



「本格研究の概要説明と各グループの紹介」

長藤圭介 東京大学
研究代表者





「共通基盤」領域



「材料」テーマ



「Materials Foundryのための材料開発システム構築とデータライブラリ作成」



「マテリアルズロボティクスによる新材料開発」



「数理科学を活用したマルチスケール・マルチモーダル構造解析システム」



「粉体成膜プロセス研究のハイスループット化のためのデータ駆動型プロセス・インフォマティクス」

今ココ

JST 探索研究
(3年程度、3.5千万円上限)

本格研究
(最長5年、5.7億円上限)

バックキャストによる
テーマ設定

重点公募テーマ①

重点公募テーマ②

スモールスタート

ステージゲート

POC

未来社会

※研究開発費:直接経費のみ



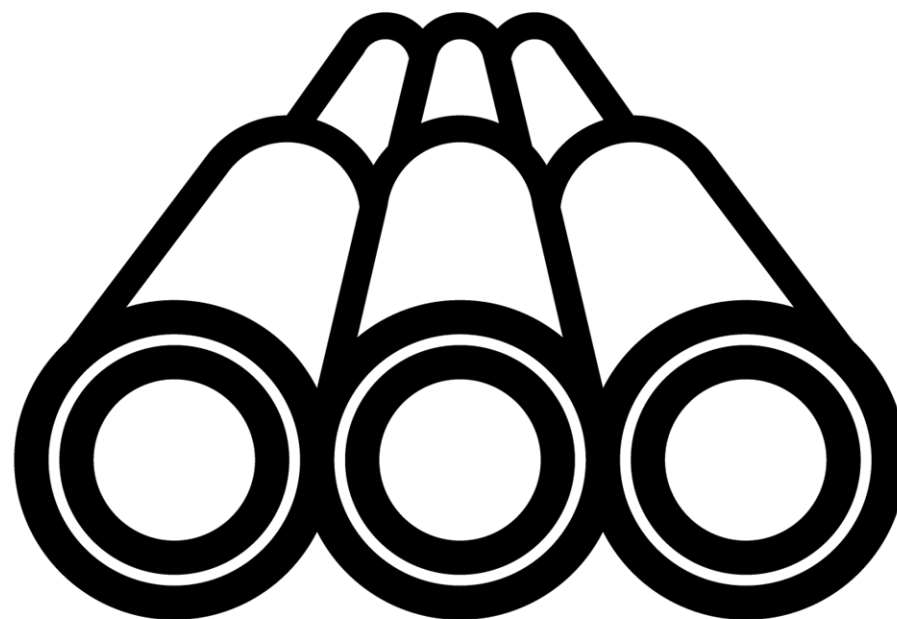
Materials Exploration space Extension Platform

「マテリアル探索空間を拡張するプラットフォーム」



Materials Exploration space
Extension Platform

JST-MIRAI-MEEP 本格研究キックオフ公開シンポジウム
「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」



MEEP

Materials Exploration space Extension Platform



「マテリアル探索空間を拡張するプラットフォーム」

「マテリアル大航海時代」の船出を手助けするツールを提供



1. 背景

- 1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題
- 1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

2. 要因と対策

- 2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策
- 2-2 ①ヒトの営みを超える～ハイスループット自律探索システム～
- 2-3 ②ヒトの知の限定解除～データ駆動ハイブリッド型研究～
- 2-4 ③ヒトの知を結集する～ナレッジシェアリング～

