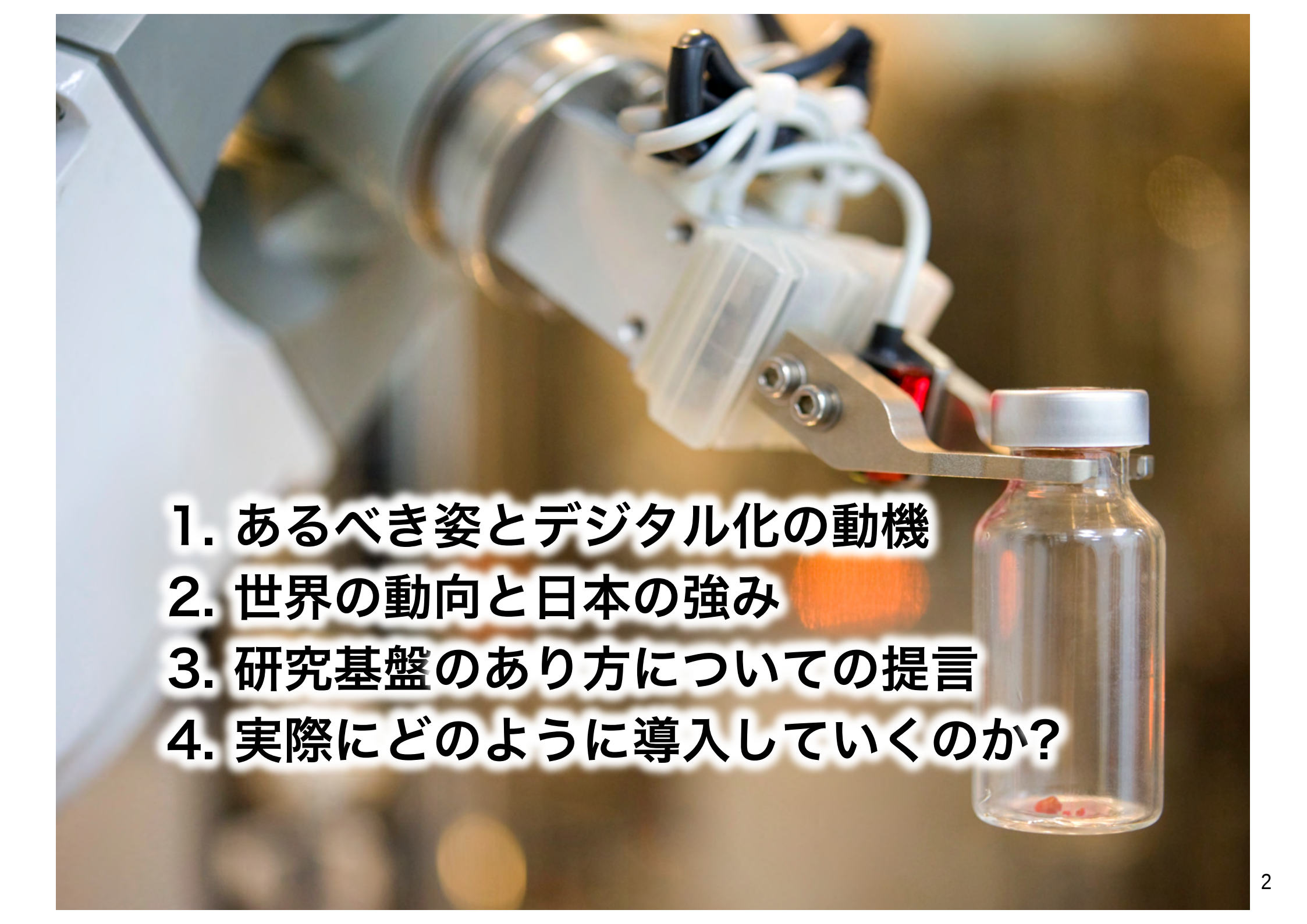


大規模集積研究基盤×自動・自律実験

「研究開発の進め方」に変革をもたらす原動力へ

一杉 太郎

東京大学 理学系研究科 化学専攻 教授
東京科学大学 物質理工学院 特任教授

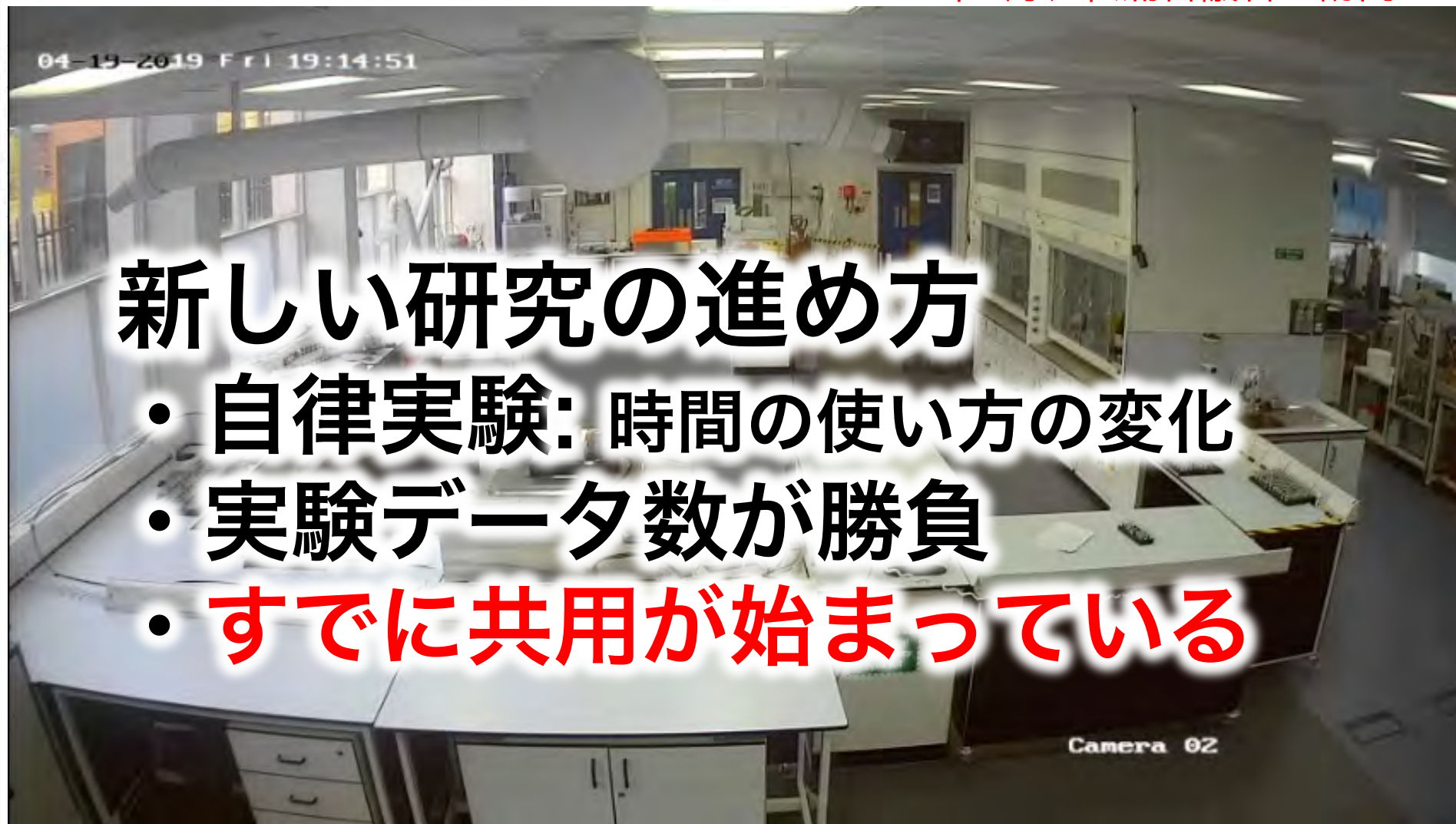
- 
1. あるべき姿とデジタル化の動機
 2. 世界の動向と日本の強み
 3. 研究基盤のあり方についての提言
 4. 実際にどのように導入していくのか？

