

オープンサイエンスは

“Laboratory as a Service”を生み出し、  
研究者を「自由」にする

一杉 太郎

東京大学 理学系研究科 化学専攻 教授  
東京工業大学 物質理工学院 特任教授

内閣府「マテリアル戦略」有識者

# 概要: ゲームチェンジが起きている

## 1. 産業競争力・研究競争力の観点

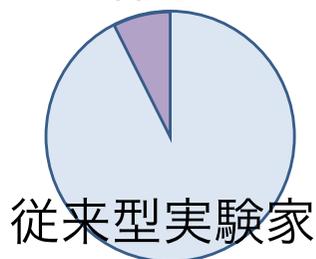
- 「ラボのシステム化」「理化学機器における標準化」「データ解析プラットフォーム」が競争力を決める

## 2. 研究に専念できる時間の確保と、行動様式変容の観点

- 研究者の場所と時間の壁を壊す、  
理論家と実験家の壁を壊す
- 研究者の新しいリテラシー
  - AIロボットの限界と可能性を知る

創造性が高い研究へ

計算・MI活用



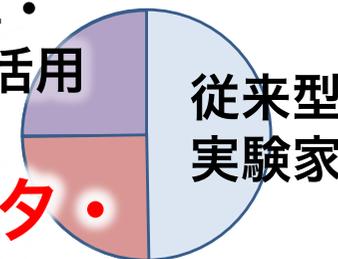
現状

繰り返し実験に頼る、  
単なる最適化



政策・ファンディング  
が必要

計算・  
MI活用



AI・データ・  
ロボ活用  
New type

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)

# A mobile robotic chemist

Cooper *et al.*, Nature 583 (2020) 237



- 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

# 自律実験: 実験室のCloud化

物性値を最大化せよと指令  
例: Liイオン伝導度を最大化せよ

合成条件を指示

Hitosugi  
APL Mater. (2020)

データの  
利活用

物質合成

ベイズ最適化(AI)  
(合成条件最適化)

