



マテリアル探索空間拡張プラットフォーム



2023.12.12(火) 15:15-15:40

長藤圭介（ながとうけいすけ）

東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻



一杉 太郎（東工大）



知京 豊裕（NIMS）



小野 寛太（大阪大）



牛久 祥孝（松山SX）



何の数でしょう？

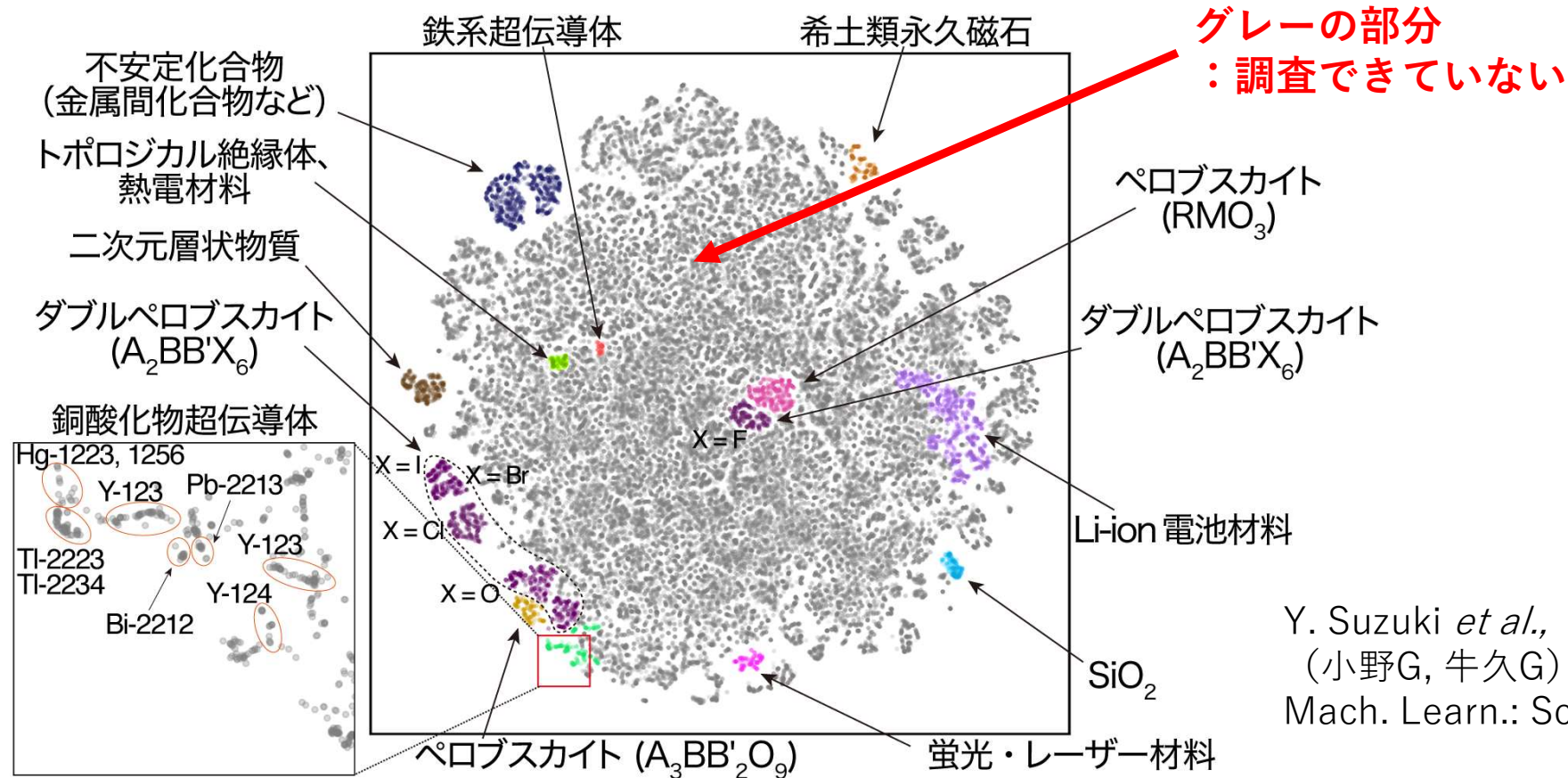
10^{24}

10^{60}

By P. Kirkpatrick & C. Ellis,