3. 研究内容

- 3-1 研究体制
- 3-2 研究計画

4. まとめ



1. 背景

1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

2. 要因と対策

2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策

2-2 ①ヒトの営みを超える～ハイスループット自律探索システム～

2-3 ②ヒトの知の限定解除～データ駆動ハイブリッド型研究～

2-4 ③ヒトの知を結集する～ナレッジシェアリング～

3. 研究内容

3-1 研究体制

3-2 研究計画

4. まとめ

1. 背景

1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題

世界
共通
課題



<https://meti-journal.jp/p/13066-2/>

カーボンニュートラル目標2050



<https://www.keidanrensds.com/home-jp>

SDGs

対応
例



適用
材料

電子材料

**イオン
伝導材料**

磁性材料

稀少元素
代替材料

構造材料

循環材料

有機材料

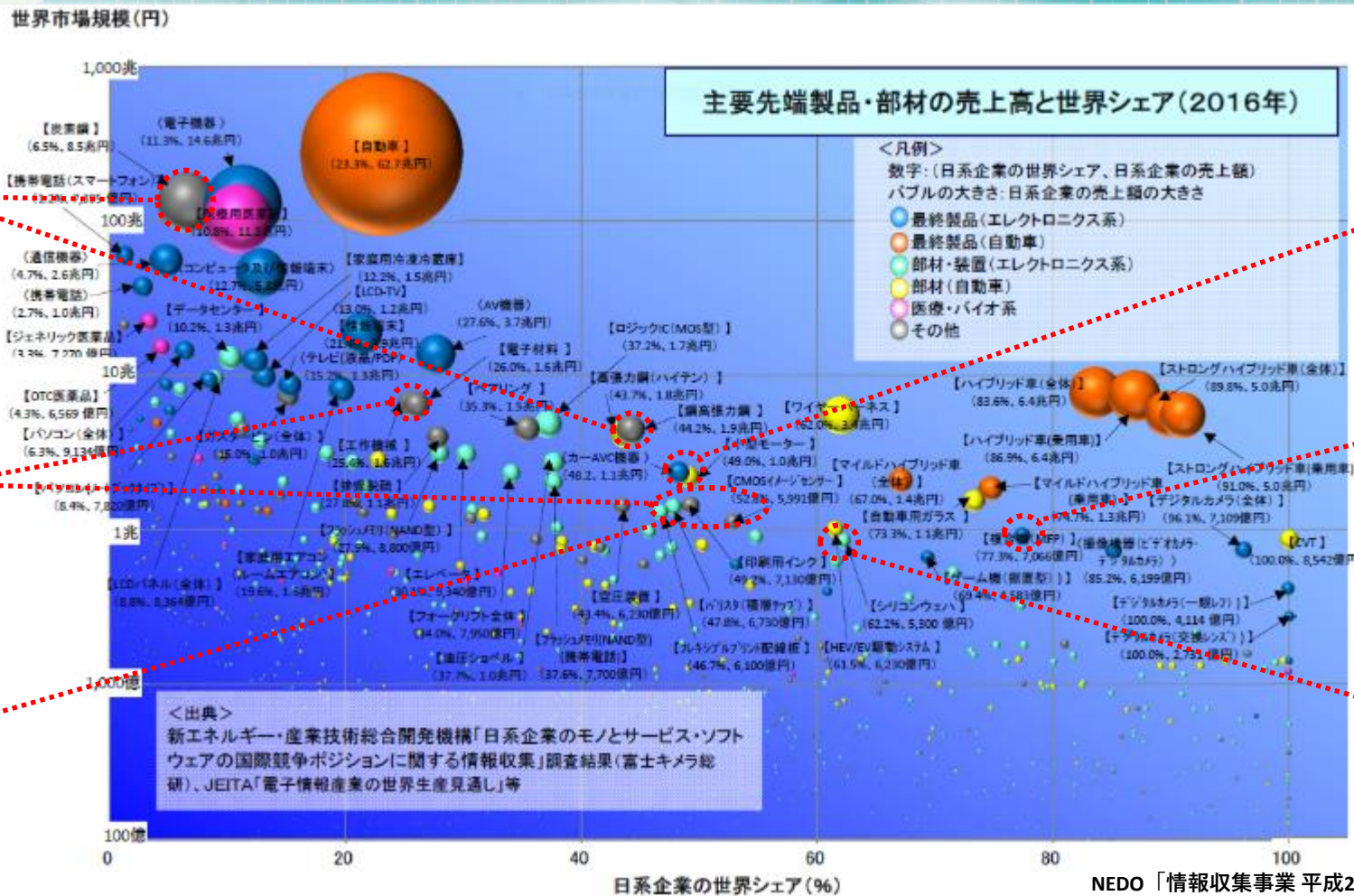
誘電体材料

マテリアル研究開発は、**地球・全世界の未来社会の要**



1. 背景

1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題



構造材料

電子材料

誘電体材料

磁性材料

有機材料

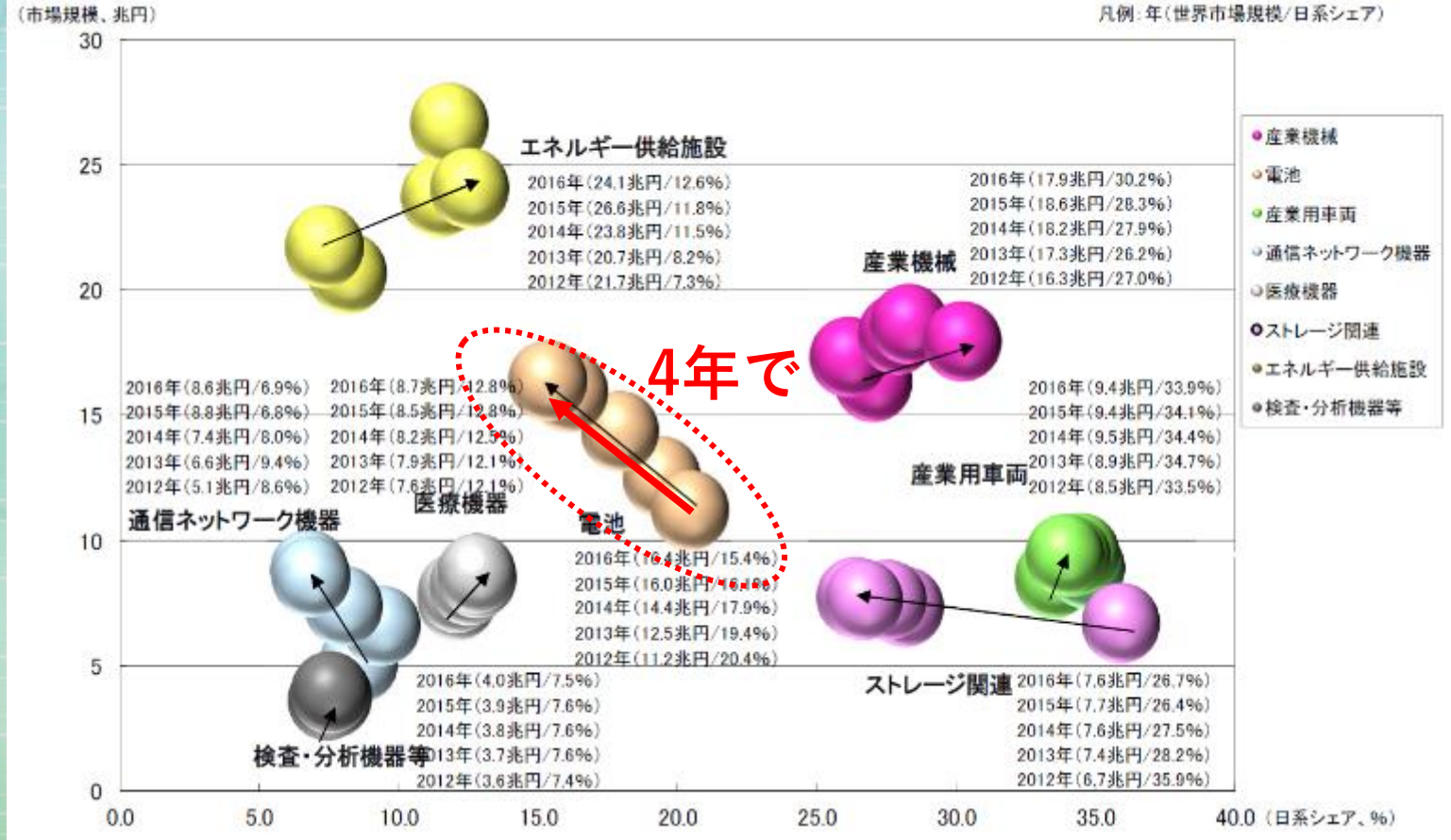
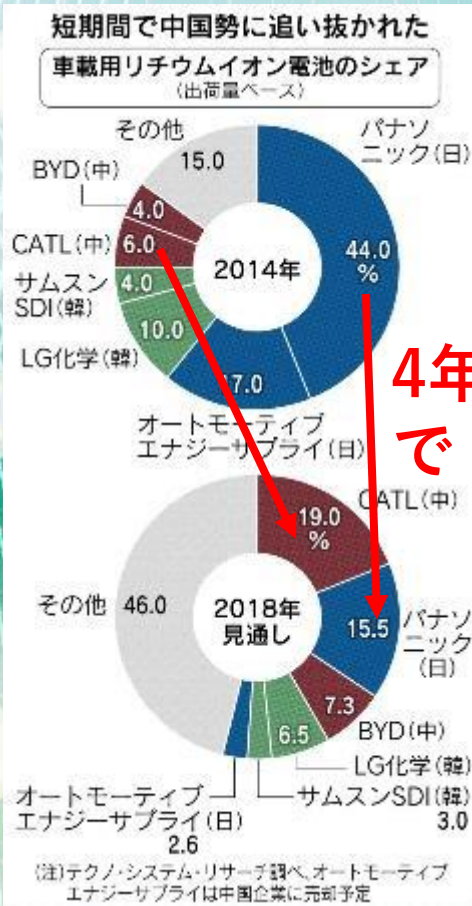
イオン伝導材料

マテリアル産業・それを基盤にした製品(例: イオン伝導材料・自動車)は世界シェアの高い位置にあり、**基幹産業**を担う→この状態を維持するべき



1. 背景

1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題



NEDO「情報収集事業 平成29年度 日系企業のモノとサービス・ソフトウェアの国際競争ポジションに関する情報収集」、(2018年3月)