A mobile robotic chemist

英国

Cooper et al., Nature 583 (2020) 237

2025年4月、松浦審議官が訪問

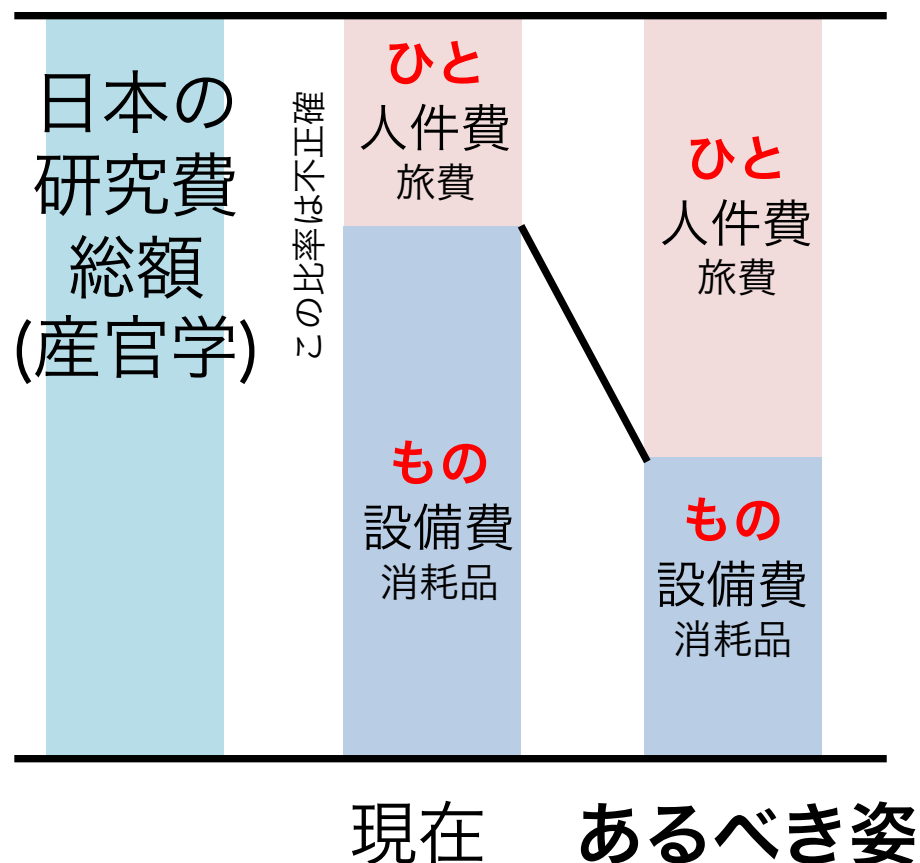


新しい研究の進め方

- 自律実験: 時間の使い方の変化
- 実験データ数が勝負
- **すでに共用が始まっている**

- 水分解光触媒を探索: **8日間で688回の実験**を自動的に行う
- 初期に配合した触媒の6倍以上の活性を持つ混合物を発見

あるべき姿1: 研究費の有効活用

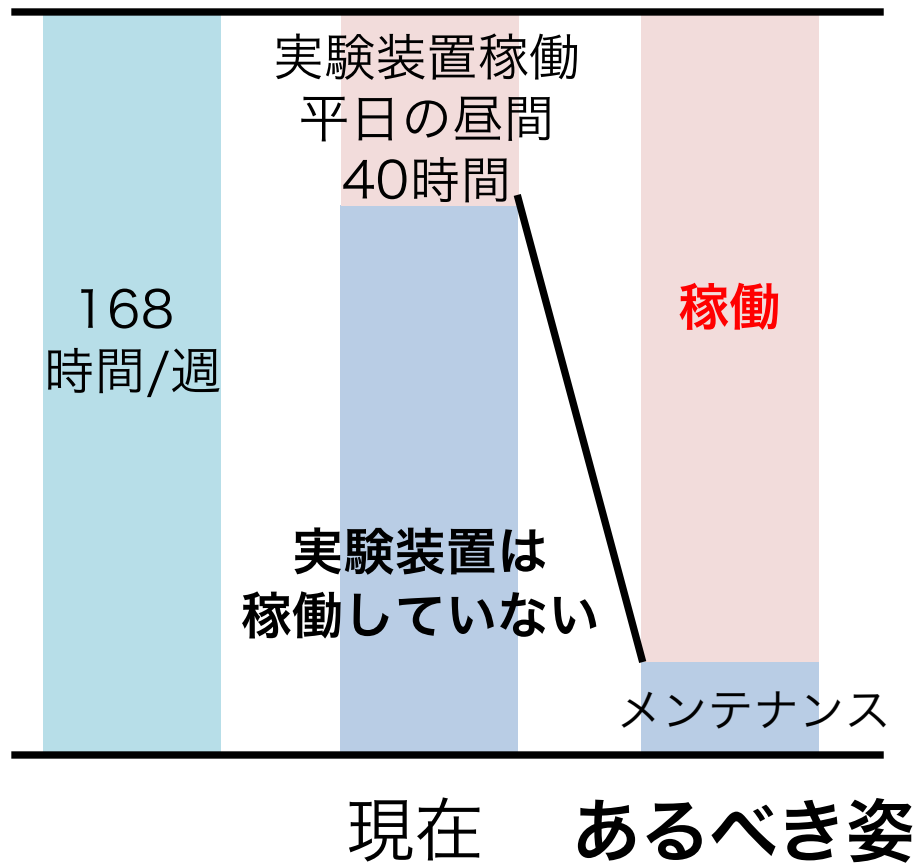


- 研究者の待遇改善
- 国際交流
- 技術職員雇用
高度な実験
実験装置の維持・発展
研究者と伴走
- 研究のスピードアップ
自動・自律実験
- データ活用による
新発想の獲得
- 装置共用

自動・自律実験が誰でも使えるように(民主化・共用)

実験装置は高いコストパフォーマンスが必要→モジュール化→標準化

あるべき姿2: 装置稼働率の向上



- 研究者の待遇改善
- 国際交流
- 技術職員雇用
高度な実験
実験装置の維持・発展
研究者と伴走
- 研究のスピードアップ
自動・自律実験
- データ活用による
新発想の獲得
- 装置共用

ROI(Return on Investment)の観点で
装置稼働率を高める必要がある→自動・自律、装置共用

AI、ロボットを活用した研究が世界で活発化

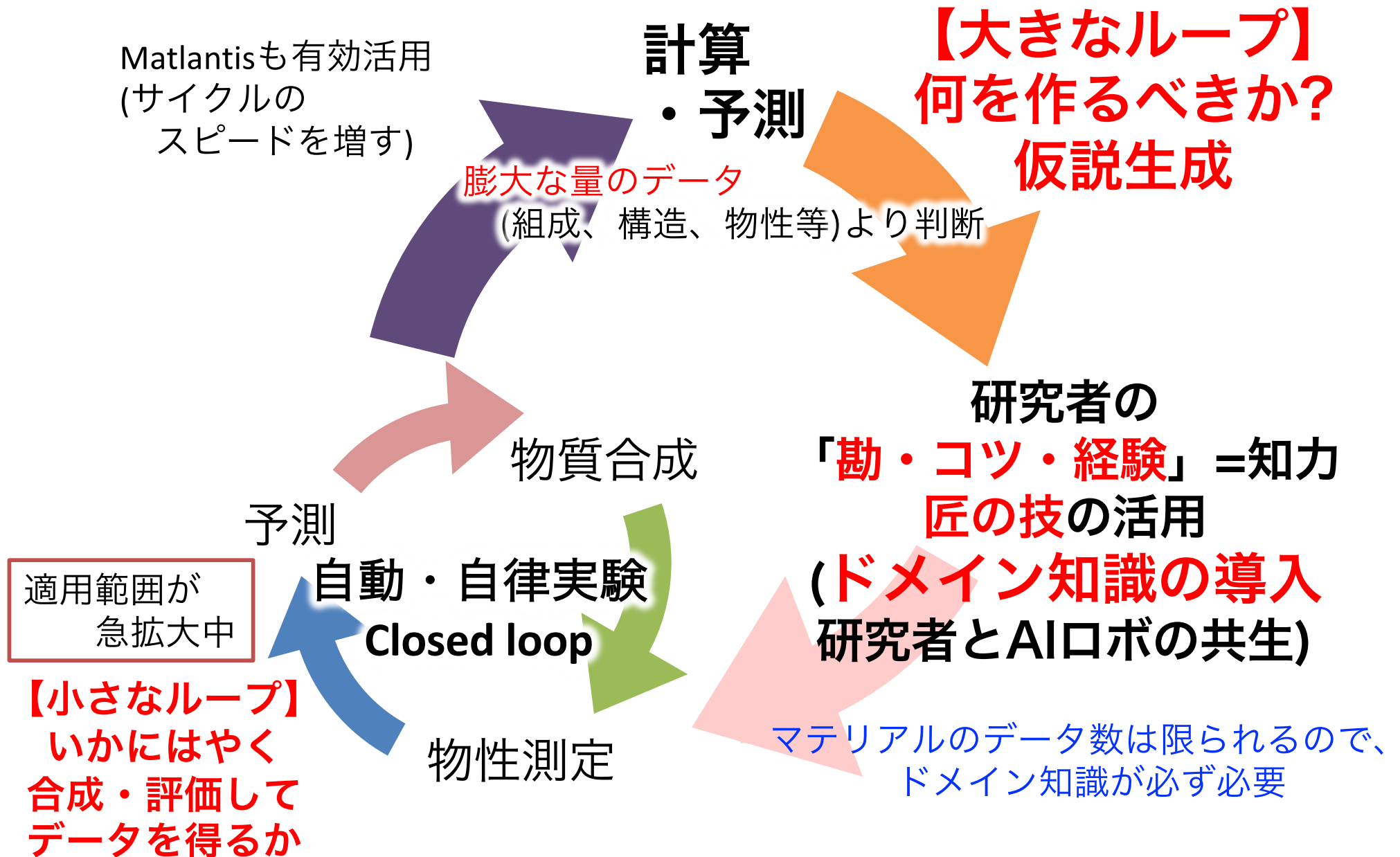
機械学習、ベイズ最適化、生成AI等の用語を含む マテリアル(化学・材料)分野の論文数



Web of Scienceで調査 令和6年版 科学技術・イノベーション白書

- 
1. あるべき姿とデジタル化の動機
 2. 世界の動向と日本の強み
 3. 研究基盤のあり方についての提言
 4. 実際にどのように導入していくのか？

二つのループ



主要国の投資状況 マテリアル分野のデータ駆動型研究、自動・自律実験

官民によるデータ駆動型研究開発への**巨額**な投資が各国で活発化



NSF Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future (DMREF)

- 主要な社会的課題に取り組むために必要な先端材料の設計、発見、開発を推進するプログラム。
- AI活用やハイスループット実験など、多くのデータ駆動型材料研究テーマを推進。
- 2023年から、**4年間で約110億円 (7,250万ドル)** を投入。

【出典】2023年9月18日, NSF News, 「NSF invests \$72.5M to design revolutionary materials」



Canada Acceleration Consortium

理化学機器企業の巻き込みが弱い

- トロント大学を中心に2021年コンソーシアム発足。
- Canada First Research Excellence Fund (CFREF)から新材料・新物質の発見を加速する
- 取組み対して、**7年間で約230億円 (約2億カナダドル)** 投入。
- 本ファンドとトロント大により、**約150億円 (1.3億カナダドル)** で施設を拡張。

【出典】2023年4月28日, U of T News, 「U of T receives \$200-million grant to support Acceleration Consortium's 'self-driving labs' research」



Materials Innovation Factory

UKにマテリアル産業がない

- リバプール大学とユニリーバの共同で2018年発足。
- 最新のロボットと計算環境を組み合わせた最先端材料の研究開発を推進。
- 2024年2月、化学向けの最新AIを開発・活用した新製品開発期間の短縮を狙う計画を発表。
- **約160億円 (8,100万ポンド)** 投入。