“Chemical space”, nature 2004



無機材料の「マテリアルマップ」



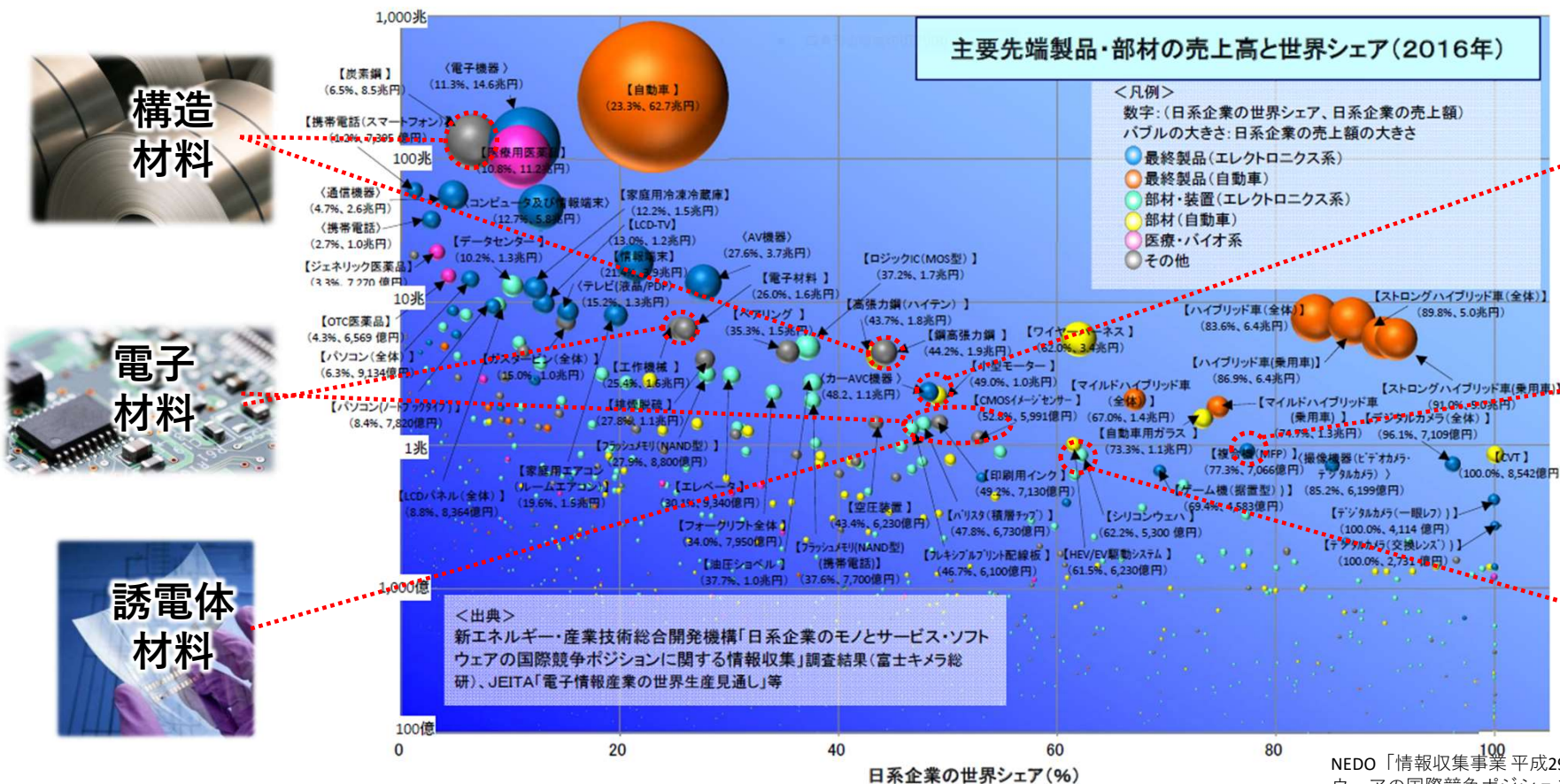
Y. Suzuki *et al.*,
(小野G, 牛久G)
Mach. Learn.: Sci. Tech.

未開拓の領域は膨大



日本の産業のマテリアルの位置づけ

世界市場規模(円)



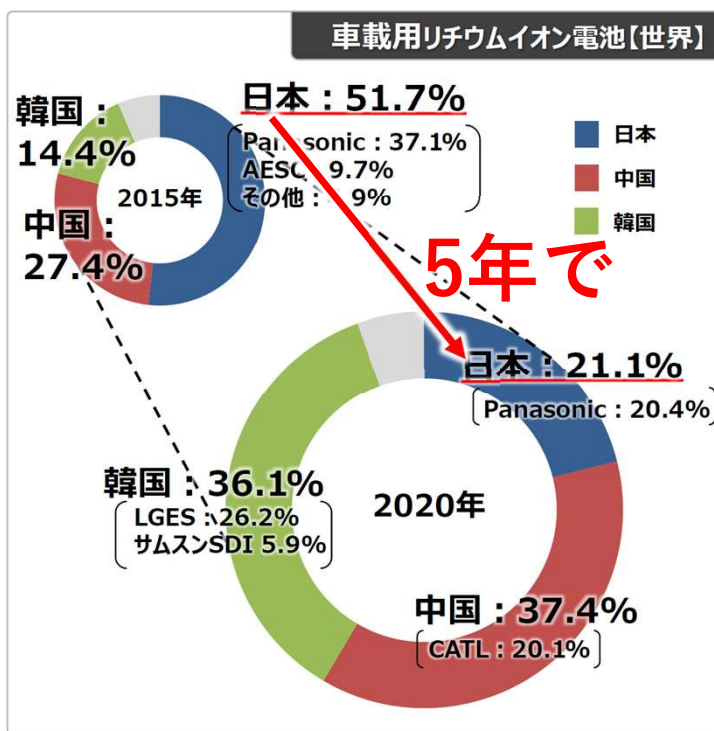
NEDO「情報収集事業 平成29年度 日系企業のモノとサービス・ソフトウェアの国際競争ポジションに関する情報収集」、(2018年3月)

