

Symposium | Co-Innovation Program (CIP) : Revolutionizing chemical research through AI, automated computation, and autonomous experimentation

📅 Wed. Mar 26, 2025 9:00 AM - 11:40 AM JST | Wed. Mar 26, 2025 12:00 AM - 2:40 AM UTC 🏢

[E]F401(F401, Bldg. 4, Area 2 [4F])

[[E]F401-1am] Revolutionizing chemical research through AI, automated computation, and autonomous experimentation

Chair, Symposium organizer: Zen Miyazaki, Hikaru Takaya, Yoshiaki Sakatani, Kazuhiro Matsumoto

『AI×自動計算×自動実験』を主題として、AI・ハイブリッド・シミュレーション、ロボティクス、自動・自律実験分野の最前線で活躍する研究者を講師に迎え、最新の研究成果について解説して頂きます。2023年から2024年のわずか1年間にGoogle DeepMind社をはじめとする巨大企業や卓越研究者をリーダーとする国際コンソーシアムが巨額の資金援助・調達を受けて、革新的なデータ駆動型材料研究手法を開発しており、この分野でのトップの座を巡る競争が激化しています。本企画では、各講演者からの問題提起を通じて、聴講者一人一人が「化学研究のデジタル変革」や「計算科学と自動実験の融合」がもたらすデータ駆動型化学研究のあり方とその可能性について深く考えよう機会を提供し、本分野での後継が培養されている我が国において、今何をすべきかを考える気づきの機会としたいと思います。

本セッションは午前、午後、夕刻に実施されます。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

9:00 AM - 9:10 AM JST | 12:00 AM - 12:10 AM UTC

Opening Remarks

🇯🇵 Japanese 🇯🇵 Keynote Lecture

9:10 AM - 10:10 AM JST | 12:10 AM - 1:10 AM UTC

[[E]F401-1am-01]

Materials development driven by data science x automation

○Junichiro Shiomi¹ (1. University of Tokyo)

10:10 AM - 10:20 AM JST | 1:10 AM - 1:20 AM UTC

[1E_F40101-03-3add]

Incubation Time

🇯🇵 Japanese 🇯🇵 Invited Lecture

10:20 AM - 10:50 AM JST | 1:20 AM - 1:50 AM UTC

[[E]F401-1am-02]

Self-driving Lab and Polymer Informatics in Polymer Material Development

○Masanobu Naito¹ (1. National Institute for Materials Science)

10:50 AM - 11:00 AM JST | 1:50 AM - 2:00 AM UTC

[1E_F40101-03-5add]

Incubation Time

🇯🇵 Japanese 🇯🇵 Invited Lecture

11:00 AM - 11:30 AM JST | 2:00 AM - 2:30 AM UTC

[[E]F401-1am-03]

Optimization of Materials and Processes Using Digital Technology: Focused on Copolymerization Reactions in Flow Synthesis

○Mikiya Fujii^{1,2,3} (1. DSC, NAIST, 2. NAIST, 3. CMP, NAIST)

11:30 AM - 11:40 AM JST | 2:30 AM - 2:40 AM UTC

[1E_F40101-03-7add]

Incubation Time

データサイエンス×自動化が切り拓く材料開発

(東大院工・理研 AIP・統数研) 塩見 淳一郎

Materials Development Pioneered by Data Science x Automation (*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*) ○Junichiro Shiomi

Materials Informatics (MI) is a scientific discipline that combines materials science and data science to accelerate materials development and has been growing rapidly in recent years with the expansion of materials data and the development of techniques for modeling and optimizing composition/structure and property/function through machine learning. Its fundamental significance lies in the exploration of materials at speeds, horizons, and dimensions that surpass those of humans, through black box learning of large-scale data. This requires large-scale data, but data generation for materials is generally expensive, so data generation has often been done computationally. On the other hand, large-scale data generation including process parameters in experiments is still indispensable because the materials calculation does not guarantee the accuracy when the complexity of composition and structure increases, because many materials are in a metastable state and their structure and physical properties are highly dependent on the fabrication process. Therefore, in recent years, there have been widespread attempts to automate the experimental fabrication, forming, and evaluation of materials. In this talk, the status of automated experiments for material development, which is rapidly developing worldwide, will be reviewed, and the differences in ideas in automating the process will be discussed. As case studies, two automated experiment systems being developed in the author's laboratory will be introduced and discussed. The first is a system for the development of thermal radiative coatings, which uses an orthogonal robot to automatically mix base material and filler, deposit the mixture, and measure its optical spectra. The second is a system for the development of polymer composites, which uses a robotic arm for more versatile specifications. Using these examples, we will discuss the accuracy of the machine learning model when considering process parameters and its data size dependence, as well as the optimization efficiency when closed-loop autonomy including machine learning is adopted, in addition to the above ideas in building automated systems.