【出典】2018年10月5日, University of Liverpool News, 「Materials Innovation Factory officially opened by President of the Royal Society」



Automated Synthesis Testing and Research Augmentation Lab (ASTRAL)

- Samsungが米国MA州ケンブリッジに自動自律実験ラボを設置。

【出典】Nature Synthesis 3, 606-614 (2024), 「Navigating phase diagram complexity to guide robotic inorganic materials synthesis」

文科省資料を改変

Liverpool大学

Materials Innovation Factory (MIF)



- 4フロアで11,000 m²
 - 1階 **Open Access Laboratory**(共有装置), 2階Unilever(ユニリーバ)
 - 3階、4階: [Andy Cooper](#) and [Matthew Rosseinsky](#) Group + α
- **建設費はUnileverと政府が2:1で負担**
 - 企業と負担し合うスキームで建設: UKに多数あるとのこと
 - 4階のうち、2階部分はUnileverが専有
 - 同社は共有機器にアクセス可能、企業研究所として機能(Liverpoolに別の研究所あり)
- 初期投資は総額120million pounds (約225億円)
 - うち建物42million 80億円、装置50million pounds、(94億円)
- **Cooperグループ 約60名**
 - 約50名が研究者 35名が学生、15名がポスドク
 - (30名が化学、8名がロボティクス、その他がコンピュータサイエンス)
 - 約10名 (5名 research coordinators URAの役目、テクニシャン4名、秘書他)
- 大学は 広い意味でのインパクトを求める
- **技術職員のキャリアパス (博士のキャリアパス)**

Toronto大学 人材を集め、世界に見える拠点を構築中

1. 7つのプロジェクト(SDL1 - 7)、AI & Automation Lab、Social Science Lab

- **Materials scienceに重点** (LifeよりもMaterialsという印象)
- 各SDLに二名のPI、各SDLに5名のstaff scientist(全体で35名)
 - 5名の内訳: Domain2名、AI1名、robot1名、
横との連携を担当するもの1名(←これはナイスアイディア)
 - **AIとRobotの専門家がDomain研究者のそばにすることが非常に良い**
 - **Liverpoolもそうになっている。日本もそのような組織を作るべき**
 - 全体で二名の技術員 ← 本格稼働したら足りなくなるのは

2. 実験技術面(小さなループ)では日本は十分進んでいる

- ハードウェア面で負ける気がしない
- Aspuru-GuzikもCederも理論家
 - **機械学習を応用した大きなループで我々はビハインド**
 - **理論家、情報科学の専門家との連携が最重要事項**

米国の動向

1. AI Aspirations: R&D for Public Missions
 - ホワイトハウスからの大方針
2. CHIPS for America
 - 米国の半導体産業加速プロジェクト <https://www.nist.gov/chips/funding-updates>
 - \$52 billion (約8兆円)
3. Materials Genome Initiative (MGI)
 - Grand challengesが設定された
[2024 https://www.mgi.gov/2024-materials-genome-initiative-mgi-challenges](https://www.mgi.gov/2024-materials-genome-initiative-mgi-challenges)
 - 2024 自律実験に関する政府のワークショップが開催された
 - <https://www.mgi.gov/autonomous-experimentation-materials-rd>
 - [https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/MGI Autonomous Materials Innovation Infrastucture Workshop Report.pdf](https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/MGI_Autonomous_Materials_Innovation_Infrastucture_Workshop_Report.pdf) このレポートを添付した
4. **【重要】上記1, 2, 3を背景として、
機械学習と自動・自律実験システムを使って
半導体開発を加速するプロジェクトが立ち上がる [CARISSMA](#)**
 - 合計100 million\$ (150億円)の投資 (添付資料1)
 - 省庁横断、国研横断になっている

世界の動向(Liverpool大、Toronto大) 人材を集め、世界に見える拠点を構築中

1. 実験技術面(小さなループ)では日本は十分進んでいる

- ー ハードウェア面で進んでいるが、
機械学習を応用した大きなループで我々はビハインド
→ 理論家、情報科学、ロボットの専門家との連携が最重要事項

2. モジュール化を重視: plug and play

- Configurable systemにして、研究のflexibilityを増す

3. 標準化の重要性は皆認識しているが、いまだばらばら

4. 理化学機器企業の巻き込みがいまだ少ない

- 日本としては大チャンス: 日本の理化学機器企業は宝

日本分析機器工業会(JAIMA)の動きが先行(MaiML、LADS)

5. データ保管するところは日が先行 → 付加価値をどう出すか?

日本は世界の頭脳循環に入れるか?

日本の強みを活用する

1. 国内マテリアル産業の強さ(もちろん、学界も)

- 化学・材料・セラミックス・自動車・鉄鋼等

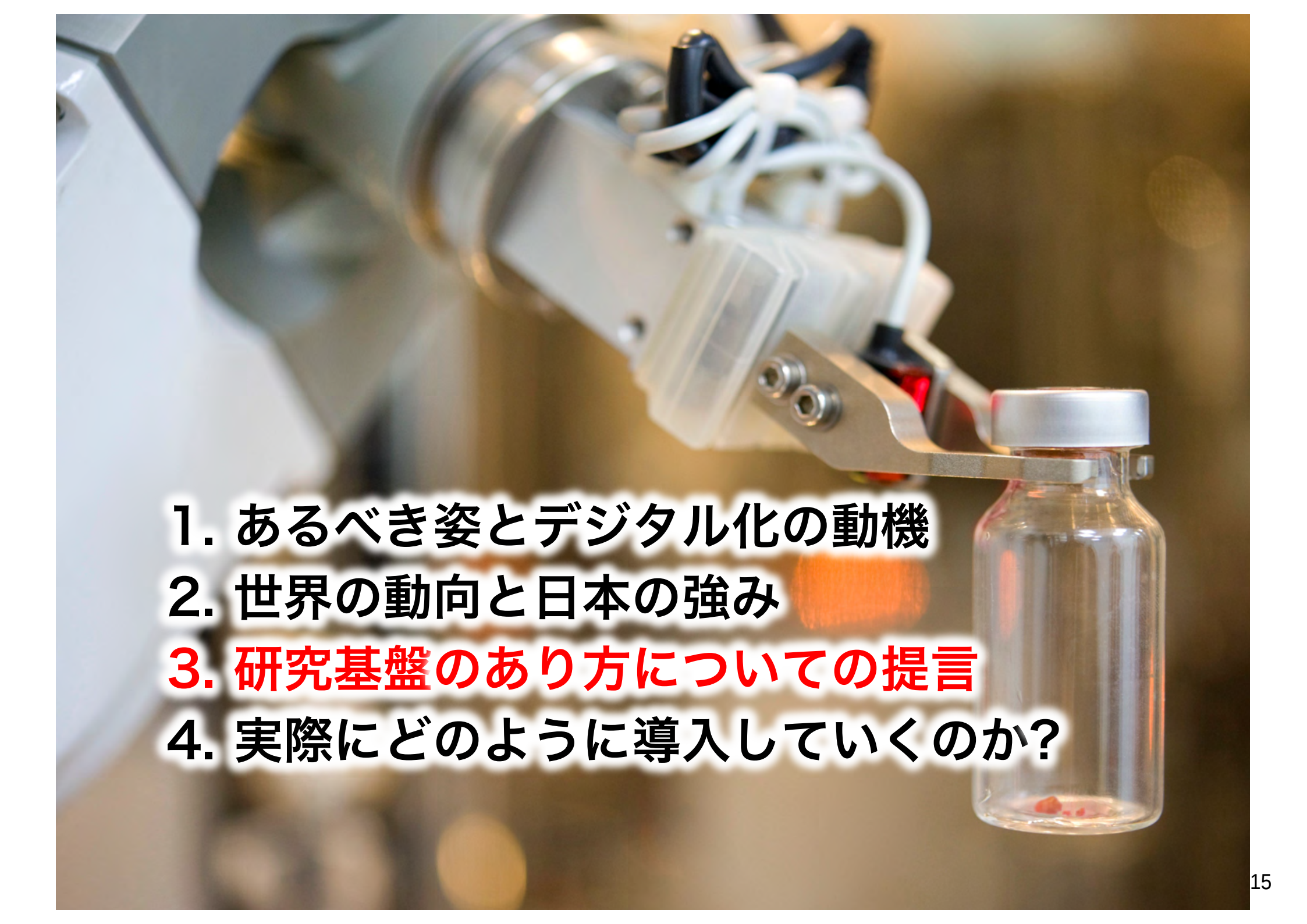
2. 理化学機器企業の存在感(プロセスと分析の両方)

- JEOL、リガク、島津製作所、堀場製作所、日立ハイテク他
- ロボット産業も強い(ロボットシステムインテグレータも豊富)

3. 産学連携が他国より進んでいる

勝ち筋: ハードウェアは日本が有利

拠点を整備し、AI、ロボット技術、**研究者の勘・コツ・経験**を
組み合わせた日本独自のマテリアル研究推進法の確立

- 
1. あるべき姿とデジタル化の動機
 2. 世界の動向と日本の強み
 3. 研究基盤のあり方についての提言
 4. 実際にどのように導入していくのか？

質が高い研究を継続し、ノウハウとデータを蓄積した者が勝つ
→ TSMC, imec



継続的なマテリアル創出を続け、膨大なデータを蓄積
世界から頼られる存在へ(世界はこの拠点に頼らざるをえない)

今すぐ取り組むべきこと

今なら世界の頭脳循環の輪に入ることができる

最重要: 拠点形成 協調領域

マテリアル研究者、AI研究者、ロボット研究者、
理化学機器メーカーが
マテリアル関連企業の研究者や技術職員と共に研究開発を加速

1. **人材育成** 「マテリアル×機械学習×ロボット×システム化」
2. **自動・実験実験技術の開発**
 - 今なら世界に勝てる!! Last Chance!
 - 理化学機器メーカー、ロボット開発企業と広く協業
 - 機械学習を組み込んだロボット技術
3. **標準化・オープン化・情報発信・相談窓口**
4. **ラボシステムインテグレータ**の育成