マテリアル産業は日本の**基幹産業**



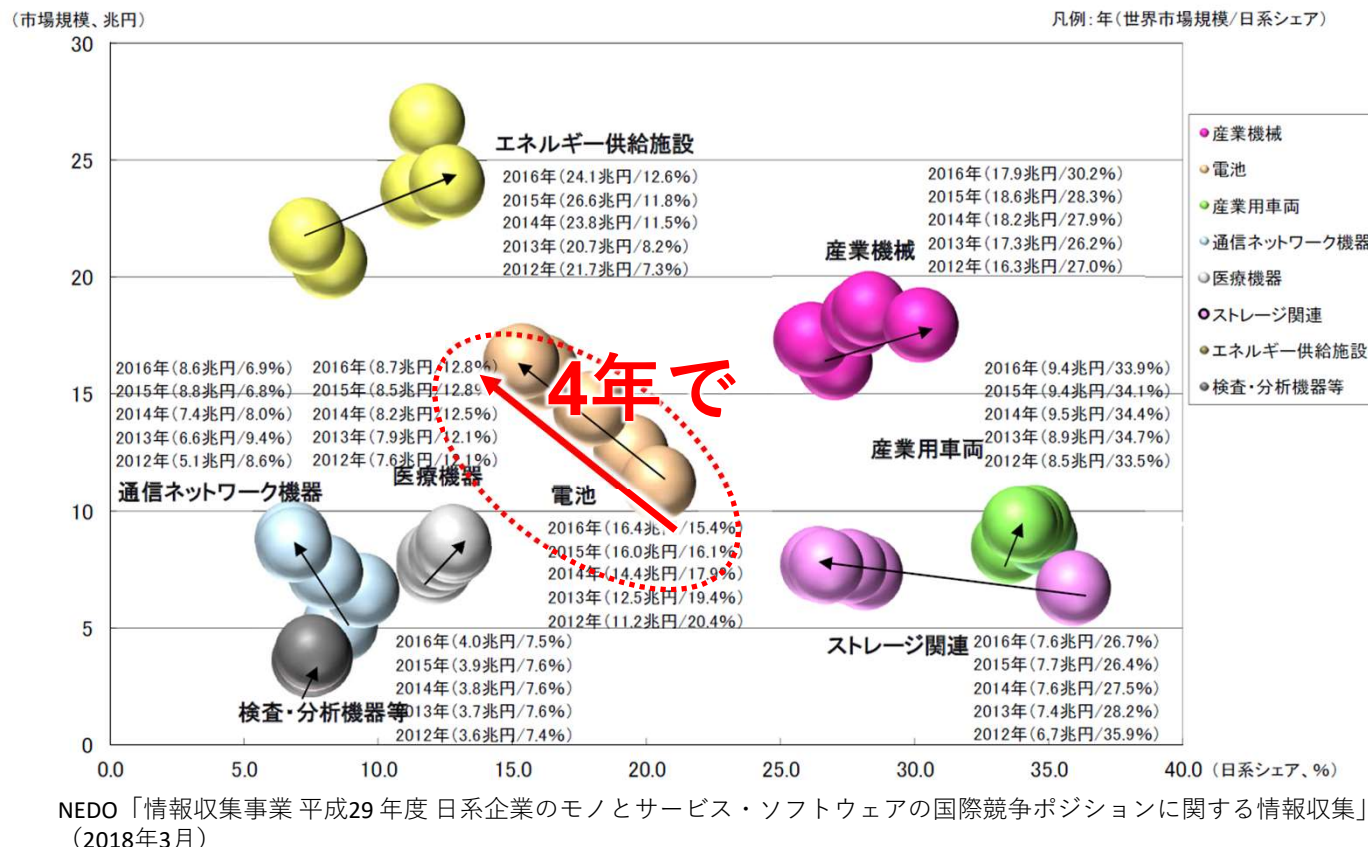
その基幹産業が脅かされている。理由：開発スピードに限界。

日本が開発に成功したLIBの例



経済産業省「蓄電池産業戦略」2022年8月
富士経済「エネルギー・大型二次電池・材料の将来展望 2021
ー 電動自動車・車載電池分野編ー」に基づき作成

カテゴリ別市場規模及び日系シェア(3兆円以上30兆円以下)