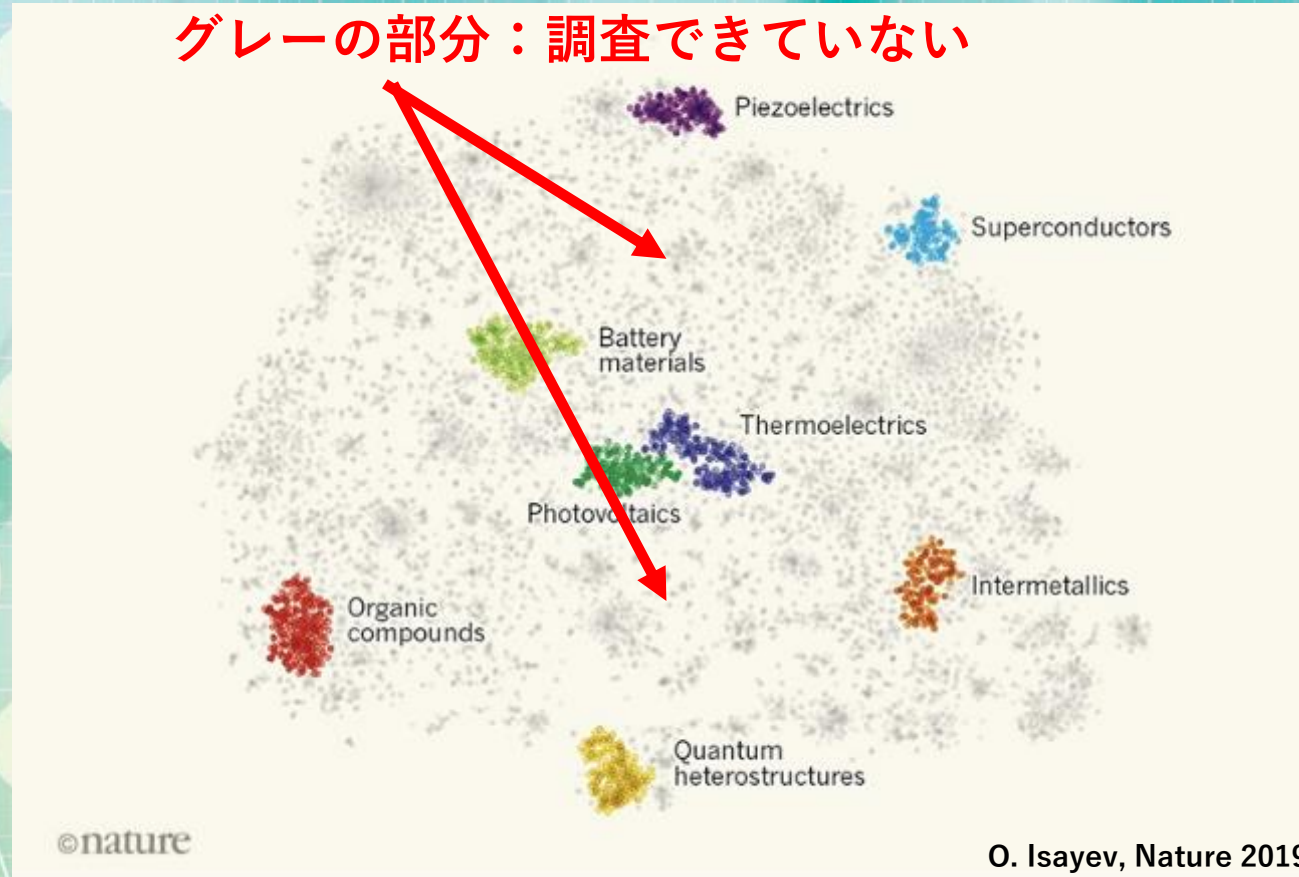
海外勢が伸びる前に、優位なシェアを維持可能な
次の開発が必要だが、まだ成果が出ていない

競争が激化している中で、
どう成果を出すか



1. 背景

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題



「マテリアルマップ」上で調べられている材料はごく一部（全組合せ： 10^{60} ）
いかに**高速で**（ハイスループットに）**新材料を探索**するか が競争力の鍵

1. 背景

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

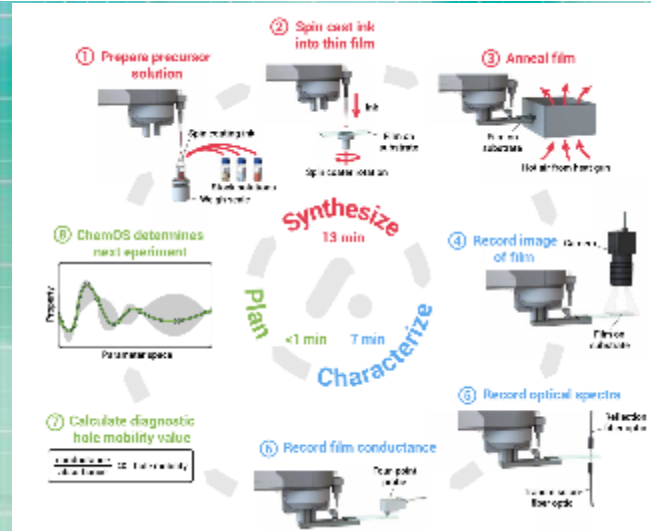
Article
A mobile robotic chemist



University of Liverpool
Nature 2020

- ・触媒材料
- ・6倍以上の活性を発見

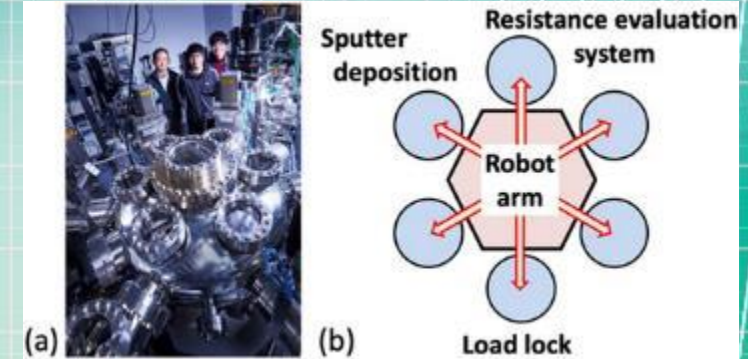
MATERIALS SCIENCE
Self-driving laboratory for accelerated discovery
of thin-film materials