大規模集積研究基盤×自動・自律実験: 大きな方向性

1. 「共用施設」として自活

- 安定ユーザーの獲得(企業)
- 高い稼働率
- 技術職員を中心とした運営
- 経営感覚を持ったマネジメント

1, 2でKPIを
しっかり分ける

2. 「共用施設」に留まらない世界的研究拠点

- デジタル化のノウハウ集約拠点
 - デジタル化の工作室
- 理化学機器企業の力を高める方向性で技術開発

大規模集積研究基盤が組織・分野を超えた
国際的・学際的な研究ネットワークのハブへ

「研究開発の進め方」に変革をもたらす原動力



DIGITAL
LABORATORY
CONSORTIUM

現在40社以上

デジタルラボラトリー研究会

新しい時代の実験室 自動・自律化とデータ駆動科学

実験室に大きな変革が起きています。機械学習とロボット技術の進化により、自動的・自律的に実験を進めることが広まってきました。そのために、フォーマティクス、そして、人間の勘・コツ・経験・知恵を組み合わせた新しい実験室が大変重要で、大きく変化することは確実です。私たちがこの変革を先導するための戦略を描き、それを力強く実行します。

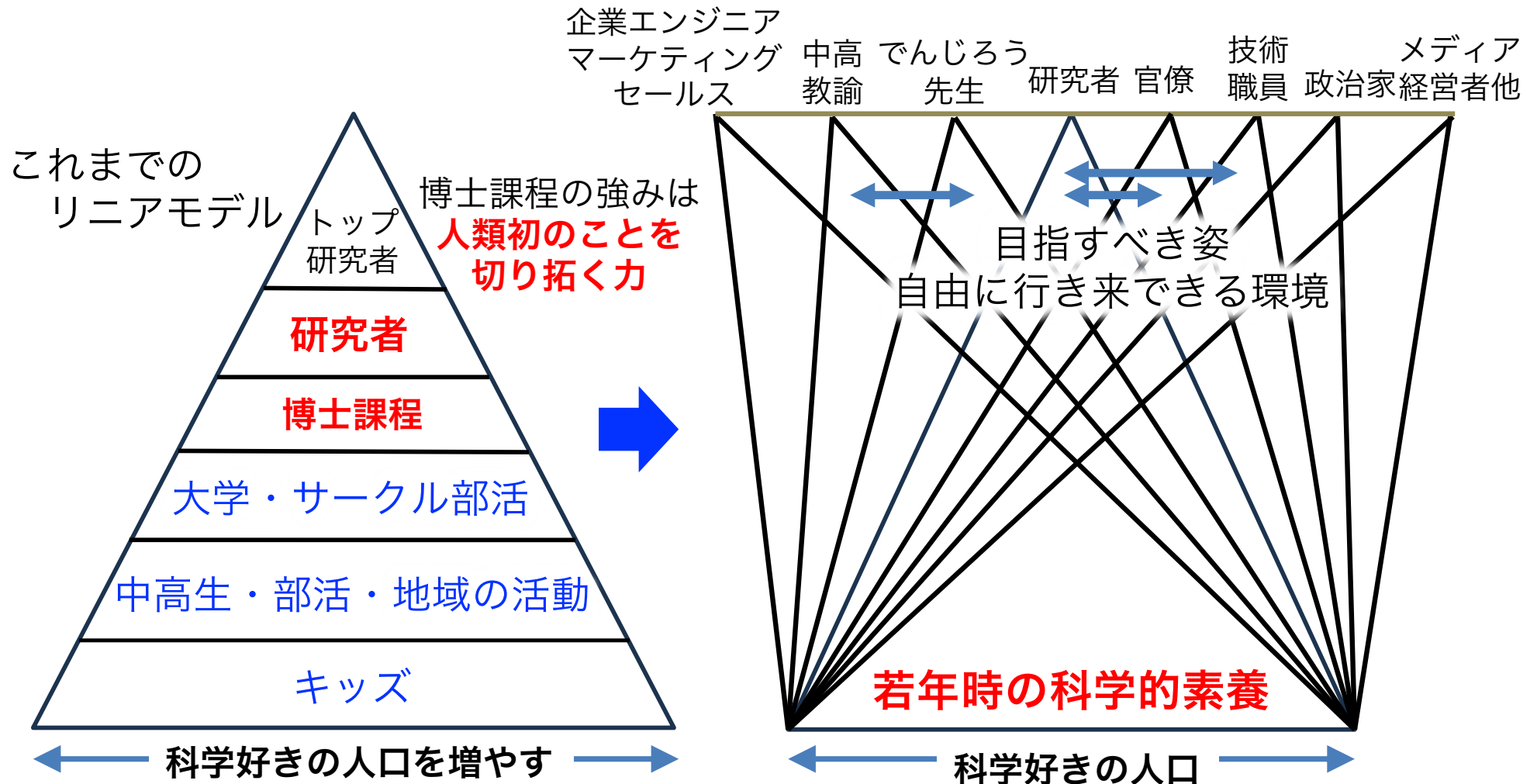
会員募集中!

協調領域: 装置開発、人材育成、標準化

9社と協働ラボを本郷に設置

→ 粉体材料合成プロセスの自動・自律化

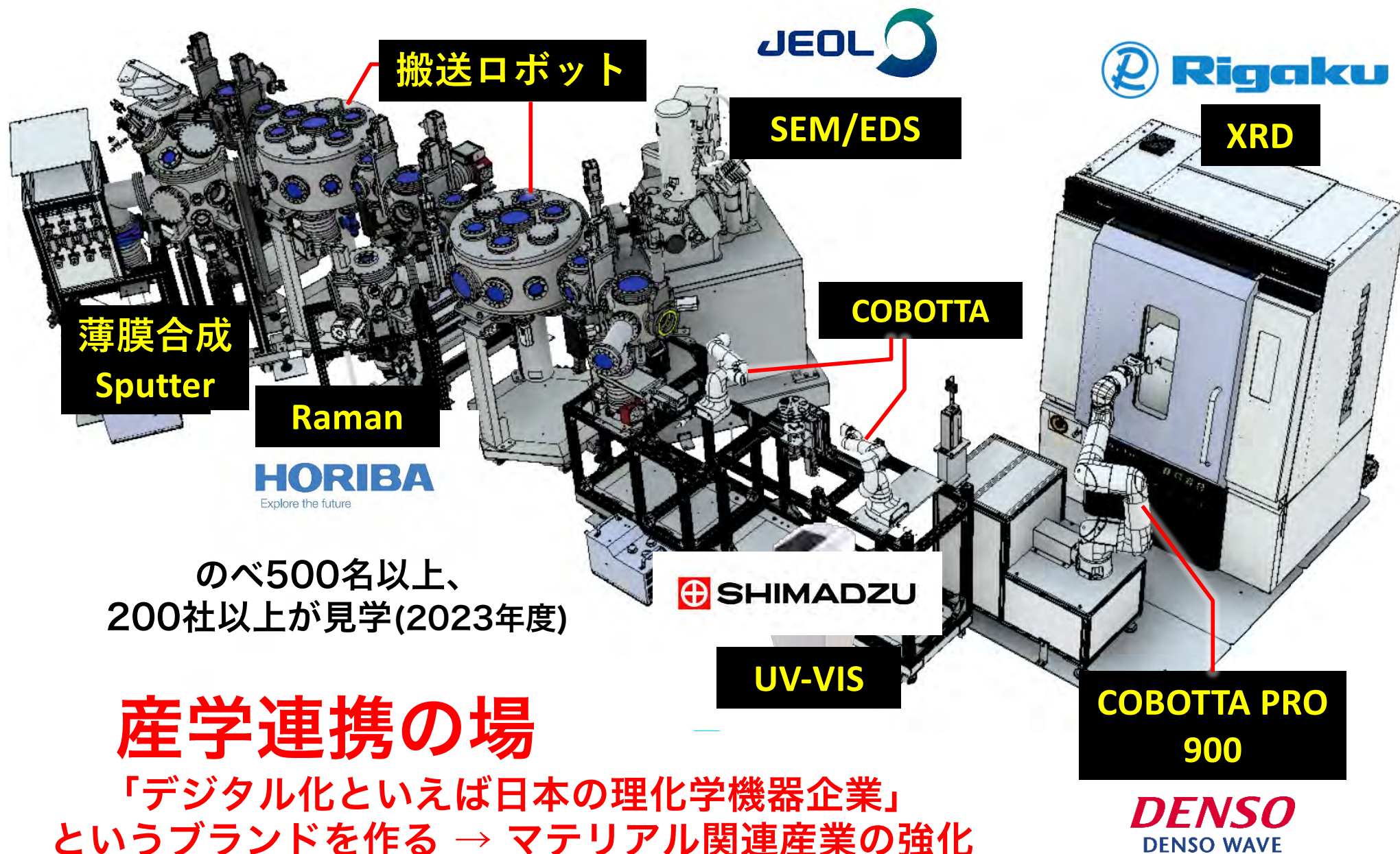
研究者の逆台形モデル (博士のキャリアパス多様化)