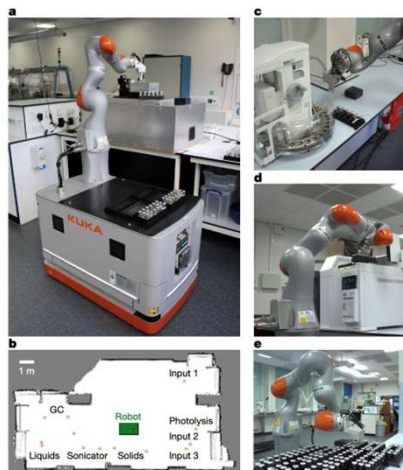
優位なシェアを維持可能な次の開発が必要



世界的に自律探索手法による材料開発が激化

Article

A mobile robotic chemist

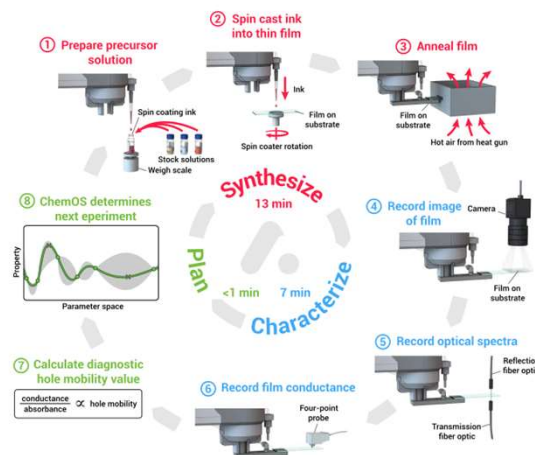


University of Liverpool
Nature **2020**

- 光触媒材料
- 6倍以上の活性を発見

MATERIALS SCIENCE

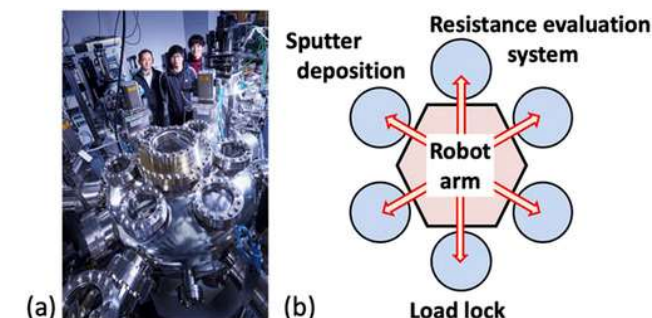
Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials



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



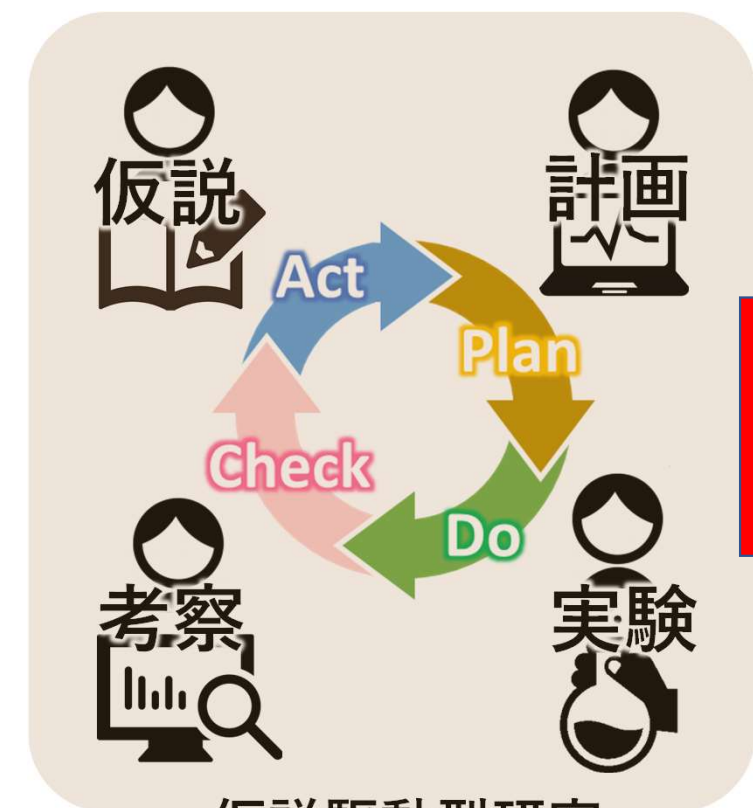
Tokyo Tech.
APL Mater. **2020**

- 無機材料
- スループット10倍

日本流の自律探索手法の活用が求められている

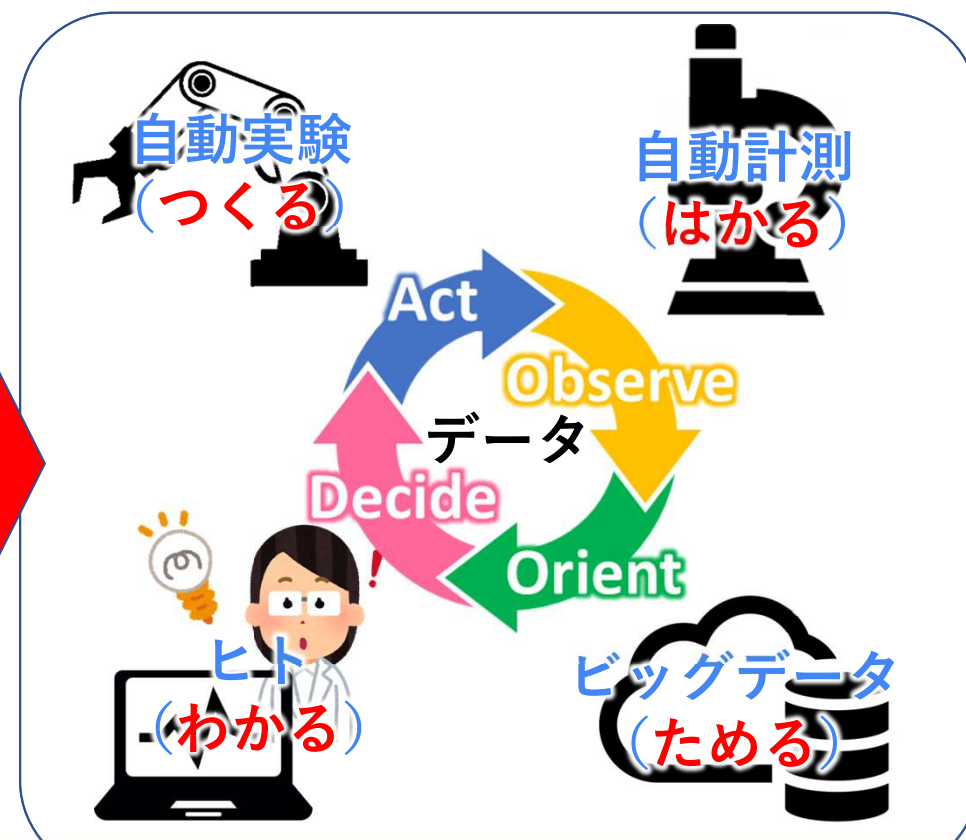


【解決方法】 研究手法のパラダイムシフト



仮説駆動型研究
(ヒトに依存したPDCAサイクル)

パラダイム
シフト



データ駆動/仮説駆動ハイブリッド型研究
(AIロボットを用いたOODAループ)



Materials Exploration space
Extension Platform



未来社会創造事業 第2回公開成果報告会 ～あらゆるモノのDX化による未来価値創造～
2023.12.12.ベルサール飯田橋ファースト「マテリアル探索空間拡張プラットフォーム（MEEP）」長藤圭介



【MEEP】 Materials Exploration space Extension Platform

<https://mEEP.nagato-u-tokyo.jp/>





Materials Exploration space
Extension Platform



未来社会創造事業 第2回公開成果報告会 ～あらゆるモノのDX化による未来価値創造～
2023.12.12.ベルサール飯田橋ファースト「マテリアル探索空間拡張プラットフォーム (MEEP)」長藤圭介



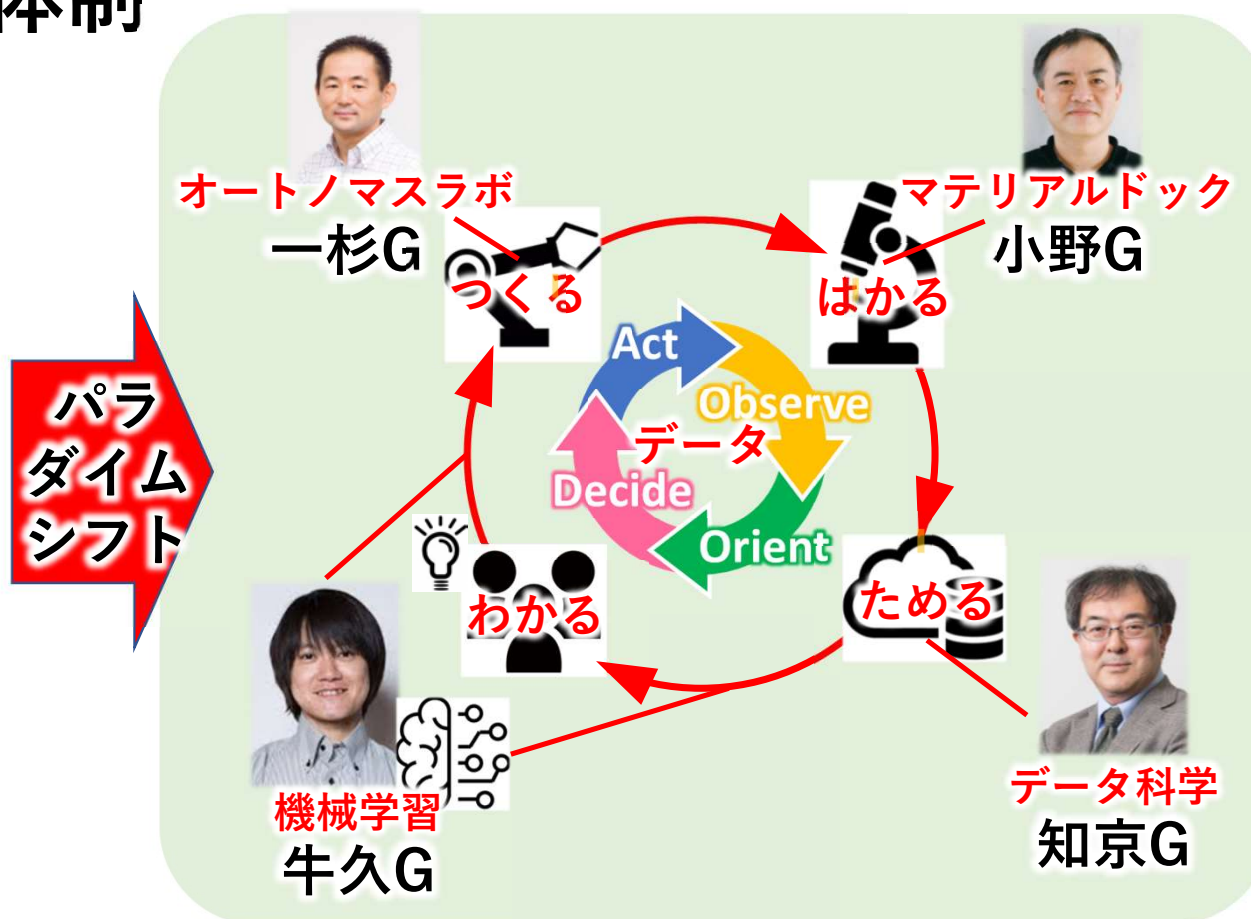
AIロボットを用いた無機材料の自律探索(世界初)