University of British Columbia
Sci. Adv. 2020

- ・有機材料
- ・9ヶ月を5日に短縮

Autonomous materials synthesis by machine learning
and robotics



Tokyo Tech.
APL Mater. 2020

- ・無機材料
- ・スループット10倍

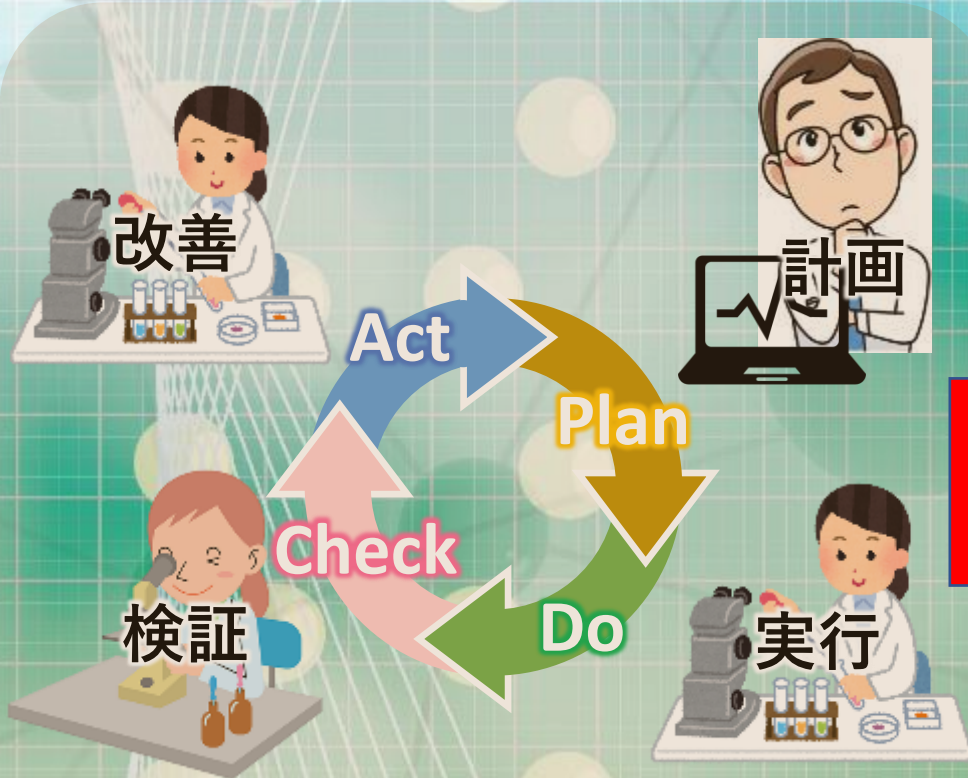
一杉
探索研究成果

自律探索手法の活用が、世界的に急激に進みつつあるが、
日本での事例は少ない



1. 背景

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題



ヒトに依存した仮説駆動型研究

このままでは

① 試行錯誤
回数の限界



② 先入観の中での
非効率的考察



③ 各研究機関での
同じ過ち



その後

世界に
スピードで
取り残され、
日本の
マテリアル
産業は
なくなる！

マテリアル研究開発はヒトの勘・コツ・経験を重んじる日本のお家芸
この仮説駆動型研究の延長だけでは限界が来る



1. 背景

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

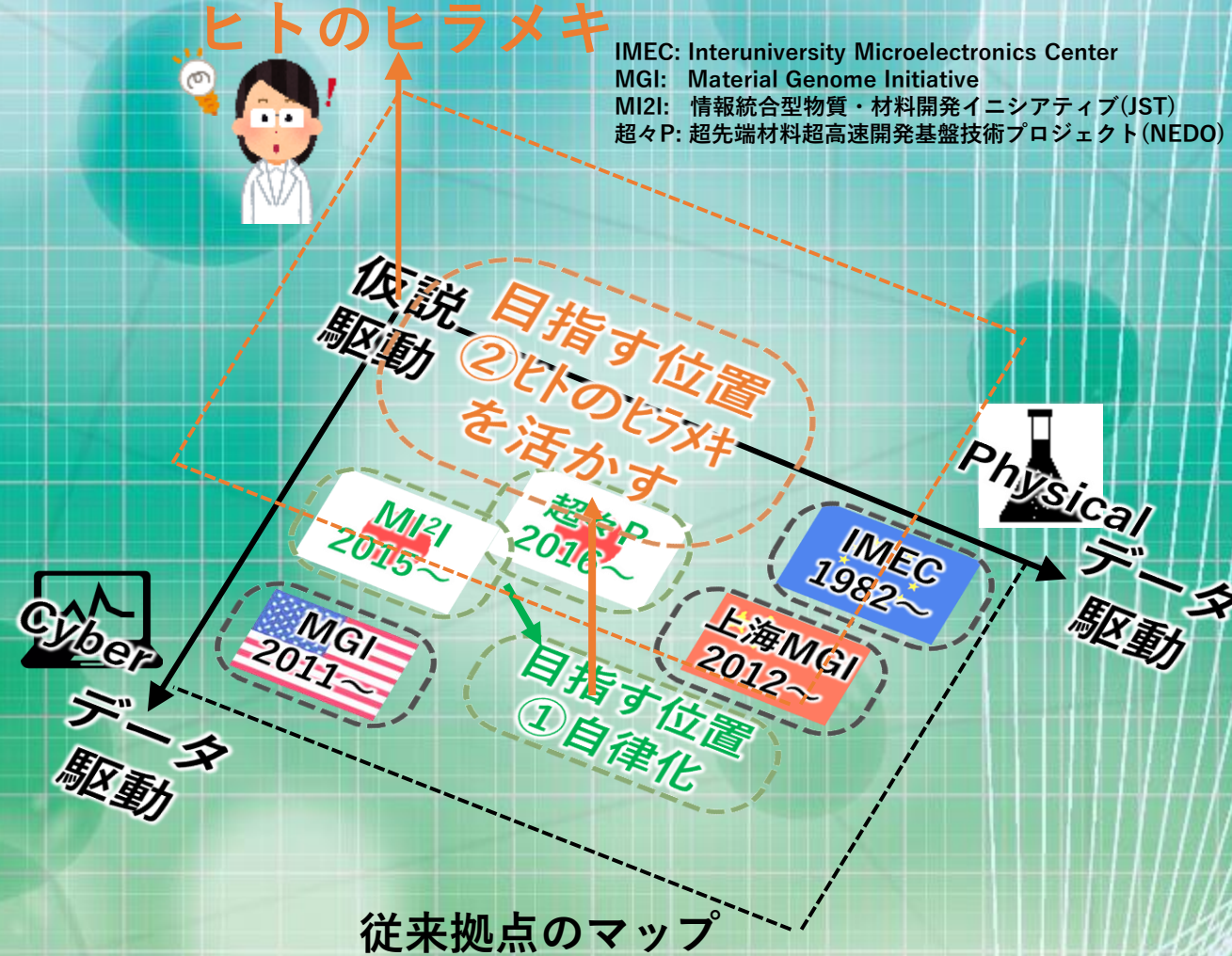
各国の研究開発の文化の表

	欧州	米国	中国	日本
データ駆動	◎ この効率は見習うべき	◎	○ この掛け算は脅威	× → ◎ 推進の余地
絨毯爆撃	×	×	◎	×
勘コツ経験	△	△	×	◎ → ◎ 尊重しすぎ ◎ ノウハウは蓄積
自前主義	小	小	なし	大 → ◎ 非効率的 ◎ ノウハウは蓄積

ヒトのヒラメキ



IMEC: Interuniversity Microelectronics Center
MGI: Material Genome Initiative
MI2I: 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(JST)
超々P: 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(NEDO)