**産学官で「すそ野」を形成し、キャリアパスを多様化
(逆台形が鍵、キャリアが進んでも科学に関心を持つ)**

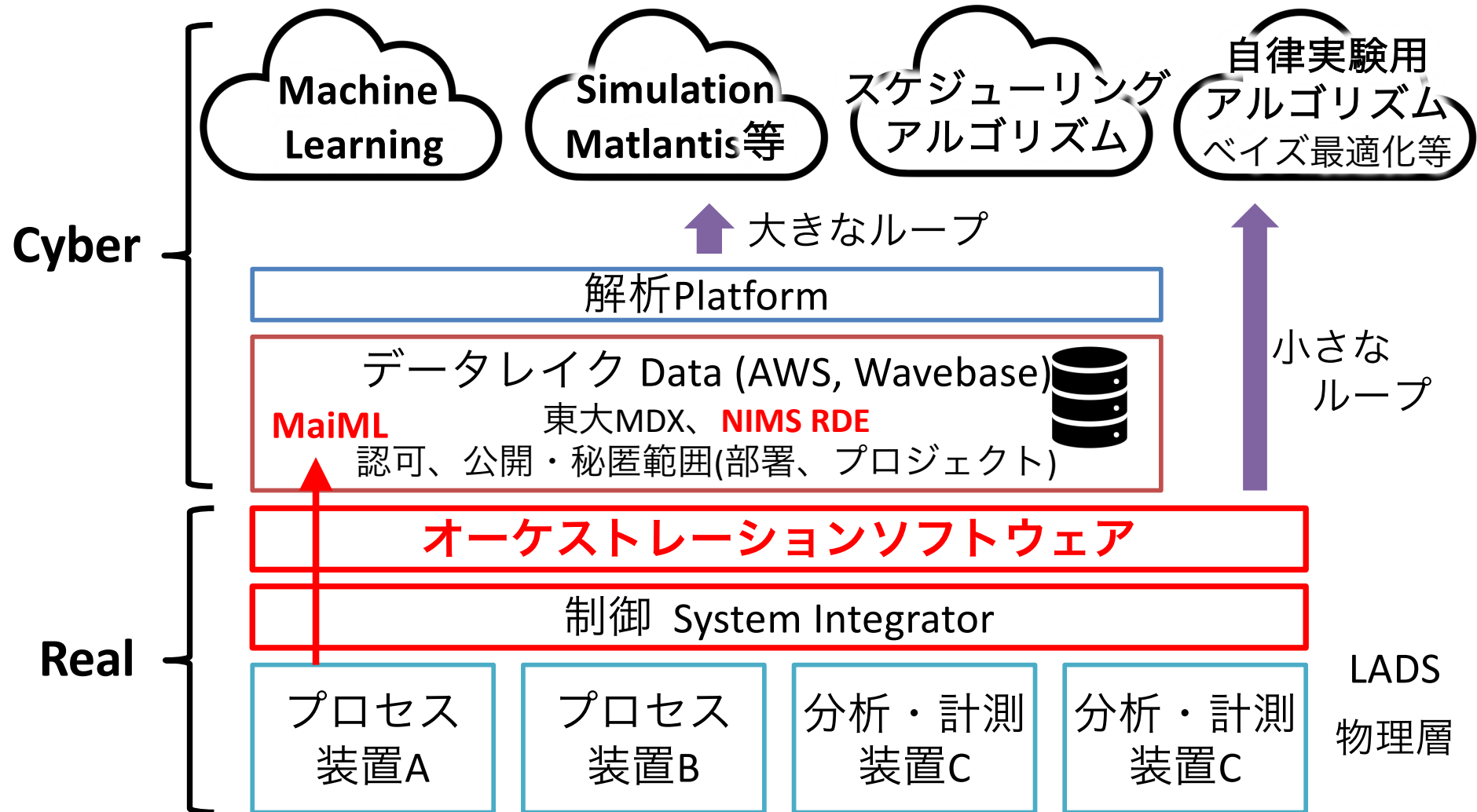
デジタルラボトリー@東京科学大学

東京科学大学では
技術職員の育成も担当

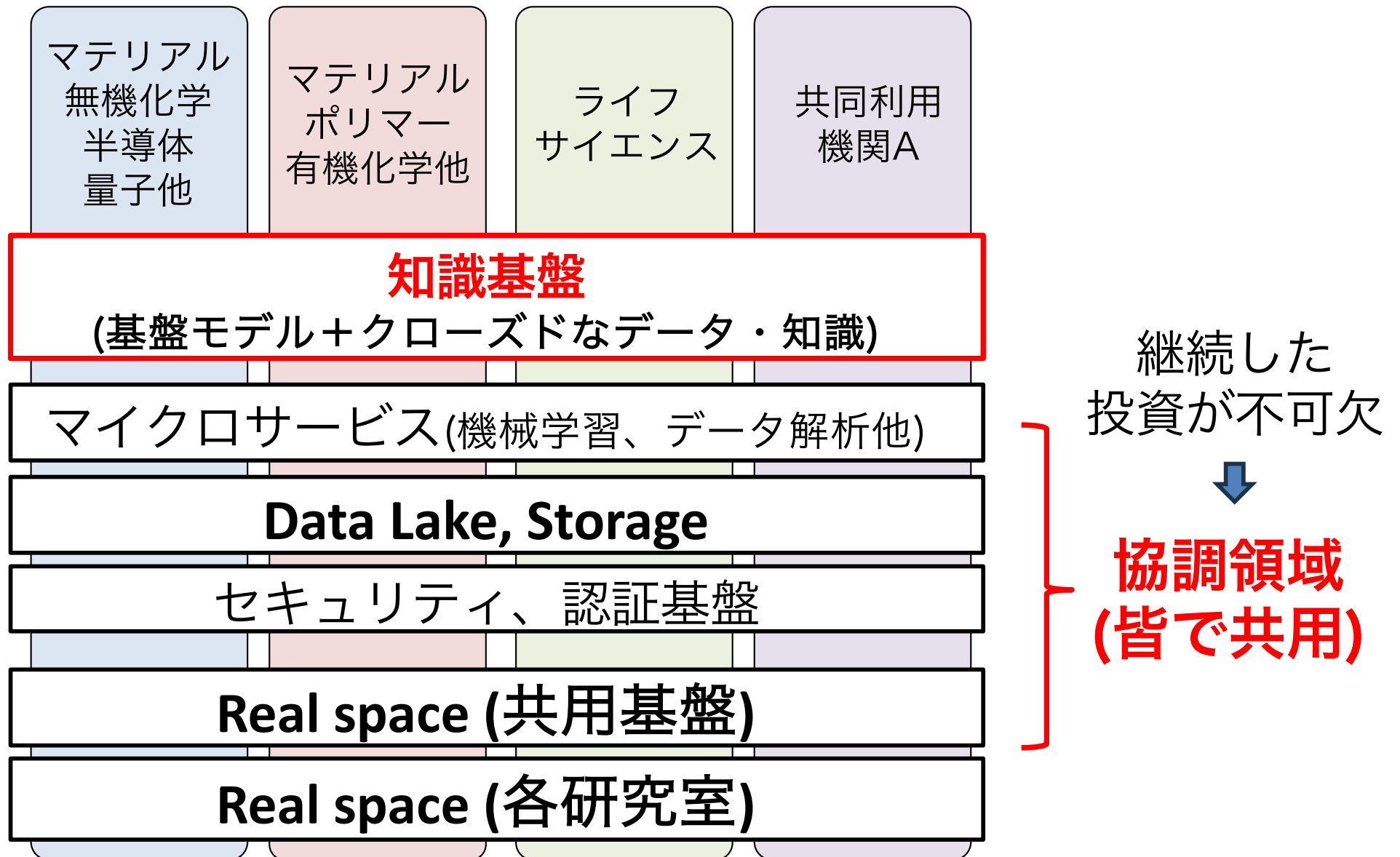


全体システムアーキテクチャー

マイクロサービス、モジュール化、疎な結合



将来像: 知識基盤へのデータの統合



研究基盤に関する近年の主要国の動向

世界の主要国・地域では、相次いで研究基盤の総合的な国家戦略を発表

国名	戦略名	策定期期	内容
米国	研究開発基盤に関する国家戦略概観 (National Strategic Overview for Research and Development Infrastructure)	2022年	- COMPETE法第1007項に基づく研究開発基盤投資に関する報告書を補完 - 今後20年間の米国内の研究開発基盤投資を最適化するための指針を提示
	大統領府レポート「米国連邦研究開発基盤」 (U.S. Federal Research and Development Infrastructure)	2024年	2022年の国家戦略概観をもとに、具体的な取り組みを提示 - 米国内の研究開発基盤の投資評価や包括的ガバナンス体制の必要性を強調 - 国際的な研究開発基盤ガバナンスにおける米国の影響力低下を警告
欧州	欧州研究基盤戦略フォーラム (ESFRI) ロードマップ2021	2021年	- EU加盟国や関連国の研究基盤投資に対する戦略的指針を提示 - 研究基盤のクラスター化および水平連携の推進を強調 41億6400万€で新たに11の大規模研究所の建設プロジェクトを発表
	欧州オープンサイエンスクラウド (EOSC) 次期構想「EOSC Federation」発表	2024年	2020-24年に約3億€を投じて開発したサービス群を域内共通サービスとして提供 - 欧州の研究基盤の統合環境実現のために、ESFRIや欧州e-基盤議会との協議を開始
英国	UKRI報告書 「英国の研究とイノベーションの基盤」 (UK's Research and Innovation infrastructure: opportunities to grow our capability)	2020年	「英国の研究を支える最先端の国家デジタル研究基盤」を達成する戦略を提示 - デジタル研究基盤に関するアドバイザリー・グループの設立を発表 - 研究インフラに関するファンド (UKRI Infrastructure Fund) の創設を発表 (2022-2025年で総額4億8100万£)
豪州	国家研究基盤ロードマップ2021 (National Research Infrastructure Roadmap 2021)	2022年	- 今後10年間の豪州の研究基盤の取り組みと重点分野を提示 「国家デジタル研究基盤戦略」の策定を提言し、2029年までに総額40億豪ドルを計上 (同戦略は2023年に策定済み) - 国家研究基盤エコシステムのためのアドバイザリー・グループの設立を提言
カナダ	デジタル研究基盤戦略 (The Digital Research Infrastructure Strategy)	2018年	- デジタル研究基盤の構築に、2019-2024年総額5億7,250万カナダドルを計上 - 既存の研究基盤整備組織とは別に、新たにデジタル研究アライアンス (Digital Research Alliance of Canada) を設立

NII 山地一禎さんより

実際の効果について

- 実験スピードの向上: 何十倍、何百倍
- 探索空間の拡大: 何十倍、何百倍
 - データ活用による新発想の獲得
- 働き方の変化: より柔軟な働き方へ
- 人口減への対応
 - 技術継承
 - 実質的な研究者数の増大