Closed loop

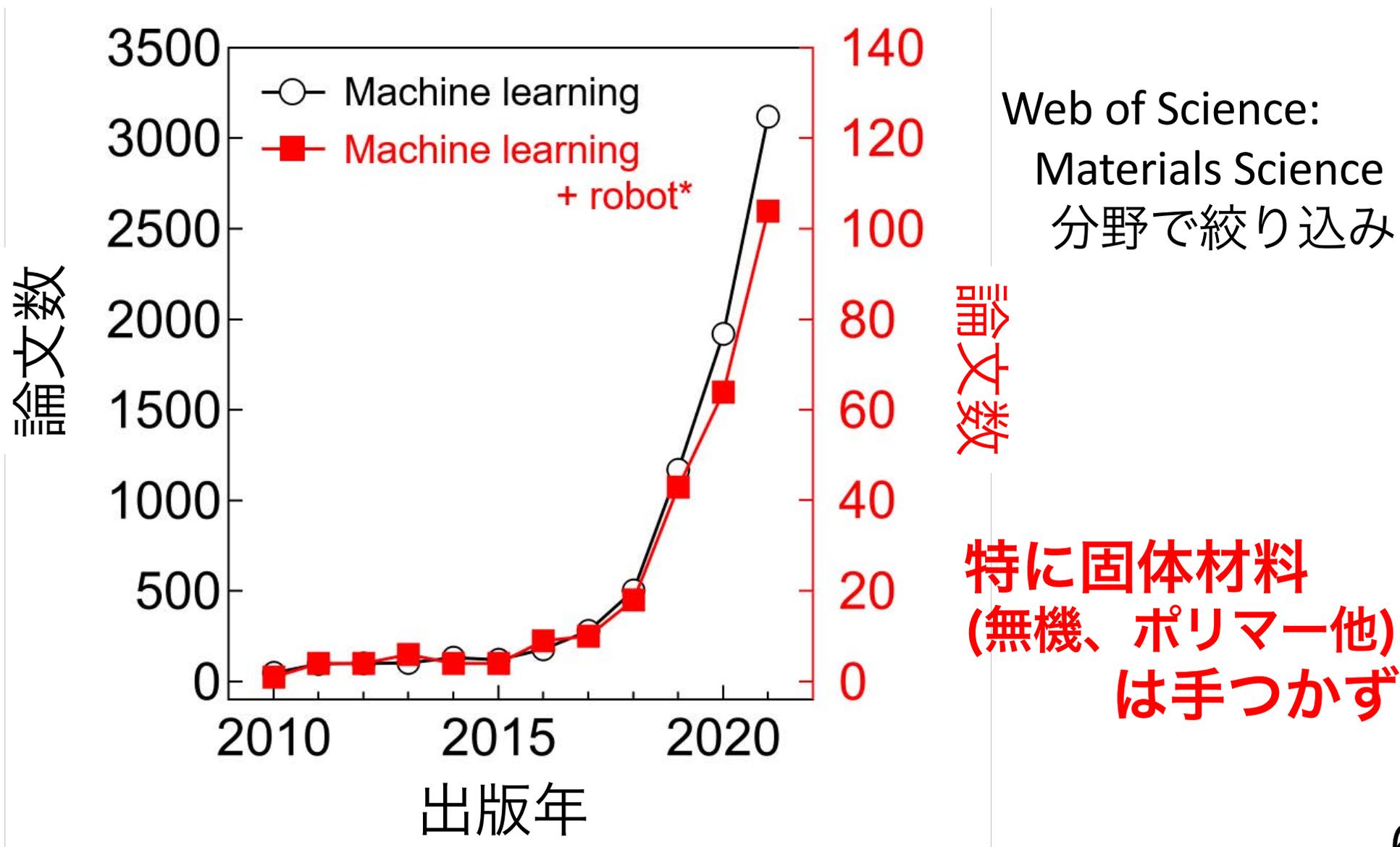
結果を報告

物性測定

研究者の場所と時間の壁を壊す、  
理論家と実験家の壁を壊す

# 今なら主導権を握ることができる

今、思い切って投資しなければ、他国が先行する: 日本は周回遅れに



# デジタル化の進展

1. 人間が指定した探索空間内を自動的・自律的に探索し、  
短期間で最適物質・材料を見つけだす

→Proof of Concept完了 2020年

時短・効率化

→広げる段階 標準化、認知度向上

- 理化学機器会社や合成に関わる企業との協力
- 臨機応変に対応する“柔らかい”ロボット技術
- 化学・材料向けの機械学習アルゴリズム

2. 人間が予想しなかった新物質の発見や、  
新しい学理を構築する

→自動化・自律実験

+マテリアルズインフォマティクス・シミュレーション

セレンディピティを生むために活用: 外挿

# 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

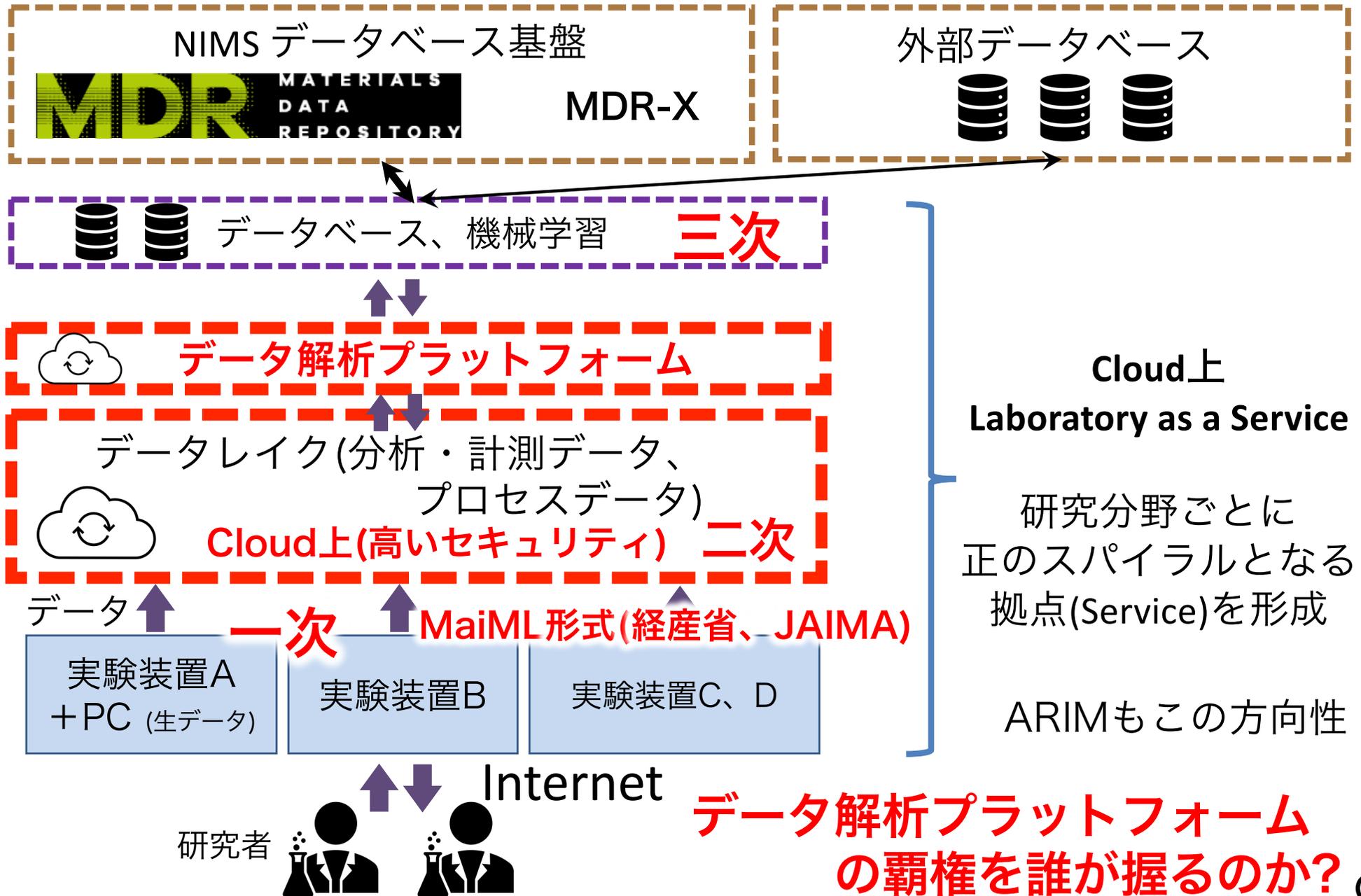
手作業による実験

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

# データの流れ



# 本当に使えるデータとは？

1. 素性が分かっている
  - 試料合成条件 → **プロセス条件自体がデータ**  
→ プロセスインフォマティクス  
→ デジタルツイン
2. 再現性が高い
3. ベストなデータだけではなく、  
低い特性を示すデータも含む

## 論点

- そのようなデータをいかに多数集めるか  
**データの収集 自動・自律実験**
- 属人的データは必ず残る(人間しかできない実験)  
→ どのようにデータ収集するのか

# なぜマテリアルDXが進まないのか？ 研究を加速するために必要なこと

## 1. 意識改革(大学、企業)→人材育成: すそ野を広げる

- 世界一多くの大谷選手(二刀流: デジタル×マテリアル)を育成
- 教育: **学部レベル**でも進める(オンラインで大学の壁を越えて教育)
- 研究者: JST-さきがけ等(若い人ほどアンテナが高い)立ち上げ  
ロボット活用の意識付け