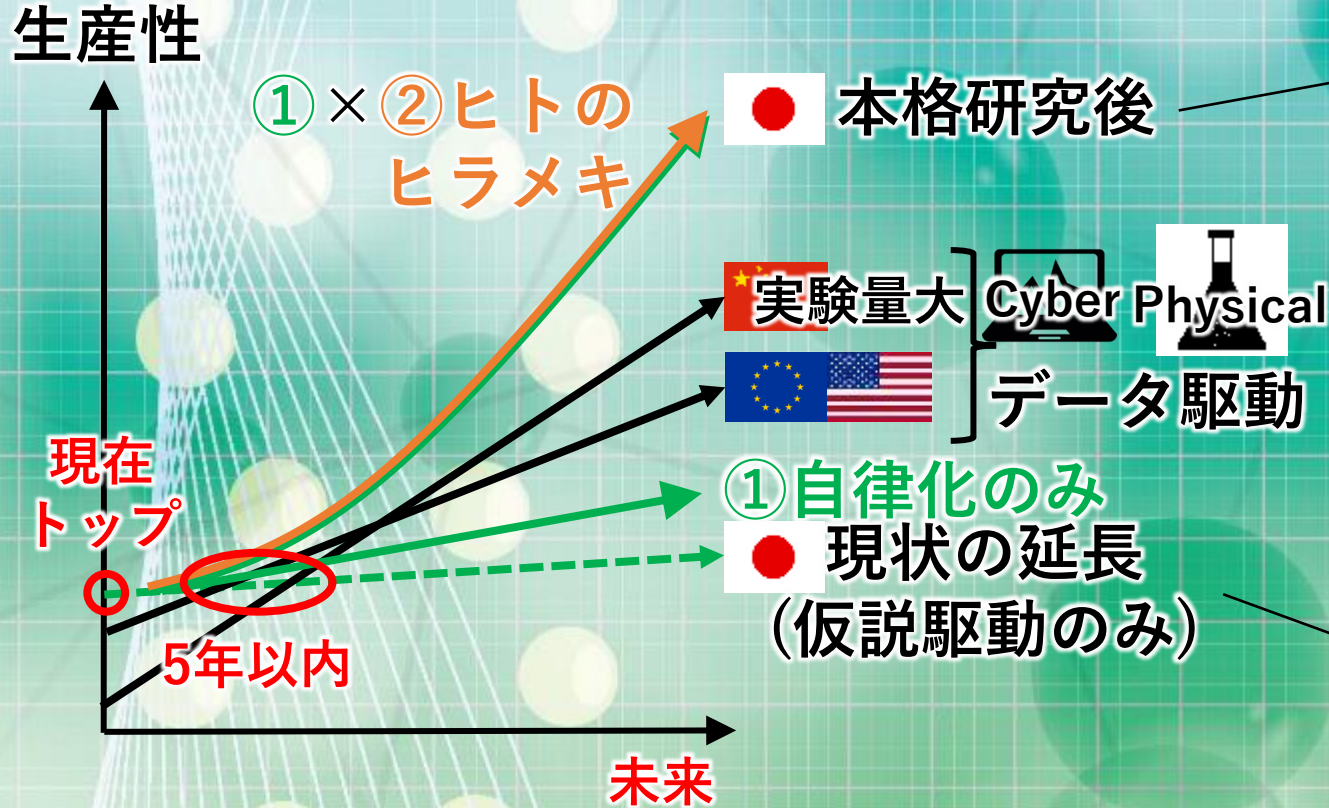


各国独自の性格・アプローチで取り組む中、
ヒトを重んじる日本に合った新たな共通基盤が必要

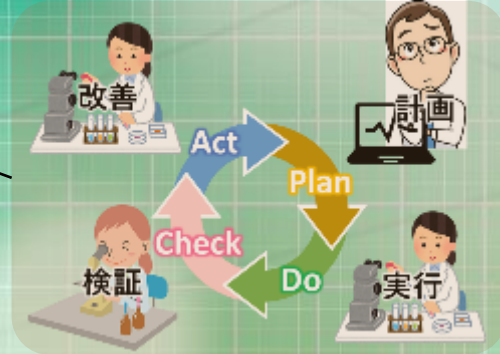
- ①自律化
- ②ヒトのヒラメキ

1. 背景

1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題



日本の優秀な材料探索研究者たち
菅野了次 氏：全固体電池研究の第一人者
細野秀雄 氏：機能性無機物質探索の第一人者
...



ヒト依存の
実験・測定・解析
がボトルネック

データ駆動のツールを手に入れ：①自律化技術
優秀な研究者が使いこなす：②ヒトのヒラメキ

=パラダイムシフト



1. 背景

- 1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題
- 1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

2. 要因と対策

- 2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策
- 2-2 ①ヒトの営みを超える～ハイスループット自律探索システム～
- 2-3 ②ヒトの知の限定解除～データ駆動ハイブリッド型研究～
- 2-4 ③ヒトの知を結集する～ナレッジシェアリング～