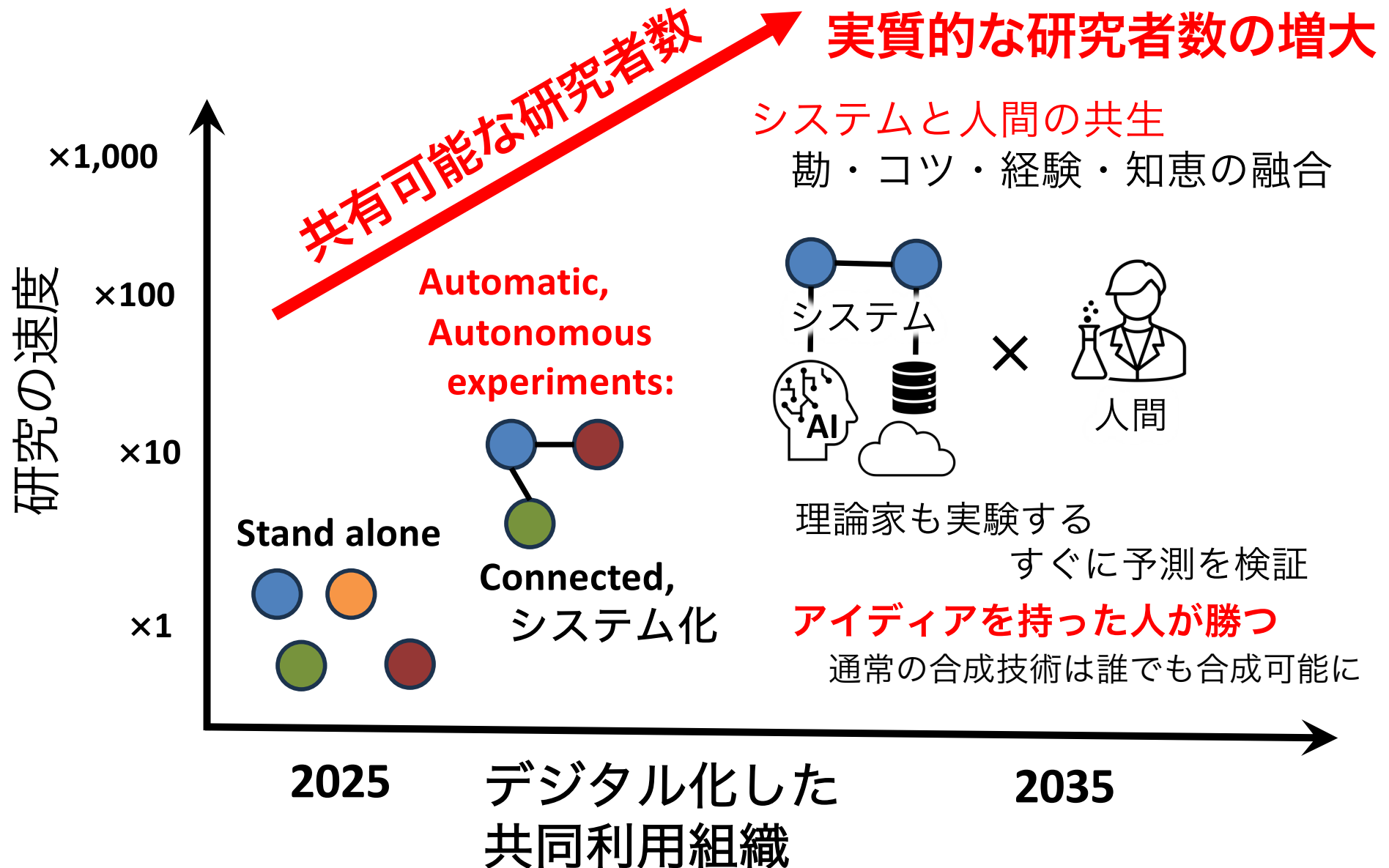
知識基盤の構築に向けて不可欠

働き方の変化



研究者、技術職員は、本来の仕事へ
人間にしかできない、創造性の高い仕事へ

Democratization of Science (科学の民主化)



【重要】カナダ政府の要求項目と コンソーシアムの要求項目の違い

1. カナダ政府が求めるもの

– “材料としての数値”ではない

– **研究能力向上**を求める→世界への**影響力向上**

- 育成した人材の数、研究コミュニティ育成、共同研究の推進、ワークショップへの参加者、獲得した研究資金(企業からも)、ベンチャー企業創出、海外との交流数、研究領域の創出、他

**【日本】基盤構築への
継続的、かつ、十分量の投資**

2. トロント大プロジェクトとして求めるもの

– **材料特性の数値**を求める

1. 研究能力向上と2. 最先端材料開発を**切り分け**、
戦略的に進めることが肝要

→ 研究基盤強化として、**研究能力向上にまず力を入れるべき**
→ それが材料特性につながる

- 
1. あるべき姿とデジタル化の動機
 2. 世界の動向と日本の強み
 3. 研究基盤のあり方についての提言
 4. 実際にどのように導入していくのか？

自動・自律実験技術を導入するのに 適した実験とは: 課題設定

- マニュアルが整備され、再現性が高い
 - = ワークフローが明解で個人差が少ない
 - さらに実験ステップ数は少ない方が良い
- 技術の発展が少ない
 - すぐに陳腐化しない
- 多くの人が時間を費やしている作業
 - 費用対効果

汎用技術へ適用: まずは自動化から

ステップ1は単一工程の自動化から！

Workflow



ボトルネック

→ ロボット化



デジタル
データ

一つ一つのプロセスを自動化
→ 最後につなげて自律化

人材不足

- 費用対効果の算出
 - 実現にかかる時間の算出
- ができる人材がない

- 「研究者が“楽”になる」ために、何をすれば良いのか検討する
- まずは小さな成功から： 人間の手が入ってもいいので気楽に

単に人間の作業を置きかえるだけではなく、
より成果が出るプロセスに転換、そして、データ活用

どのように構築するのか

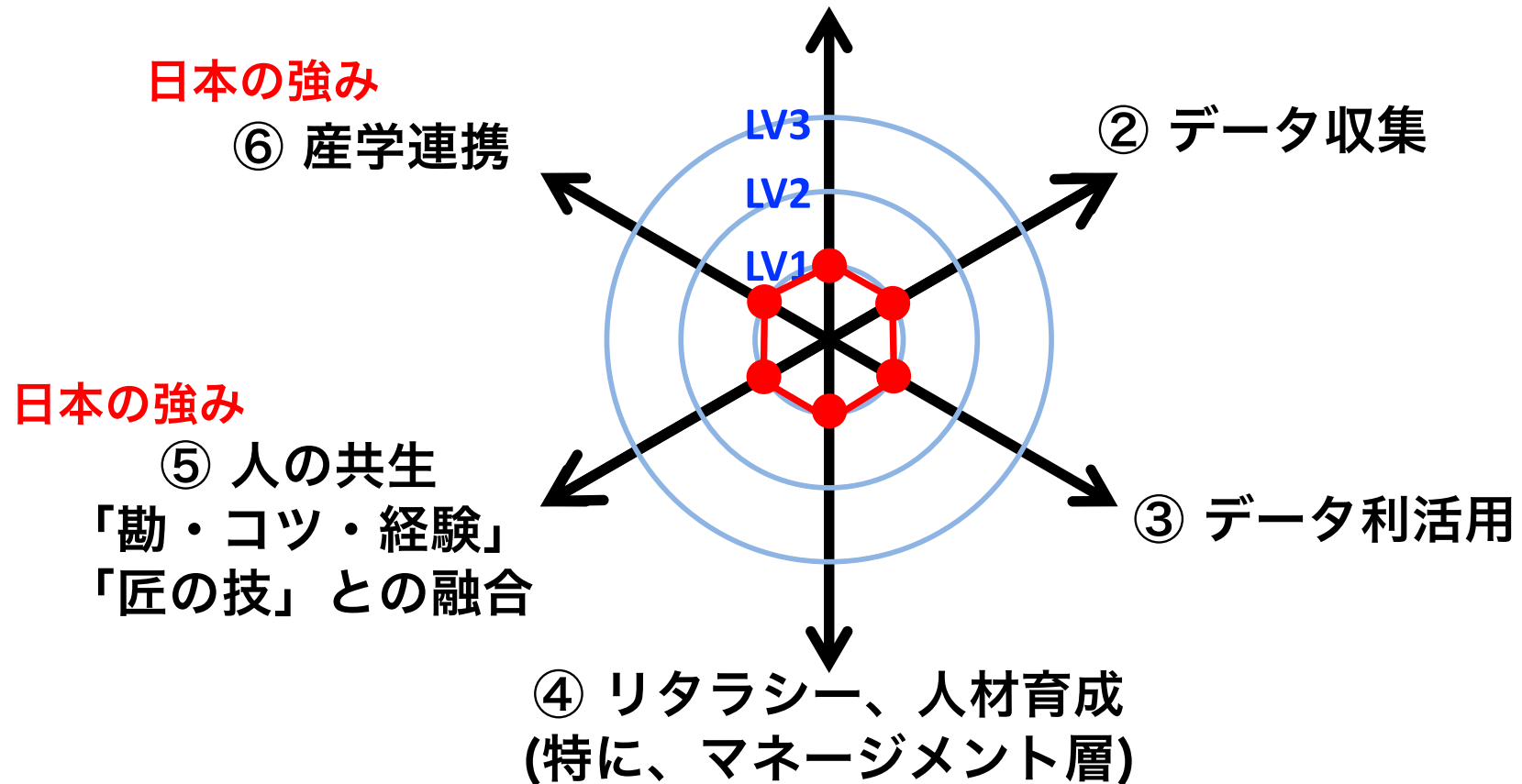
1. 以下の5つを統合 (→ チームを作る)
 - ① 化学・材料の研究者
 - ② 全体をシステムとして動かす
ソフトウェア・ハードウェアエンジニア(生産技術部門)
 - ③ ベイズ最適化などの情報科学の技術
(マテリアル実験用にチューニングされている)
 - ④ 物質合成装置のハードウェア (ロボット動作の制御系を含む)
 - ⑤ 分析装置のハードウェア
2. モジュール化
3. 最初に全体設計をしておく

