

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(本格研究期間)

令和3年度 研究開発年次報告書

令和3年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：長藤 圭介]

[東京大学大学院工学系研究科・准教授]

[研究開発課題名：マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築]

実施期間：令和3年6月1日～令和4年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「システムアーキテクチャ」グループ（東京大学）

- ① 研究開発代表者:長藤 圭介(東京大学大学院工学系研究科、准教授)
- ② 研究項目
 - ・仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型研究開発のシステムアーキテクチャの開発

(2)「オートノマスプロトタイピング」グループ（東京工業大学）

- ① 主たる共同研究者:一杉 太郎（東京工業大学物質理工学院、特任教授）
- ② 研究項目
 - ・成膜合成に基づく自律マテリアル探索システムの開発

(3)「マテリアルドック」グループ(大阪大学)

- ① 主たる共同研究者:小野 寛太（大阪大学大学院工学研究科、教授）
- ② 研究項目
 - ・試作材料の自動測定解析システムの開発

(4)「データ科学」グループ（物質・材料研究機構）

- ① 主たる共同研究者:知京 豊裕（物質・材料研究機構、特命研究員）
- ② 研究項目
 - ・サイバー空間の材料データと実験データを統合するデータシステムの開発

(5)「機械学習」グループ(オムロンサイニクエックス株式会社)

- ①主たる共同研究者:牛久 祥孝（オムロンサイニクエックス株式会社、プリンシパルインベスティゲータ）
- ②研究項目
 - ・ハイスループット自律探索システムの要素技術をデータでつなげるデータクレンジング技術開発

§2. 研究開発成果の概要

マテリアル探索空間拡張プラットフォーム(MEEP; Materials Exploration space Expansion Platform)では、3つのPOC(自律探索, 仮説駆動/データ駆動ハイブリッド型開発, ナレッジシェアリング)を、固体電池材料探索のハイスループット化を題材に実施する。MEEP第1,2年度は、各研究グループの要素技術開発に位置づけ、各グループの探索研究期間の成果を、MEEPでの成果につなげるための基盤づくりを行う。第1年度における、具体的な成果は以下のとおりである。「オートノマスプロトタイピング」グループでは、これまでの真空成膜自律実験装置を5元系の探索ツール

ルに拡張し、仮説駆動では探索しにくい混合伝導体が探索された。「マテリアルドック」グループでは、X線回折法の自動測定に加え、自動でデータ解析をする方法を開発した。「データ科学」グループでは、NIMSのMDR-ClosedにMEEP用データホルダを作成し、「オートノマスプロトタイピング」グループのデータを試験的に格納した。データの効率的な蓄積のために、1次データから2次データへの加工、メタデータでの管理などの試作を行った。「機械学習」グループは、上記3つの要素技術の機械学習に関する役割を担う。自律実験装置におけるスペクトル高速解析、自動解析装置におけるドメイン適応とベイズ最適化の技術開発を行った。

【代表的な原著論文情報】

[1] K. Nagai, T. Osa, G. Inoue, T. Tsujiguchi, T. Araki, Y. Kuroda, M. Tomizawa, K. Nagato, “Sample-efficient parameter exploration of the powder film drying process using experiment-based Bayesian optimization”, *Scientific Reports* 12 (2022) 1615.

<https://doi.org/10.1038/s41598-022-05784-w>

[2] H. Kumazoe, Y. Igarashi, F. Iesari, R. Shimizu, Y. Komatsu, T. Hitosugi, D. Matsumura, H. Saitoh, K. Iwamitsu, T. Okajima, Y. Seno, M. Okada, I. Akai, “Bayesian sparse modeling of extended X-ray absorption fine structure to determine interstitial oxygen positions in yttrium oxyhydride epitaxial thin film”, *AIP Advances* 11 (2021) 125013.

<https://doi.org/10.1063/5.0071166>

[2] T. Ueno, H. Ishibashi, H. Hino, K. Ono, “Automated stopping criterion for spectral measurements with active learning”, *npj Computational Materials* 7 (2021) 139.

<https://doi.org/10.1038/s41524-021-00606-5>