3. 研究内容

- 3-1 研究体制
- 3-2 研究計画

4. まとめ

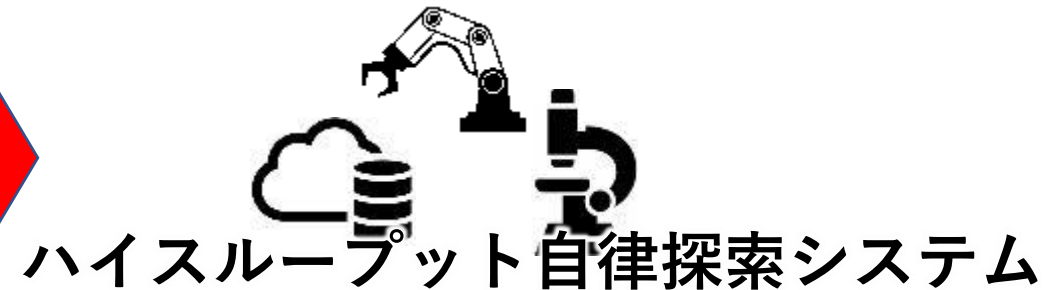
2. 要因と対策

2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策

① 試行錯誤
回数の限界



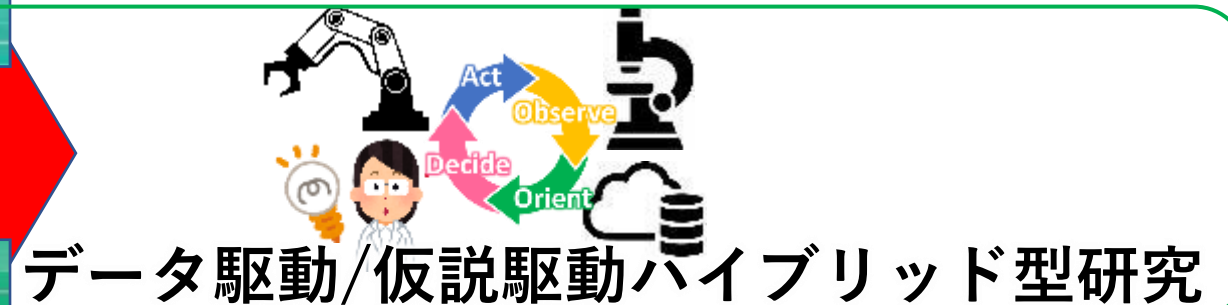
ヒトの営み
を超える



② 先入観の中での
非効率的考察



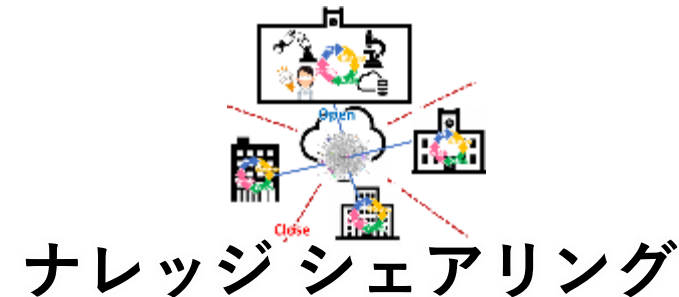
ヒトの知の
限定解除



③ 各研究機関での
同じ過ち



ヒトの知を
結集する

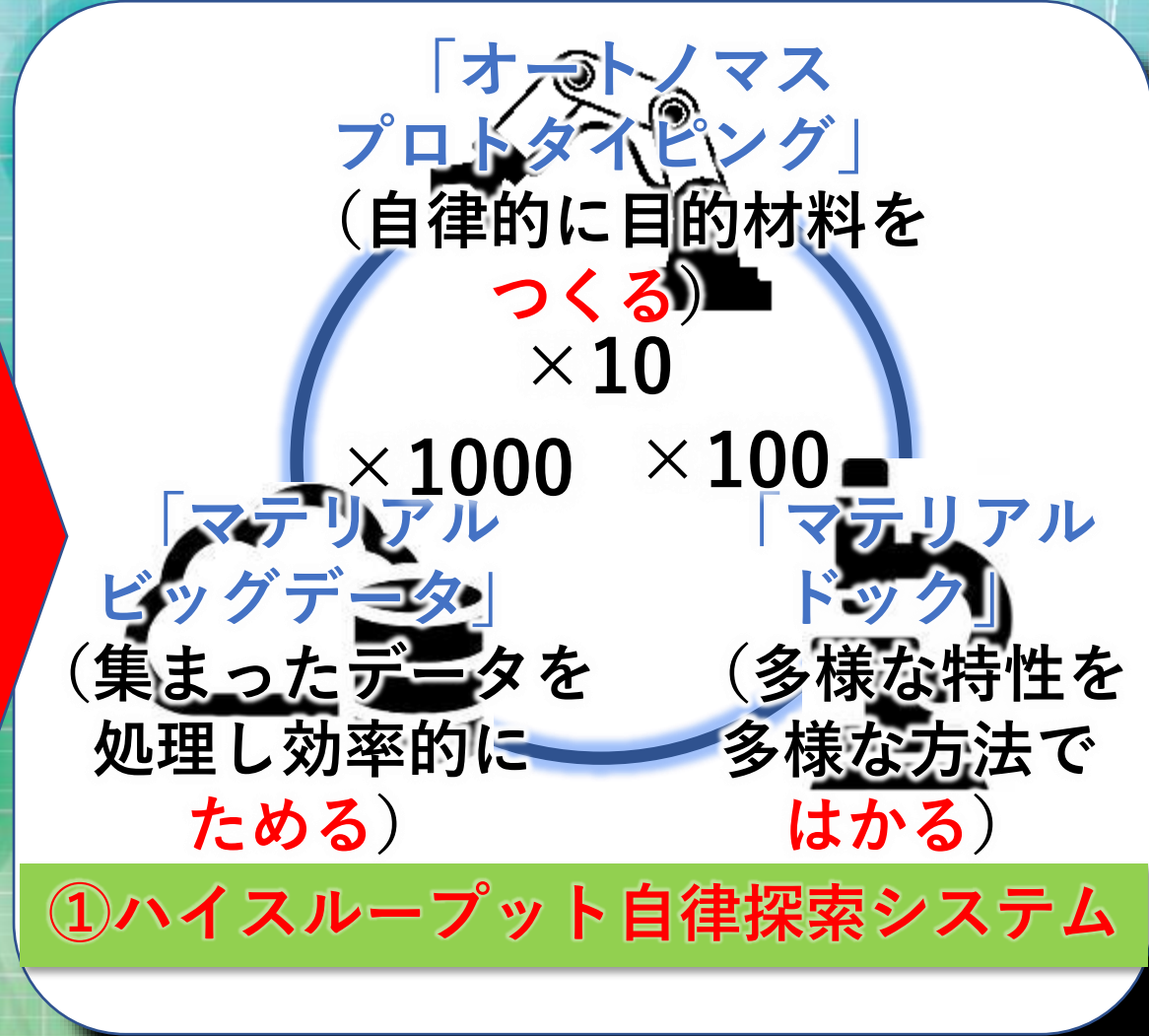


3つの対策を立案：本格研究の柱とする



2. 要因と対策

2-2①ヒトの営みを超える～自律探索システム～

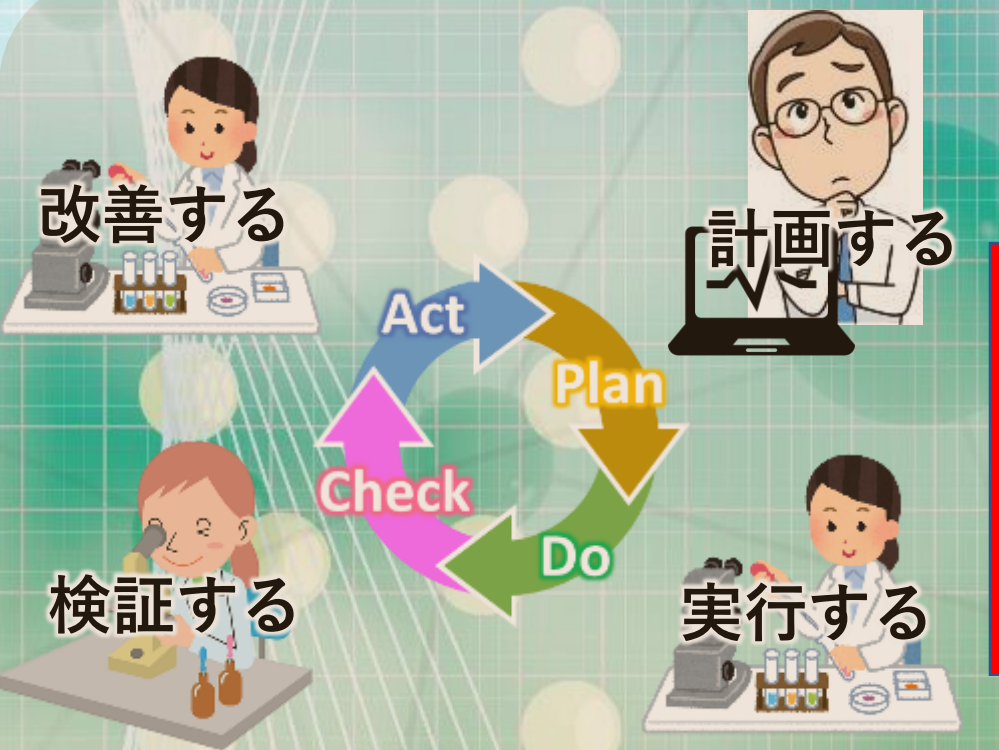


①「自律化」の要素技術



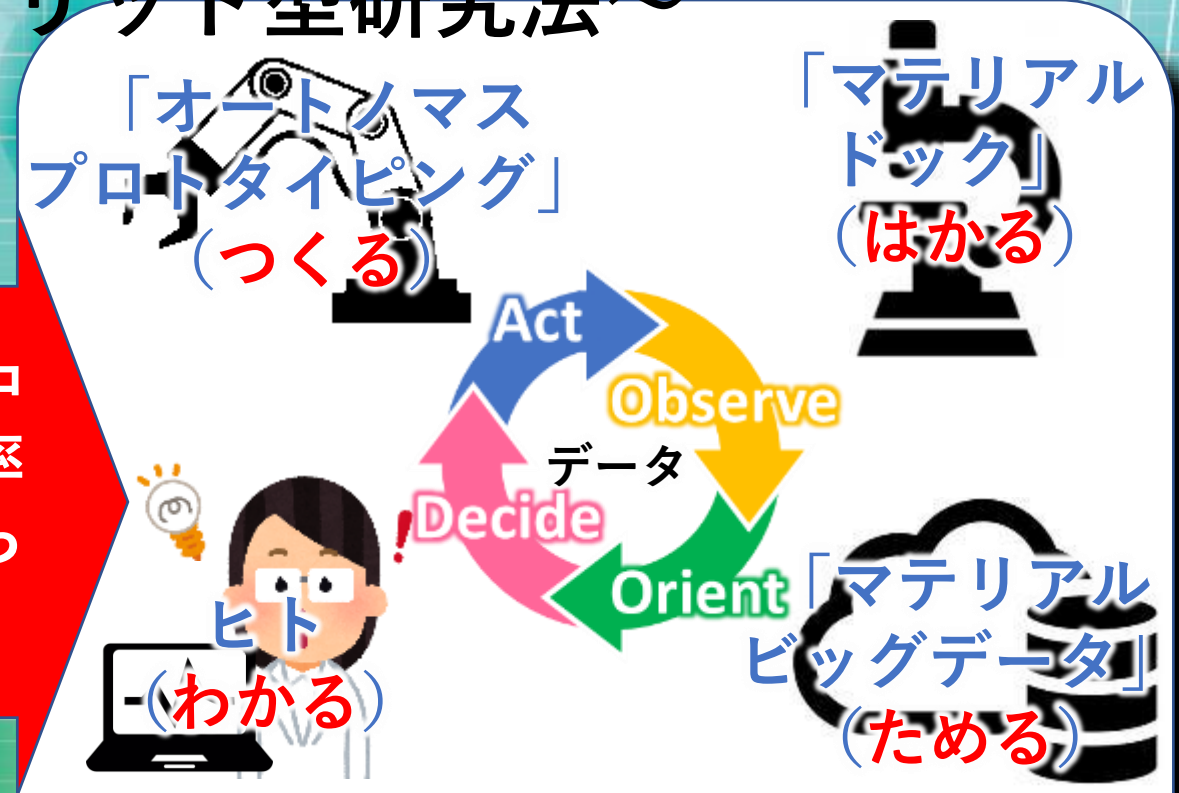
2. 要因と対策

2-3 ②ヒトの知の限定解除
～データ駆動ハイブリッド型研究法～



仮説駆動型研究
(少ない情報からのPDCAサイクル)