<https://youtu.be/038U0gSEbrM?feature=shared>





MEEPの研究体制

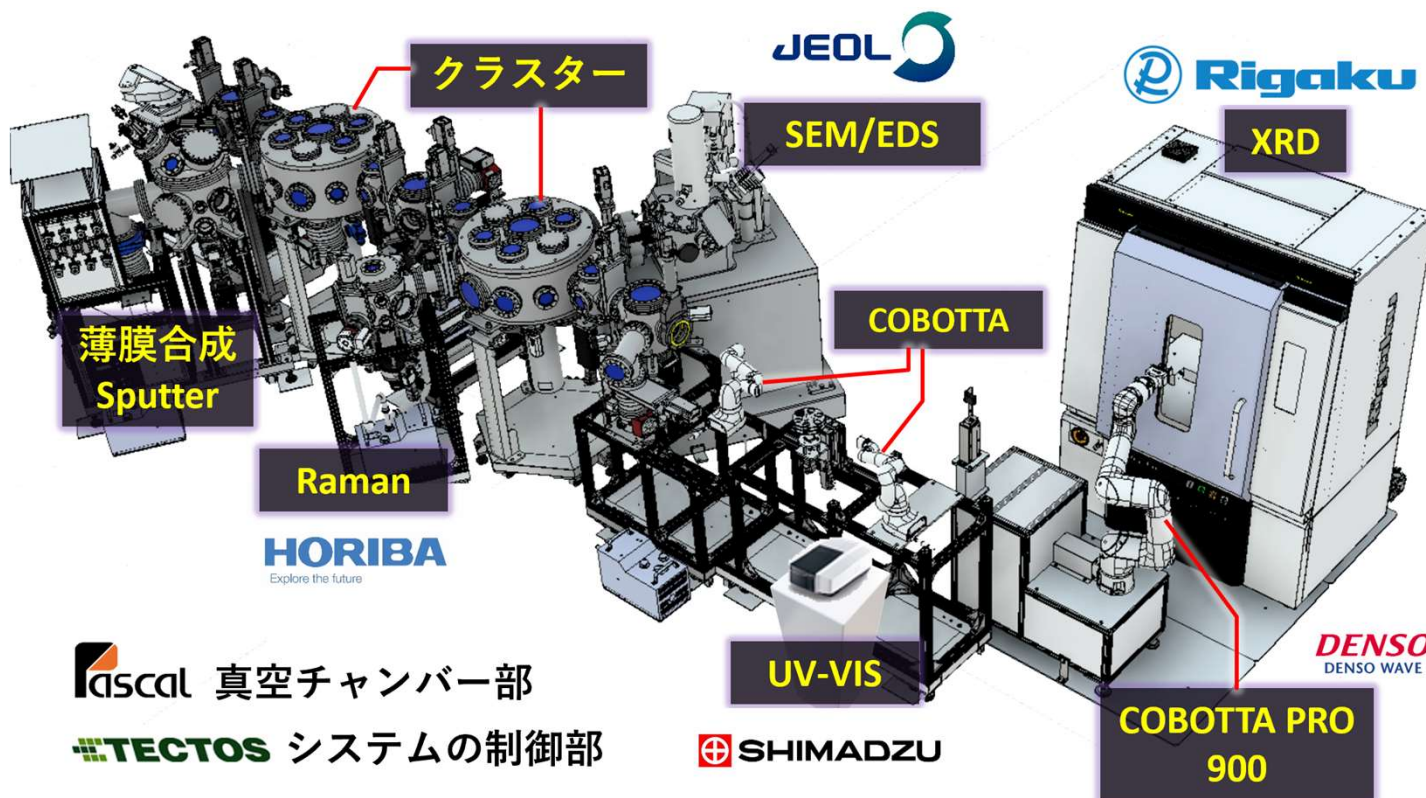


材料(一杉)・計測(小野)・インフォマティクス(知京)・機械学習(牛久)・システム(長藤)
と多様な分野が集う体制

【成果】 オートノマスラボ グループ



<https://youtu.be/038UOgSEbrM?feature=shared>



一杉太郎GL
(東工大)

R. Shimizu et al.,
APL Mater. 2020.
N. Ishizuki *et al.*,
STAM Methods 2023
など



相場 諒氏
展示あり

Autonomous
Materials
Exploration
System

AMES(自律型マテリアル探索システム)

AMES稼動開始・お試し活用中



<https://youtu.be/jY4CQdIC6NY?feature=shared>

【成果】マテリアルズドック グループ



小野寛太GL
(大阪大)

Y. Nakajima *et al.*,
IROS 2022
など

Robotic Powder Grinding with a Soft Jig for Laboratory Automation in Material Science

Yusaku Nakajima, Masashi Hamaya, Yuta Suzuki,
Takafumi Hawaii, Felix von Drigalski, Kazutoshi Tanaka,
Yoshitaka Ushiku, Kanta Ono

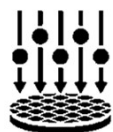
© 2022 OMRON SINIC X



中島 優作 氏
展示あり

Autonomous
Robotic
Experiment

真空成膜の先の「粉体粉碎」の自動化・自律化に成功



...



