

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4年4月1日～令和5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2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、第1年度で設計した自律型マテリアル探索シス

テム(AMES; Autonomous Materials Exploration System)の要素を実際に製作し、インテグレーションの準備を行った。「マテリアルドック」グループでは、第1年度で構築したX線回折法の自動測定・自動解析のAMESの要素として導入稼動、そしてマルチ計測の第2弾としてラマン分光法の試行と課題抽出を行った。「データ科学」グループでは、第1年度に試行したNIMS-MDR-Closedに作成したMEEP用データフォルダ作成およびAMESデータの導入に対して、データを実際に管理応用できる形にした。「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っており、AMES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] Ryo Nakayama, Ryota Shimizu, Taishi Haga, Takefumi Kimura, Yasunobu Ando, Shigeru Kobayashi, Nobuaki Yasuo, Masakazu Sekijima, and Taro Hitosugi, “Tuning of Bayesian optimization for materials synthesis: simulation of the one-dimensional case” STAM Methods 2, 119-128, 2022.

<https://doi.org/10.1080/27660400.2022.2066489>

[2] Y. Suzuki, T. Taniai, K. Saito, Y. Ushiku, K. Ono, “Self-supervised learning of materials concepts from crystal structures via deep neural networks.” Mach. Learn.: Sci. Technol. 3, 045034, 2022.

<https://doi.org/10.1088/2632-2153/aca23d>

[3] Akihiro Yamashita, Takahiro Nagata, Shinjiro Yagyu, Toru Asahi, Toyohiro Chikyow, “Direct feature extraction from two-dimensional X-ray diffraction images of semiconductor thin films for fabrication analysis” STAM-Methods 2, 23-37, 2022.

<http://dx.doi.org/10.1080/27660400.2022.2029222>