Keywords : Materials informatics; Automation; Experiment in the loop; Large-scale data

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) は、マテリアルサイエンスとデータサイエンスを組み合わせる材料開発を加速する科学分野であり、近年、材料データの拡充や、機械学習による組成/構造や物性/機能のモデリングや最適化技術の進歩によって、急速に発展している。その根幹的な意義は、大規模データのブラックボックスモデリングにより、高い予測精度で、人間を凌駕するスピード、視野、次元での材料を探索することにある。それには、大規模データが必要となるが、材料のデータ生成は一般にコストが高いため、データ生成は計算科学的に行われることが多かった。一方で、材料の計算は組成や構造の複雑性や物性の高次性が増すと精度が担保されないこと、

あるいは、多くの材料は準安定状態にあり、構造や物性が作製プロセスに大きく依存することから、やはり実験におけるプロセスパラメータも含めた大規模データ生成が必須である。そのため、近年、実験による材料作製、成形、評価を自動化する試みが広く行われている。本講演では、まず、世界的に急速に発展している材料開発における実験自動化の状況をレビューした上で、自動化する際の思想の違いを議論する。事例として、著者の研究室で開発している2つの自動実験システムを紹介しながら議論を進める。1つ目は熱放射塗料開発のためのシステムであり、直交ロボットを用いて母材とフィラーの混合と塗布、および光学スペクトル測定を自動的に行う。2つ目は、ポリマー複合材開発のためのシステムであり、ロボットアームを用いてより汎用的な仕様となっている。これらの事例を用いて、上記の自動化システム構築における思想に加えて、プロセスパラメータを考慮した際の機械学習モデルの精度やそのデータサイズ依存性や、機械学習を含めてクローズドループ自律化した際の最適化効率などを議論する。

高分子材料開発における自律型実験とポリマーインフォマティクス

(NIMS¹) ○内藤 昌信¹

Self-driving Lab and Polymer Informatics in Polymer Material Development

(¹*Research Center for Macromolecules and Biomaterials, National Institute for Materials Science*)

○Masanobu Naito¹

AI and IoT Revolutionizing Material Discovery

The integration of AI and IoT-enabled systems is transforming material discovery through Self-Driving Labs (SDL), a group of autonomous experimental systems. Over the past five years, SDLs have rapidly spread across various material fields, driven by the rise of materials informatics (MI). These labs address the need for comprehensive evaluation of physical properties and material performance, which are constantly evolving. Our SDL employs an agile development approach, combining diverse AI tools and services without rigid technical specifications. Leveraging NIMS's "DICE" platform, which provides electronic lab notebooks, data analysis AI, IoT tools, and data servers, we accelerate system development and enhance flexibility. Traditional material evaluation required significant time, effort, and craftsmanship, hindering high-throughput development. To overcome this, we developed MI-driven automated systems, enabling the evaluation of over 10,000 samples annually. This has led to advancements in adhesive materials, superhydrophobic surfaces, and gradient materials combining multiple properties. In this presentation, I will share recent developments and case studies demonstrating the effectiveness of SDLs and MI tools in creating innovative materials.