【成果】マテリアルデータ科学 グループ

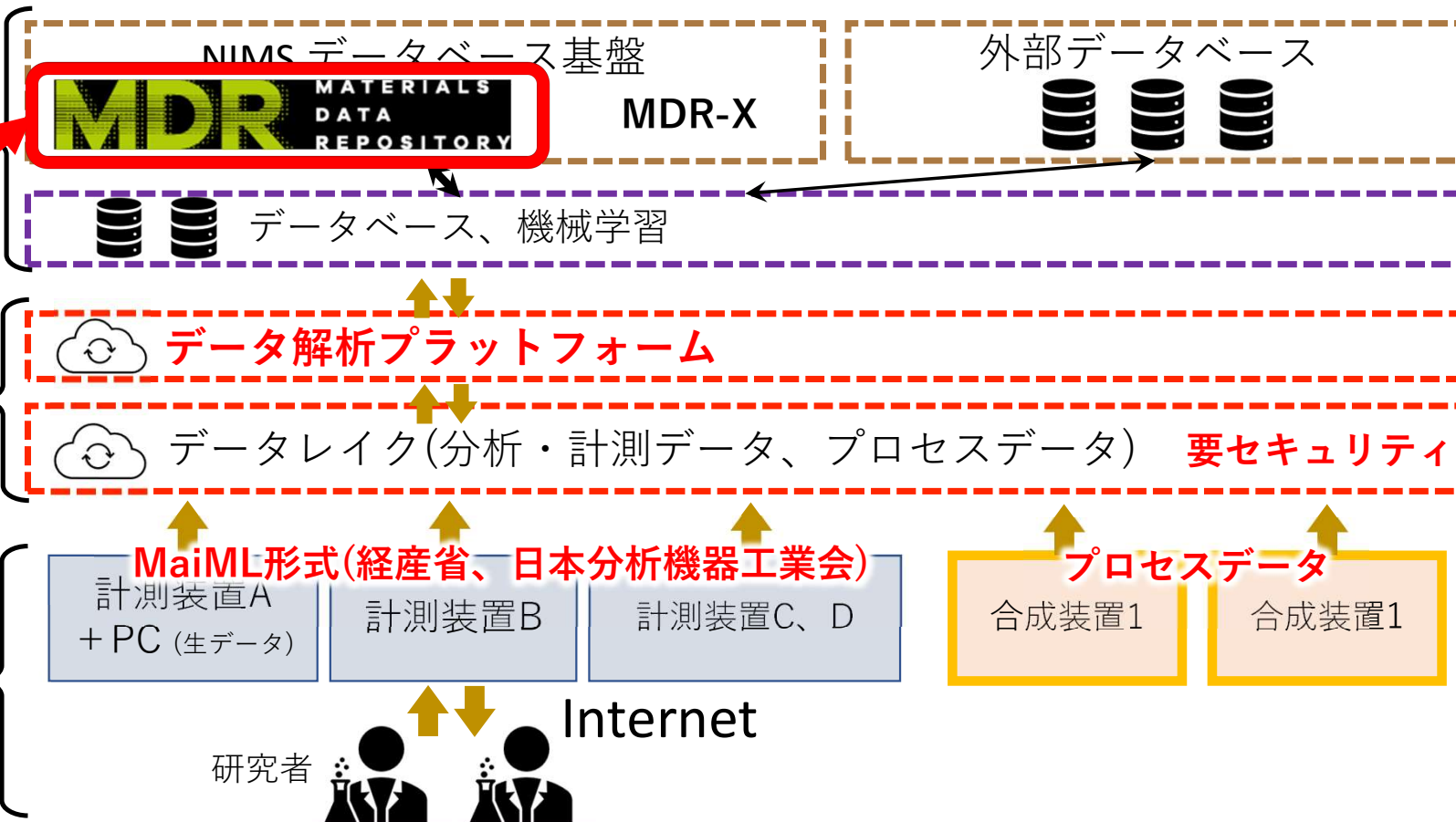
知京豊裕GL
(NIMS)



三次
(共有可)

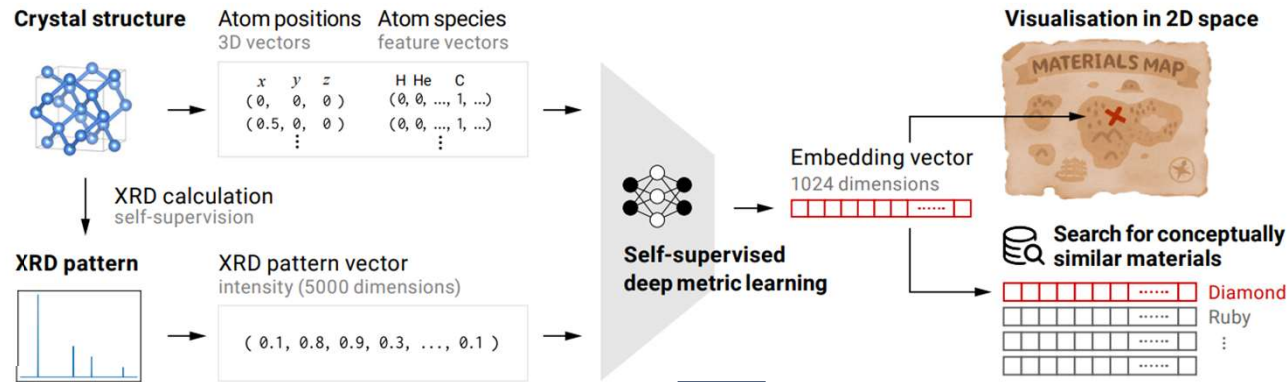
二次
(解析可)

