1 信頼性の高いデータベース構築

本システムは複数台を並べて拡張することが可能であり、多様な薄膜を同時かつ大量に合成し、輸送・光学・誘電・磁気特性など、さまざまな薄膜物性の自動測定を行うことも可能となる。多様な薄膜材料における「成膜条件（説明変数）と物性値（目的変数）をセット」とした信頼性の高いデータベースを構築できる。

この多様な薄膜の大量かつ迅速な合成による恩恵は2点あると考えている。まず、短期間で多くの物質を合成できることから、それらの物質を俯瞰的に捉えた包括的な議論が可能となる。そのため、従前にはない新たな物質観・化学観の創成につながることが期待される。

次に、マテリアルズインフォマティクスで不足しているビッグデータの提供が可能となる。24時間365日休みなく薄膜合成を続けることで、1つの薄膜合成装置当たり1年で1,000試料の作製・評価を実現し、大量のデータを生成できる。さらに、実験に基づく各種データベースでは、物質の合成条件にばらつきが大きいことがしばしば問題に挙げられ、特に薄膜合成では無視できないことが多い。この点について、同一装置における「成膜条件と物性値」をセットにしたすべての情報をサーバーにアップロードすることで、均質で画一的なビッグデータを提供できることには大きな意義があると考えている。

ここで得られるビッグデータを構築する際に、思いもよらない発見に遭遇する可能性もある。これまでは、1つの物質を作製しても、自らが興味のある物性しか評価されてこなかった例が数多く存在する。実際に、超伝導体発見の歴史はこのような背景を持つ材料（ MgB_2 など）が多い。本システムでは、多数の自動評価装置を組み合わせることにより、同一試料に対して多岐にわたる物性値の評価・比較を行い、物性値を網羅的にデータベース化することを目指している。その中で、一見関連のなさそうな物性値間の相関を見出し、新奇の特長・機能を発見することも可能となる。

3.2 位置的制約からの開放に伴う研究活動の変革

本システムは全自動運用されることから、研究者は必ずしも装置の設置場所にいる必要はない。また、ネットワークを通じて他大学や在宅で物質合成を行うことも可能であるため、学外の研究者と本システムをシェアリングすることも可能である。

位置的制約からの開放は、研究の進め方自体に対する変革をもたらしうる。一般に実験科学者は、実験作業以外にも会議・学会参加・研究打合せ・文献調査・論文執筆などの多くの業務もこなしており、極めて多忙である。その中で、「実験作業」は原則的に装置の設置場所で行う必要がある。その位置的制約のために、その他の思考活動に基づく業務の効率が著しく低減される。しかしながら、本システムではそのような位置的制約から開放されるため、学会への参加や論文執筆などの付加価値の高い思考活動に従事することが可能となり、研究スタイルを抜本的に変革することができる（図5）。

4. おわりに―「家内制手工業」から「データ生産工場」への変革―

従前の薄膜研究スタイルは、各研究室内における秘伝のレシピ（時には門外不出）を磨きながら目的の薄膜を丁寧に合成し、高品質化による物性探索を行ってきた。このようなスタイルは、いわば「家内制手工業」であったといっても差し支えないであろう。しかしながら、筆者らが紹介した本システムは、①複数台を並べた成膜・評価、②遠隔操作によるシェアリングなどによって、大量の成膜条件・物性値のデータ取得が可能となる。すなわち、これからは「データ生