先入観の中での非効率的考察からの脱却

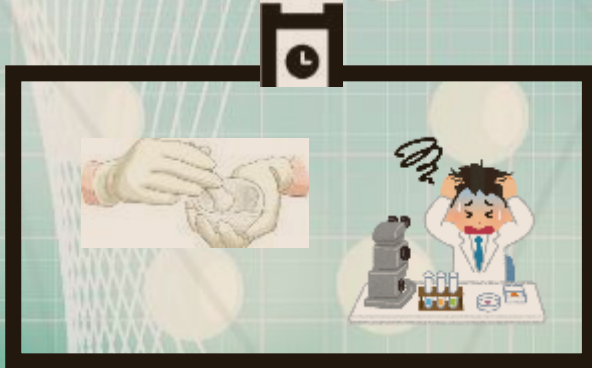


②データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究
(自律システムの内挿力×ヒトの外挿力 OODAループ)

②「ヒトのヒラメキ」誘発・活用

2. 要因と対策

2-4 ③ ヒトの知を結集する ～ナレッジシェアリング～



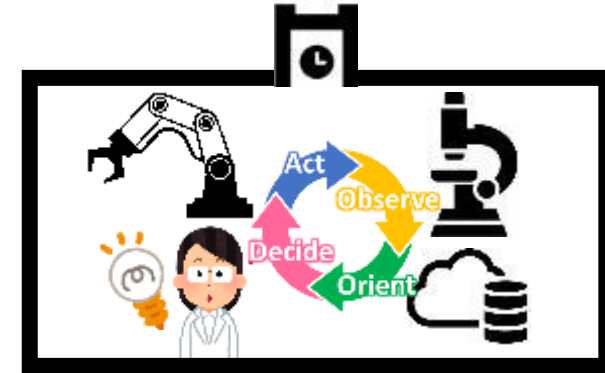
Close



各研究機関
で同じ過ち
を繰り返さ
ない



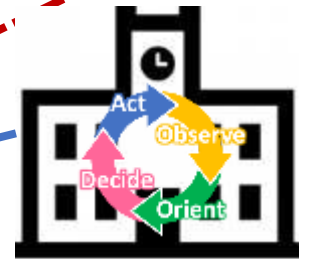
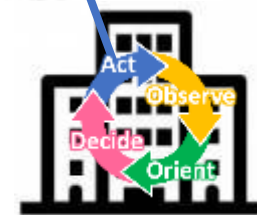
自前主義の研究開発



Open



Close



③ ナレッジシェアリング
(「知識」化されたデータのシェア)

③ ①「自律化」 ②「ヒトのヒラメキ」の先のチャレンジ

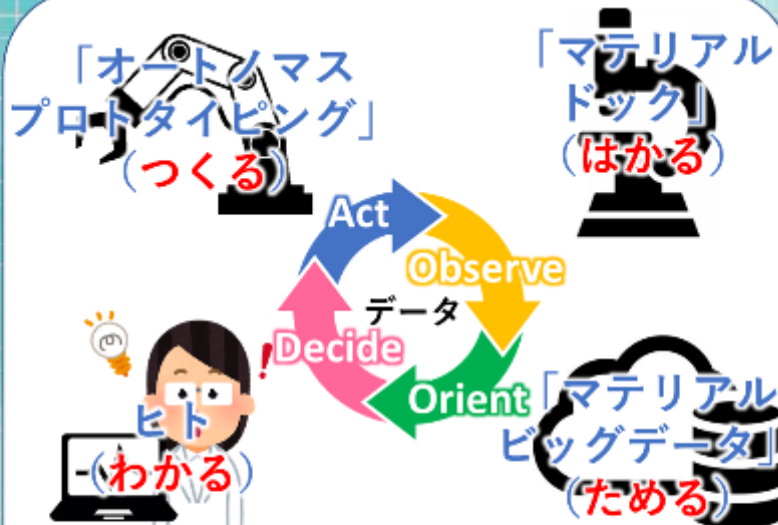


2. 要因と対策

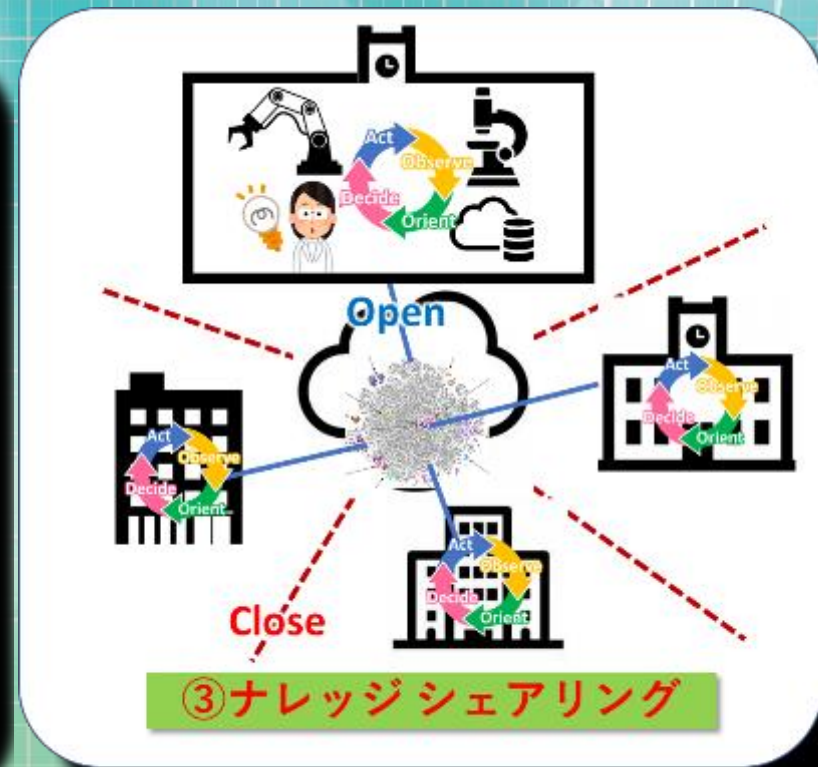
2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策



①ハイスループット
自律探索システム



②データ駆動/仮説駆動
ハイブリッド型研究



③ナレッジシェアリング

3つの対策を立案：本格研究の柱とする



1. 背景

- 1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題
- 1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

2. 要因と対策

- 2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策
- 2-2 ①ヒトの営みを超える～ハイスループット自律探索システム～
- 2-3 ②ヒトの知の限定解除～データ駆動ハイブリッド型研究～
- 2-4 ③ヒトの知を結集する～ナレッジシェアリング～

3. 研究内容

- 3-1 研究体制
- 3-2 研究計画

4. まとめ



3. 研究内容

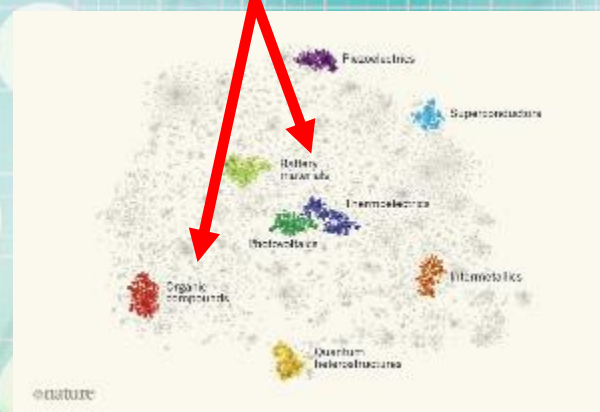
3-1 研究体制



3. 研究内容

3-2 研究内容

グレーの部分：調査できていない



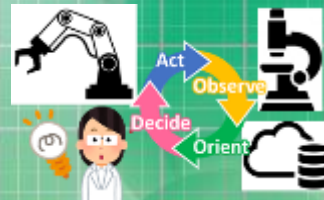
O. Isayev, Nature 2019

情報が少ない部分：調査できていない



a colored version of the map of the once known world from Martin Waldseemüller, 1507