Keywords : *Self-Driving Lab; Machine Learning; Polymer synthesis, Mechanical Property*

人工知能 (AI) がレシピをつくり、IoT 化した自動実験装置が自律的に材料探索を行う。そんな SF のような時代がすぐそこまで来ている。そのコア技術となるのが、AI と連動した自動自律ラボ (Self-Driving Lab, SDL) とよばれる自動装置群である。マテリアルインフォマティクス (MI) の浸透に呼応するように、ここ 5 年ほどで様々な材料分野に急速に広まりつつある。材料開発の現場では、合成のみならず、物性・材料特性までを総合評価する必要がある。また、先端材料に求められる性能・特性は刻々と変化する。そのため、SDL には、臨機応変に対応できるロバスト性が求められる。演者らの SDL では、これらの課題解決のため、技術仕様を予め固めずに、様々な AI ツールやデータサービスを組み合わせていくアジャイル的な開発手法を採っている。その AI ツールやデータベースとして、NIMS が整備を進める材料プラットフォーム「DICE」が提供する電子ラボノート、データ解析 AI、IoT 化ツール、データサーバなどの各種モジュールを利用できることも、システム開発の迅速化に大きなメリットとなっている。また、従来の材料評価は、サンプル作製や測定に多くの時間・労力・職人技などが求められ、材料開発のハイスループット化を困難にしてきた。この問題に対し、本プロジェクトでは、MI 駆動研究に特化した装置を開発することで、合成から材料評価までの一連の工程を自動化・高速化することに成功した。これにより年間 1 万以上のサンプル数を評価できるようになり、すでに接着材料や超撥水材料、また複数素材の特性を取り入れた傾斜材料などの新たな機能性樹脂材料の開発で威力を発揮している。本発表では、スマートラボをはじめとした MI ツールを駆使しながら、新規材料の開発について、いくつかの事例を挙げながら、最近の我々の取り組みについて紹介する。

デジタル技術による材料・プロセス最適化 ～フロー合成による共重合反応を中心に～

(奈良先端大物質¹・奈良先端大 DSC²・奈良先端大 CMP³) ○藤井 幹也^{1,2,3}
Optimization of Materials and Processes Using Digital Technology: Focused on
Copolymerization Reactions in Flow Synthesis (¹*Graduate School of Science and Technology,*
NAIST, ²*DSC, NAIST,* ³*CMP, NAIST*) ○Mikiya Fujii^{1,2,3}

Digital technologies such as simulations and machine learning have gained attention in materials development, particularly in "Materials Informatics" and "Cheminformatics." These fields have advanced significantly, with IT companies like GAFAM also engaging in materials research. Additionally, "Process Informatics," which applies machine learning to process control, has enabled the automation of optimization and efficiency improvements traditionally reliant on tacit knowledge.

This talk introduces examples of surrogate models for quantum chemical calculations and generative models for materials with desired properties. Recent research focuses on precise copolymer synthesis via flow synthesis, combining machine learning with quantum chemical calculations to enable product prediction and process optimization. Multi-objective Bayesian optimization has also been used to analyze trade-offs in copolymer properties, elucidating the origins of the Pareto front. These results will be presented during the lecture.

Keywords : Materials Informatics, Process Informatics, Quantum chemistry, Flow polymerization, Generative Models

近年、材料開発におけるデジタル技術の活用が注目されており、シミュレーションや機械学習を基盤とする「マテリアルズ・インフォマティクス」や「ケモインフォマティクス」として知られている。これらの分野では、北米を中心に機械学習を用いた手法が発展しており、GAFAMをはじめとするIT企業も材料の研究開発に着手している。さらに、材料開発においてはプロセスも重要であり、プロセス制御に機械学習を活用する「プロセス・インフォマティクス」という取り組みが進展している。これにより、研究者や技術者が暗黙知として行ってきた最適化や効率化を機械的に実現することが可能となった。

本講演では、講演者が取り組んできた機械学習を用いたサロゲートモデルや、所望の物性を示す材料の生成モデルの例を紹介する。また、最近の研究として、フロー合成法を用いたコポリマーの精密合成、生成物予測、およびプロセス最適化に取り組んでおり、機械学習手法と量子化学計算を組み合わせることで、コポリマー合成の予測や制御が可能であることを実証した。さらに、多目的ベイズ最適化を用いることで、複数の所望のコポリマー物性間に生じるトレードオフを示すパレートフロントの物理化学的起源についての解析結果も得られている。当日は、これらの成果について詳細を紹介する。