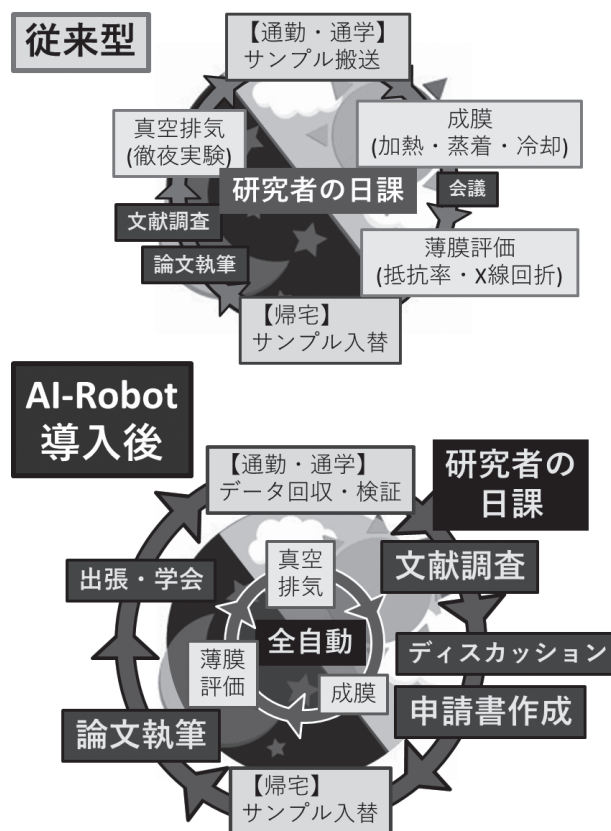


図5 筆者らが目指す研究スタイルの変革

これまで日課であったルーチン作業を自動化することで、より創造的な活動へとシフトし、新たな付加価値の創出を目指す

産工場」時代に突入することを意味している。社会全体が高度な情報化に進行する中で、薄膜物質研究においても大きな変革期を迎えるであろう。

最後に、AIとロボットの融合による研究者側の変化についても触れたい。先にも取り上げたとおり、研究者は多様な業務に追われる日々の中で、繰り返し作業から開放されることで「より高いレベルの思考活動への時間を割くこと」が可能となる。この流れは研究者だけに留まらず、今後は学生も同様になるであろう。教育の段階から高いレベルでの思考活動を継続することで、さらなる人材育成の一翼を担うことができるのでは、と考えている。

謝 辞

本研究は、多くの方々の協力の下で行われました。安藤康伸博士(産総研)、鈴木大慈准教授(東大)、小林成氏、笹原悠輝氏に深く感謝いたします。また、JST-CREST「界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製(JPMJCR1523)」, JST-さがけ「自律的ものづくりを導入した金属水素化合物の革新的新機能創出(JPMJPR17N6)」, 科研費(18H03876, 26246022, 18H05514, 16K14088, 26106502, 17H05216)の支援により行われました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

文 献

- 1) Kato et al.: *Nat. Energy*, **1**, 16030 (2016).
- 2) 一例だが, M. Peplow: *Nature*, **512**, 20 (2014), R. D. King et al.: *Science*, **324**, 85 (2009), J. M. Granda et al.: *Nature*, **559**, 377 (2018), 夏目徹編: あなたのラボに AI (人工知能) # ロボットがやってくる, 羊土社 (2017). また, 最新の動向として, プリティッシュコロンビア大 (<https://science.ubc.ca/news/ubc-robo-chemist-could-speed-discovery-clean-energy-materials>) などにも知られている
- 3) Kawaguchi et al.: *In Advances in Neural Information Processing Systems*, 2809 (2015).
- 4) R. Shimizu et al.: *APL Mater*, **5**, 086102 (2017).

人と共生するAI革命

活用事例からみる生活・産業・社会の未来展望

発行日 2019年6月10日 初版第一刷発行

監修者 栗原 聡

発行者 吉田 隆

発行所 株式会社 エヌ・ティー・エス
〒102-0091 東京都千代田区北の丸公園 2-1 科学技術館2階
TEL.03-5224-5430 <http://www.nts-book.co.jp>

印刷・製本 美研プリンティング株式会社

©2019 栗原聡ほか.

ISBN978-4-86043-608-7

落丁・乱丁本はお取り替えいたします。無断複写・転写を禁じます。

定価はケースに表示しております。

本書の内容に関し追加・訂正情報が生じた場合は、(株)エヌ・ティー・エスホームページにて掲載いたします。

※ホームページを閲覧する環境のない方は、当社営業部(03-5224-5430)へお問い合わせください。