最初は①がリーダーだが、
②が次第にリーダー役となっていく

デジタル化に向けたステップ

① 国として戦略立案

企業の研究開発力強化戦略、業界団体の戦略



第六期科学技術・イノベーション基本計画でレベル1まで完了
高みに向けて、一歩ずつ進める必要あり

新たな物質観の創造へ

質の転換

俯瞰的な視点

学理

様々な新物質の情報

新物質探索の
新領域

実験の自動化・自律化により生成された
大量のデータを有効活用し、
未知なる領域へ挑む

新たな領域を探索する
進化したAI

これからの新物質探索

自動化・自律化実験により
新物質へ素早く到達

効率化

目的の新物質

シミュレーション、データによるナビゲーション

ロボットによる実験の自動化・自律化

研究者

手作業による実験

研究

これまでの新物質探索

勘・コツ・経験と知識にのみ頼った研究

補足資料

拠点 = デジタル化の“工作室”

1. 相談を受け、一緒に試作を行う

- 課題設定を支援
- インフォマティクス、ロボットの専門家、技術職員が協力
 - 技術職員: 東京科学大学では一杉Gで育成中(鈴木さん)

2. ショールーム機能: 自動実験やロボット動作などを試す

3. 最先端の研究開発「皆が利用できる自動実験システム」

- 民主化に向けて、共通性の高い実験項目に関して
- 大きなループに向けたソフトウェア開発: 最先端の研究開発方法の創成
- 高い計算シミュレーション能力

4. 標準化の推進

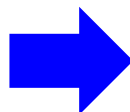
5. 世界の頭脳循環に入れるよう、情報発信、人材交流

6. 人材育成

7. 受託研究とデータ・ノウハウの蓄積、データの利活用

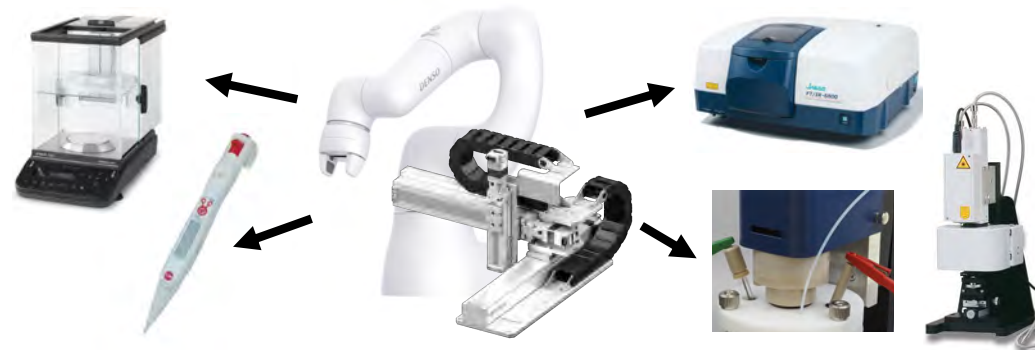
誰もが使える自動・自律実験に向けて(民主化)

大規模・高額な
自動・自律実験システム



小型・安価な実験システム

個別の自動実験装置を安価なロボットで連携



例: 基本実験操作モジュール

試薬の秤量・混練・溶解、電極スラリーの塗布・乾燥
回転電極測定、吸収スペクトル測定、電気抵抗測定

1. モジュールを組み合わせ、
自在にシステムを組む
2. システムを統合制御する
使いやすいソフトウェアが必須
(オーケストレーションソフトウェア)
3. 標準化を進める
試料サイズ(1cmφ、1cm角)、
試料ホルダ、通信プロトコル、データ形式



Chemspeed

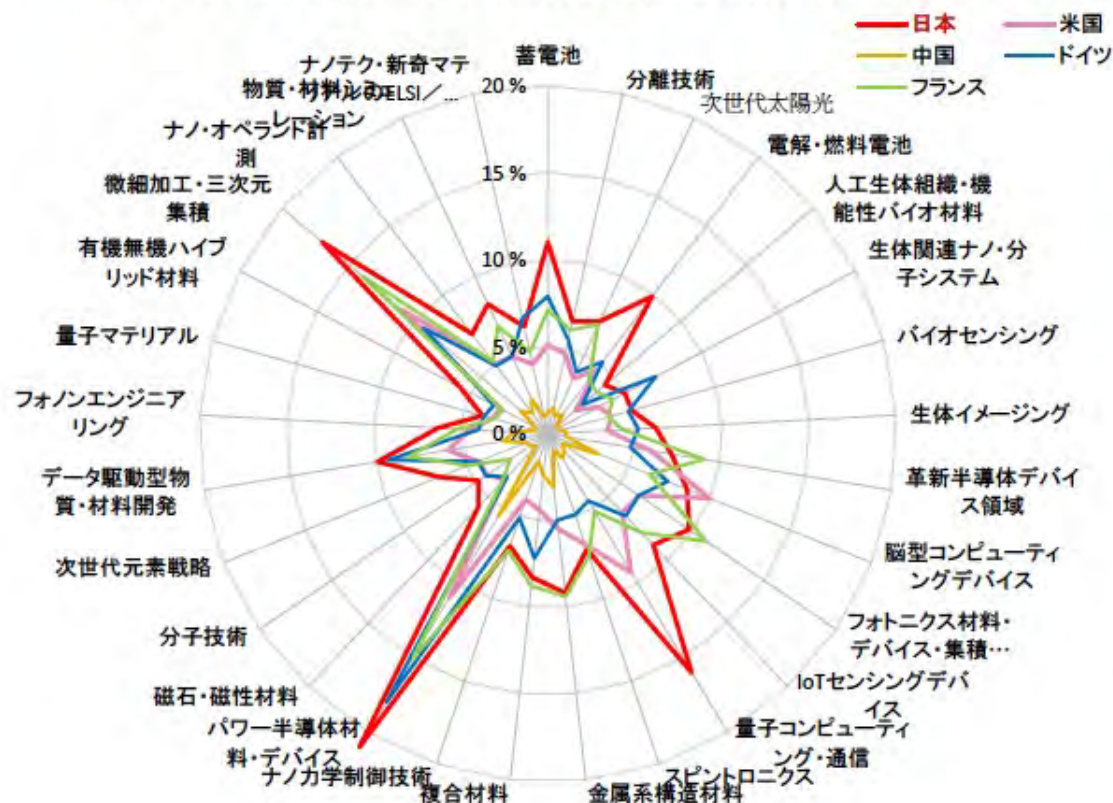
世界最先端の方法論と成果創出

装置共有を進めるが
一部の人しか使いこなせない
(ペイン)

マテリアル分野における学界と産業界のつながり

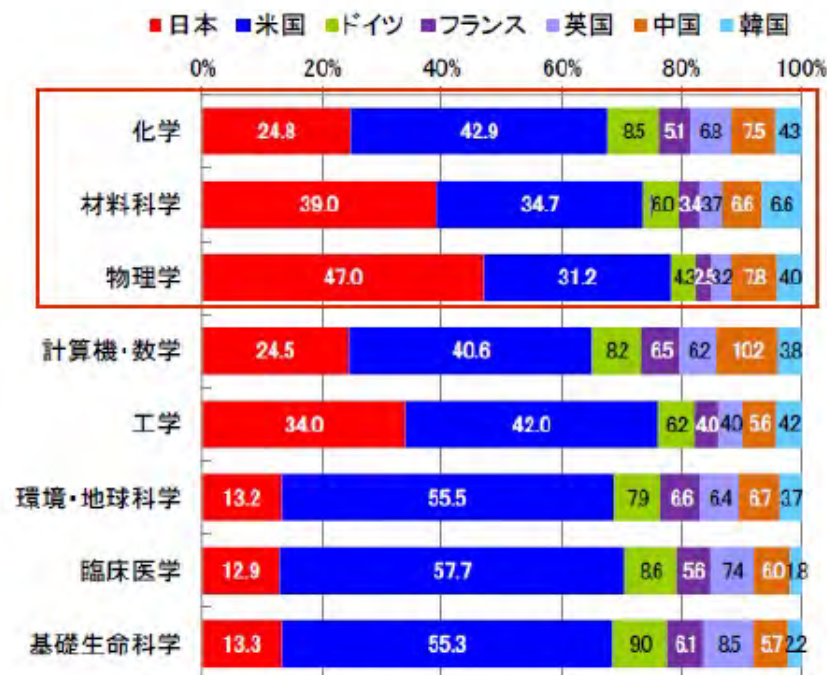
日本のマテリアル分野の論文は、企業共著率が主要国に比べて総じて高く、また、自国のパテントファミリーで多く引用されており、基礎研究から実用化まで学界と産業界が密に連携していることが伺える

マテリアル分野における領域毎の論文の産学の共著率（2012-2021）



【出典】JSTCRDS「研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野（2023）」2023年をもとに文部科学省作成

日本の論文を引用しているパテントファミリー（国際特許出願願）出願者の所属国



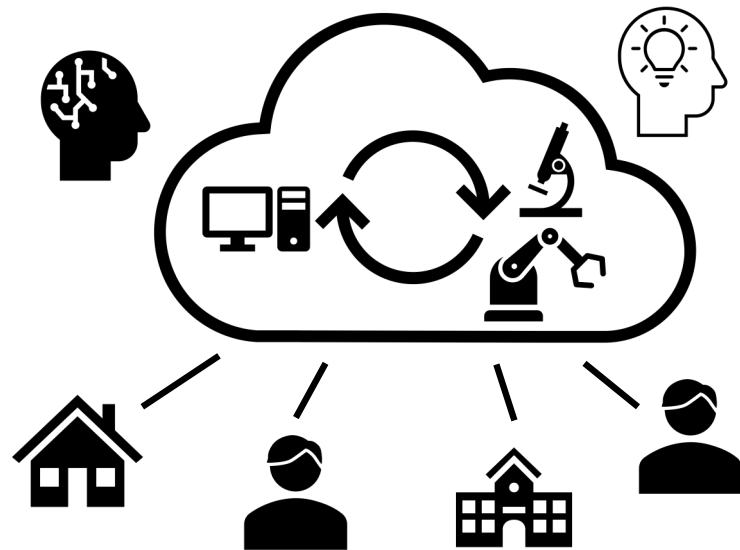
欧州特許庁のPATSTAT(2022 年秋バージョン)、クラリベイト社Web of Science XML(SCIE, 2022 年末バージョン)、クラリベイト社 Derwent Innovation Index(2023 年3 月抽出)を基に、科学技術・学術政策研究所が集計。

【出典】文部科学省科学技術・学術政策研究所、「科学技術指標 2023」
https://www.nistep.go.jp/sti_indicator/2023/RM328_4a.html
 2023年8 月をもとに文部科学省加工

もう一つのループ: 研究者は常にチャレンジを!!!