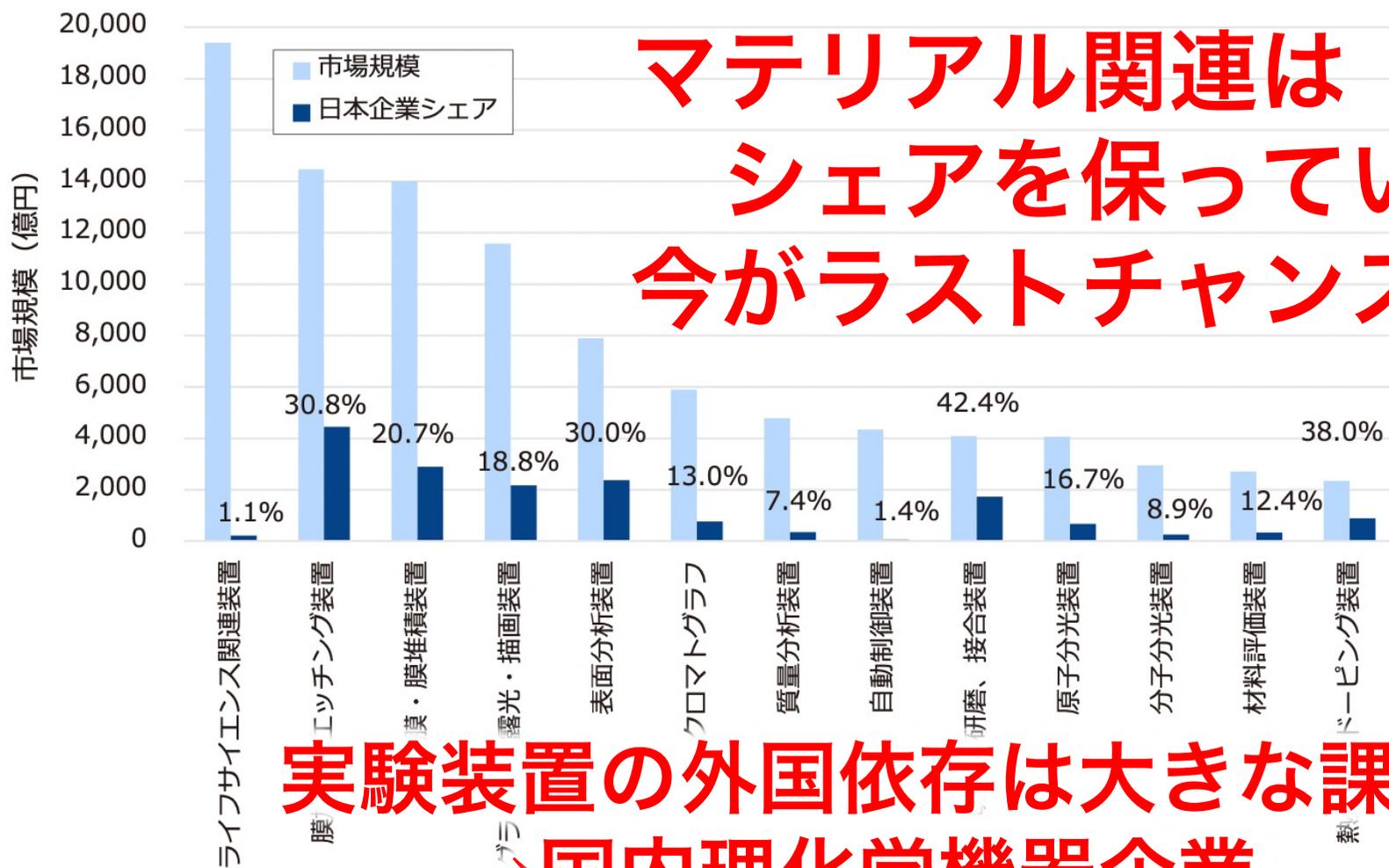
## 2. 理化学機器メーカーの変革を支援

- ラボの理化学機器がDX対応していない
- 世界のデファクトスタンダードを狙う (プラグアンドプレイに)