世界は「マテリアル大航海時代」 (※本研究チームが命名)



①ハイスループット自律探索システム = 高速船








②データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究 = 羅針盤

③ナレッジシェアリング = 航海法

3つの対策で材料探索スループット向上をPOCとする

3. 研究内容

3-2 研究内容

項目		2021	2022	2023	2024	2025
①ハイスループット 自律探索システム	高速船 	オートマスタボ (AL) 設計・構築				
②データ駆動 ハイブリッド研究	羅針盤 	データ駆動 電池材料予測				
③ナレッジ シェアリング	航海法 	データクレンジング 法開発				
		データシェアリング 設計・構築				

ヒト参加型
システム実証

電池材料探索実証
 ・全固体電池材料
 ・スループット1,000倍

他機関AL運用

Step1: 電池材料開発の
①②ハイスループット化
要素技術開発

Step2:
③ナレッジ シェアリング
デモ

Step3: 電池材料開発の
ハイスループット化
KPI: 1,000倍



3. 研究内容

3-2 研究内容

本格研究後の未来社会

2050

科学の深さ

学理構築

因果解明

相関解明

データ収集

2020
現在

2025

2030

2035

2040

ヒト
依存

スルー
プット
1,000倍
: POC

DX
研究法
浸透

パラダイム
シフト
完了

豊かな
研究開発
現場



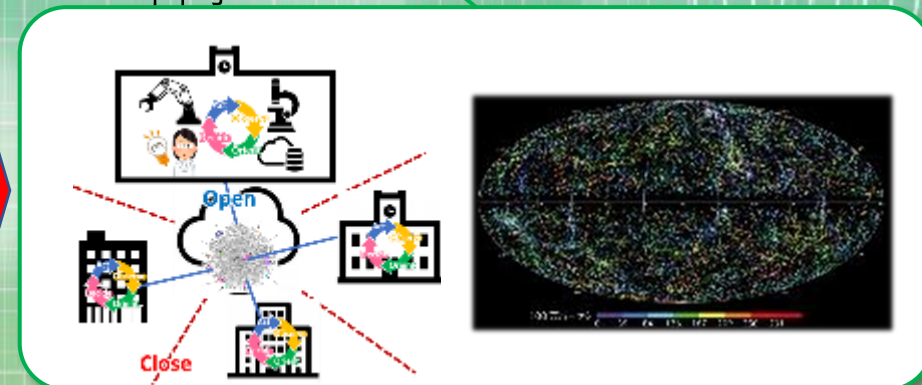
電池
材料

材料
全般

工学
全般

自然
科学

分野



1. 背景

- 1-1 マテリアル研究開発をとりまく社会課題
- 1-2 国内外のマテリアル研究開発の状況と日本の問題

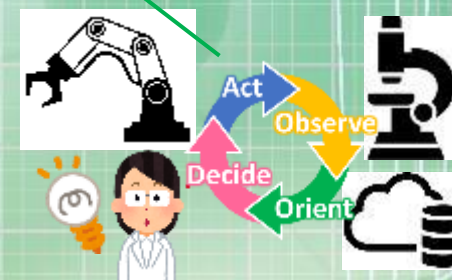
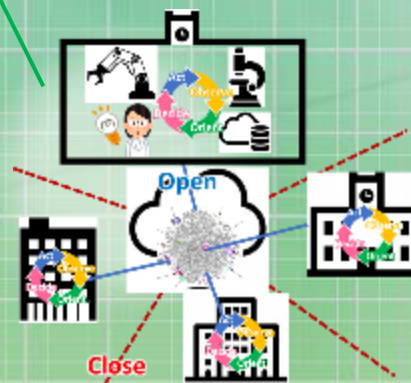
2. 要因と対策

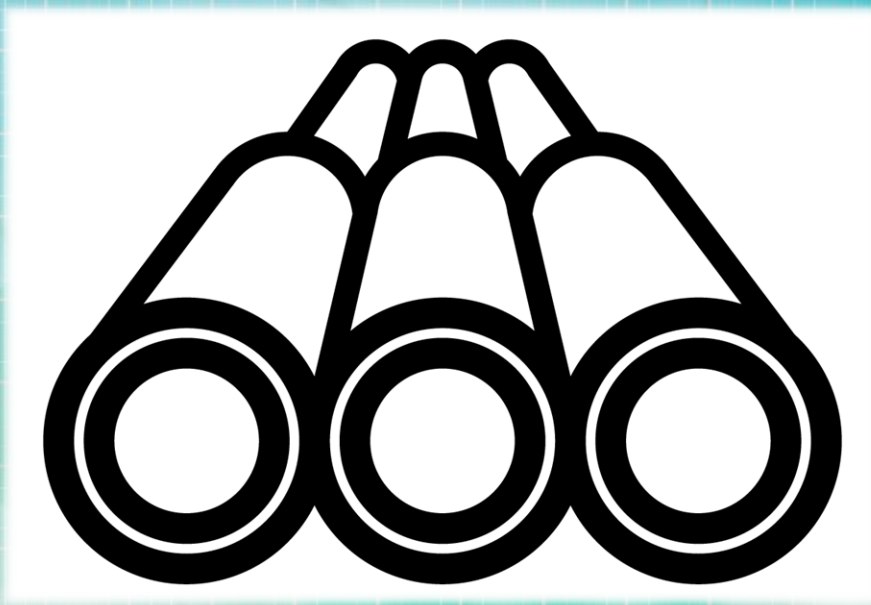
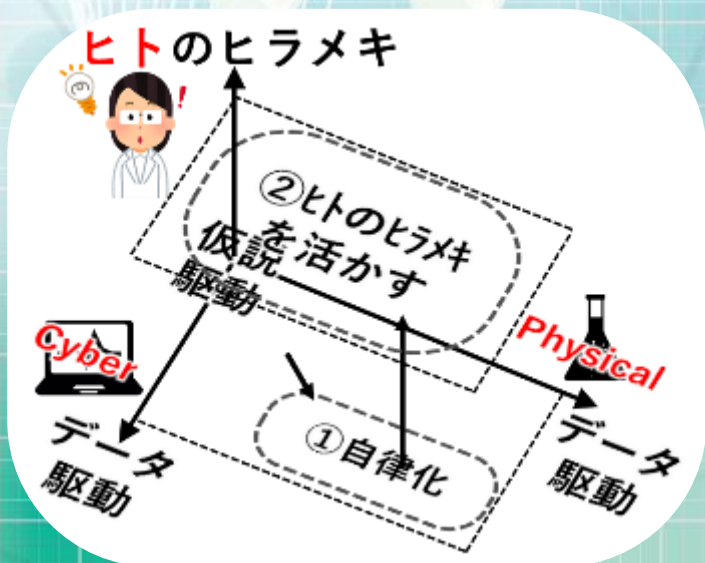
- 2-1 マテリアル探索空間を調査するための対策
- 2-2 ①ヒトの営みを超える～ハイスループット自律探索システム～
- 2-3 ②ヒトの知の限定解除～データ駆動ハイブリッド型研究～
- 2-4 ③ヒトの知を結集する～ナレッジシェアリング～

3. 研究内容

- 3-1 研究体制
- 3-2 研究計画

4. まとめ





自律実験

データ科学 自律計測

自律探索

ハイブリッド研究

ナレッジシェアリング

Cyber × Physical × ヒト

自律実験 × 自律計測 × データ科学

自律探索 × ハイブリッド研究 × ナレッジシェアリング

マテリアル大航海時代にMEEP(ミープ)で船出しましょう