**新しいチャレンジ
ドメイン知識の獲得**

AIロボット
実験システム



研究者は

創造性が高い仕事

に取り組む

さらなる高みへ

方向性の決定

五感(肌感覚)を活用する研究

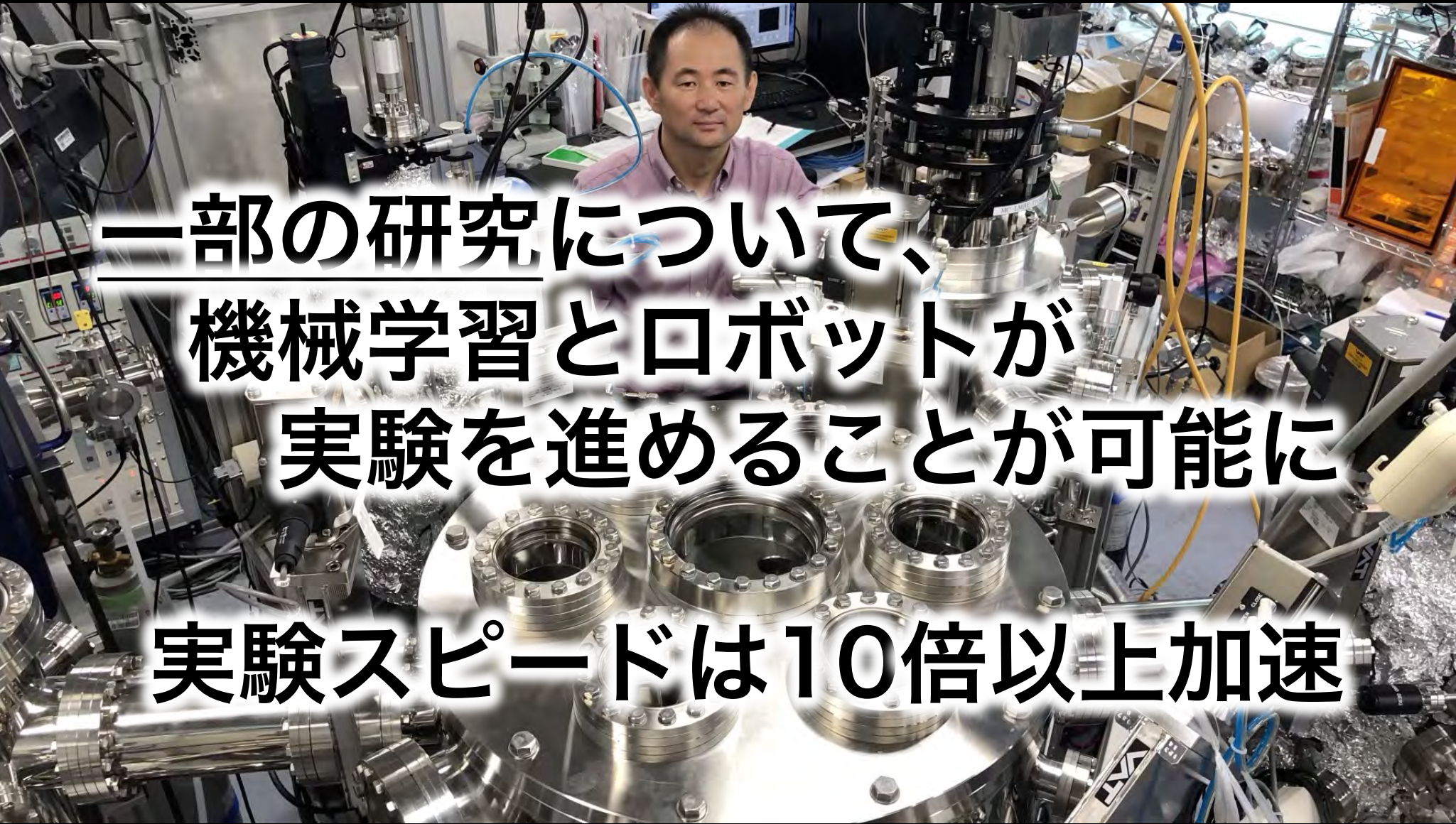
「暗黙知」をシステムに埋め込む



全自動・自律的に材料を探索する

JST-CREST/さきがけ/MIRAI
の支援による

APL Mater. 8, 111110 (2020)



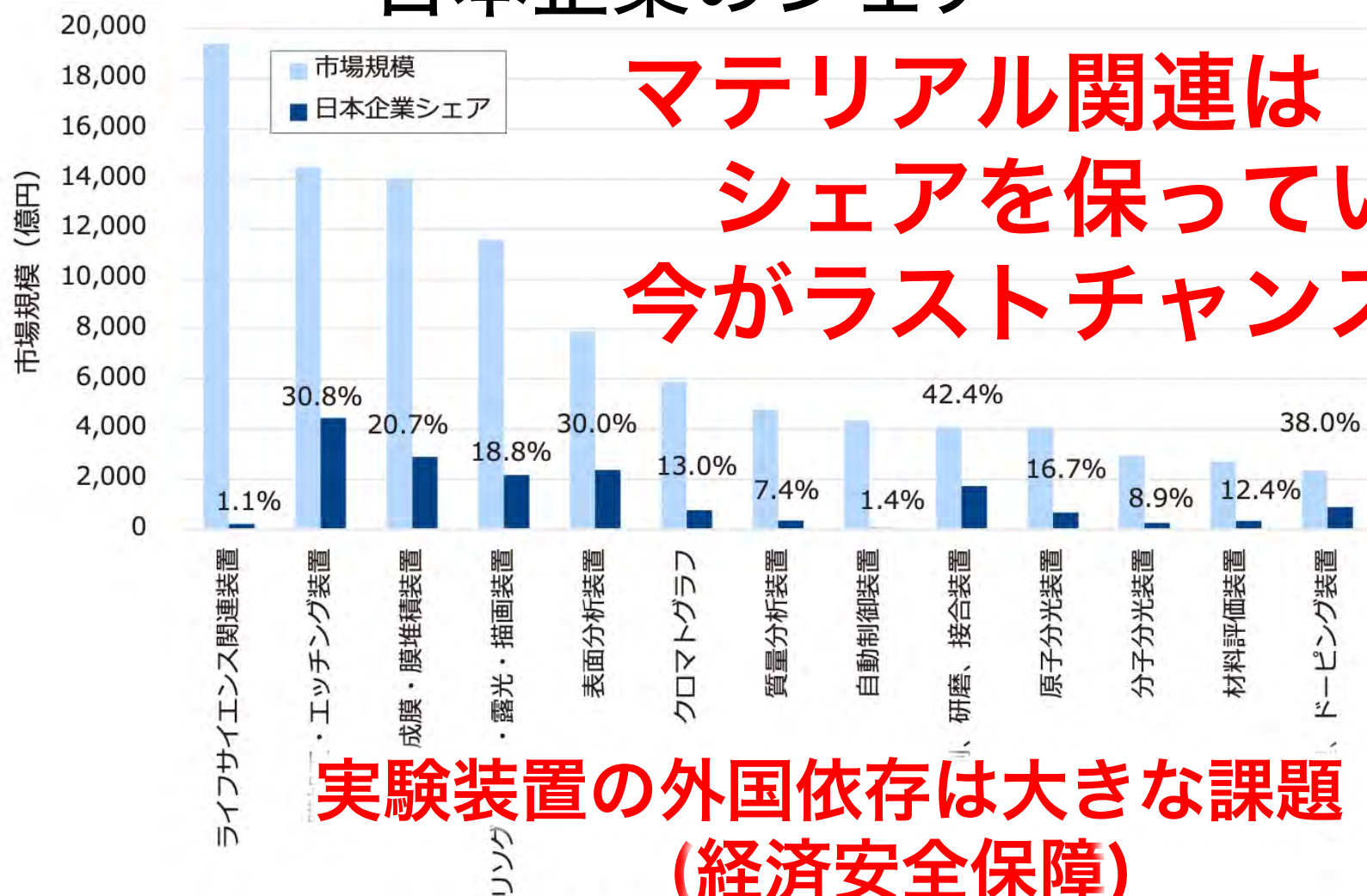
一部の研究について、
機械学習とロボットが
実験を進めることが可能に
実験スピードは10倍以上加速



ロボットは50万円 - 200万円で購入可能
ティーチングも容易

**40社と研究会を設立、9社と協働ラボを設立
国内で複数のコンソーシアムが立ち上がりつつある**

グローバル市場における理化学機器 日本企業のシェア



**マテリアル関連は
シェアを保っている
今がラストチャンス**

**実験装置の外国依存は大きな課題
(経済安全保障)**

→ 国内理化学機器企業



研究機器・装置開発の諸課題

新たな研究を拓く機器開発とその実装・エコシステム

との協調が急務

<https://www.jst.go.jp/crds/report/report04/CRDS-FY2020-RR-06.html>