一次
(生データ)



一次データ→二次データ(解析可)→三次データ(共有可)の
データプラットフォーム整備。データ形式の標準化へ。

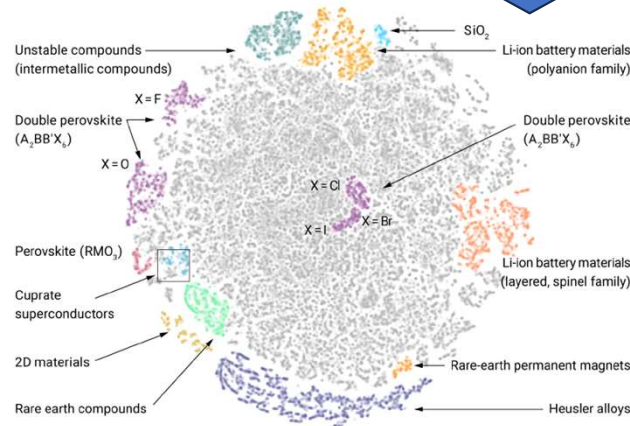
【成果】機械学習 グループ



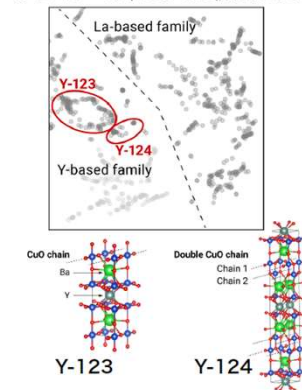
結晶構造 (CIF) のみで
embeddingを学習可
(ヒトによるラベル付け無し)

「自己教師あり
深層距離学習」

1000次元ラベルを2次元に転写, マテリアルの類似度をヒトへ可視化



銅酸化物超伝導体 (左端) を拡大
クラスターの中にさらに構造がある



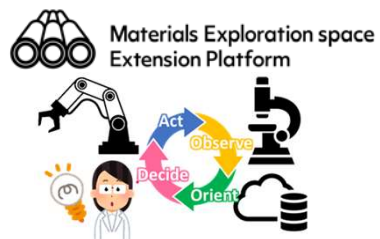
「マテリアルズマップ」の活用法開発へ

目標3

「人と融和して
知の創造・越境を
するAIロボット」
2023～ 開始



Y. Suzuki *et al.*,
Mach. Learn. 2023
など

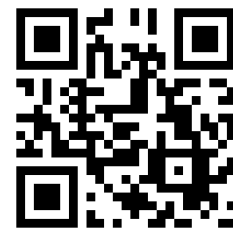


未来社会創造事業 第2回公開成果報告会 ～あらゆるモノのDX化による未来価値創造～
2023.12.12.ベルサール飯田橋ファースト「マテリアル探索空間拡張プラットフォーム (MEEP)」長藤圭介



15

システムアーキテクチャ グループ



https://youtu.be/z1pIU1X_jW8



長藤圭介PL
(東大)

K. Nagai *et al.*,
Sci. Rep. 2022
など



粉体成膜プロセス探索を題材に，OODAループの検証



大屋 尋鷹 氏
展示あり

Robotic
Objective
Process
Exploration
System





2021～2025で実践するMEEPのPOCと社会実装



2023/12時点：折り返し、POC①完了。
POC②③へ。皆様の活用が要です。



AIロボット駆動科学シンポジウム 2023/7/6開催

<https://www.ai-robot-science-symposium2023.jp/>



- ・ 高橋課題、MS原田PJ、MS牛久PJと共催
- ・ 「AIロボット駆動科学」イニシアチブ設立 準備
- ・ 国際フォーラム180名来場超満員

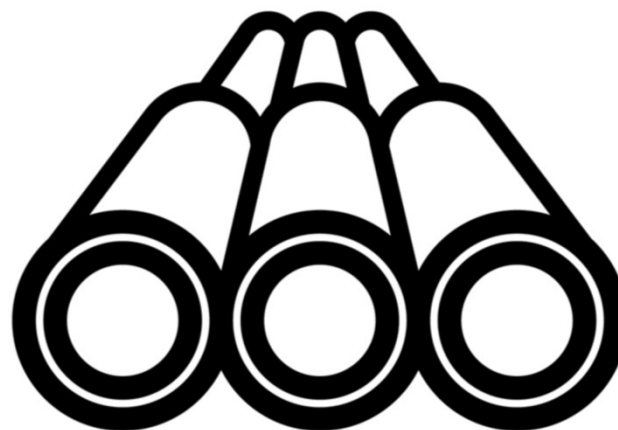


MEEPの社会実装には
ヒトの**マインドチェンジ**が必要。

AIロボ基盤・サイエンス両者の多様な分野で結束し、
日本が世界のイニシアチブを。



ご清聴ありがとうございました。



MEEP

Materials Exploration space Extension Platform