## 3. ラボシステムインテグレータ(SI)の育成

- 世界中のラボを日本企業が建設
- ラボSIは最初にデータに触れる→**ラボのデータを握るチャンス**  
→ これが海外企業になると産業界・学界は壊滅

# グローバル市場における日本企業のシェア



**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**

**→ 国内理化学機器企業**

**の強化が急務**

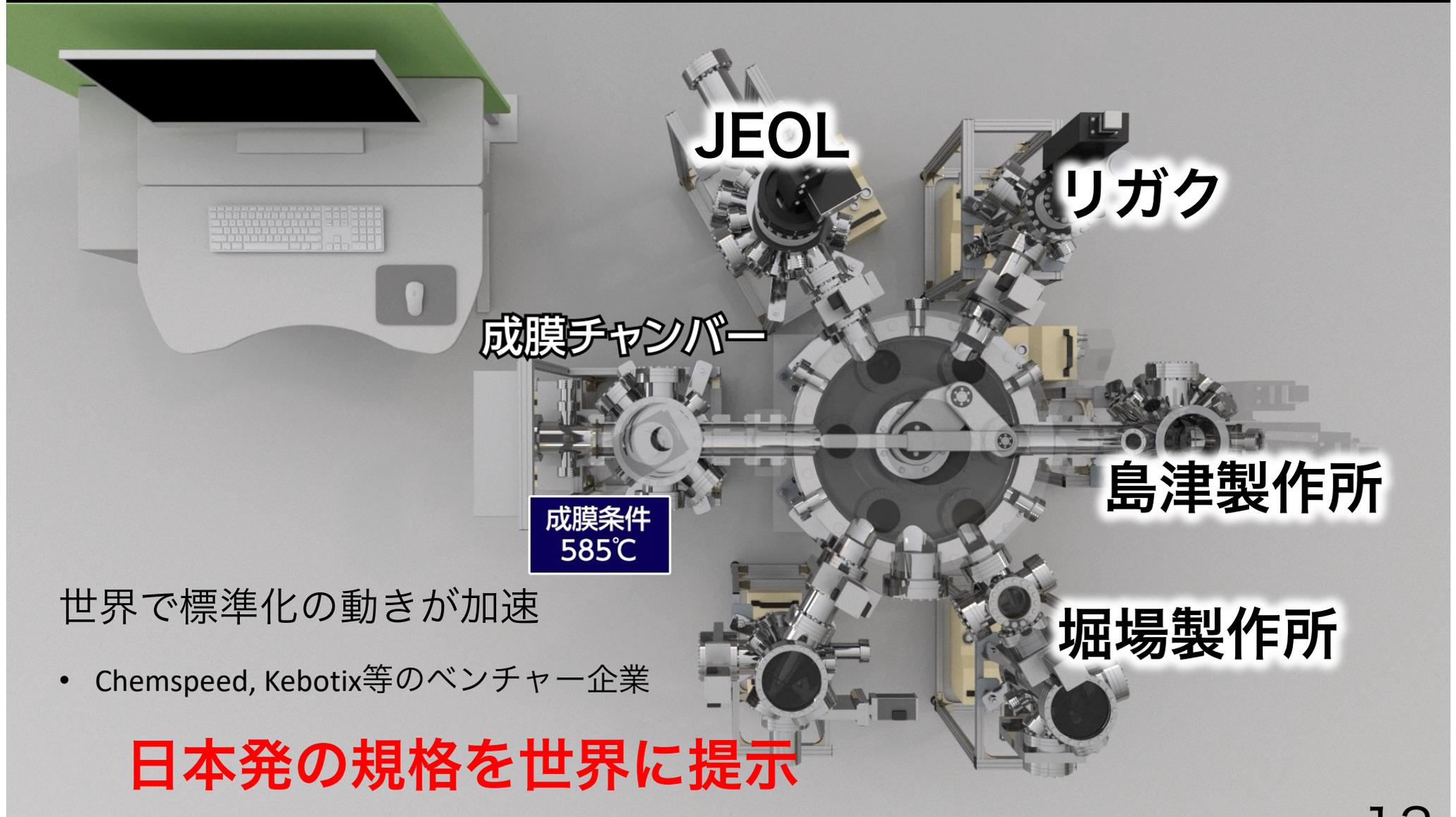


**研究機器・装置開発の諸課題**

新たな研究を拓く機器開発とその実装・エコシステム形成へ向けて

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

# 世界のデファクトスタンダードへ (システムとして実験装置を組む時代)



# Laboratory as a Service

## 1. 実験装置とデータのシェアリング

- 皆でデータ生成、皆で実験ビッグデータを解析する  
プロセスデータも(プロセスインフォマティクス)

## 2. 新マテリアルをリコメンドされる時代へ

- 研究者にはもっと**革新的・創造的な研究**が期待される

## 3. 試行錯誤する挑戦的研究へ: **探索空間の拡大**



# 日本が世界のマテリアル研究の中心へ

1. 技術・ノウハウ・データが自然に集まる拠点を形成  
→ Laboratory as a Service
2. マテリアル×デジタルニ刀流人材を世界一多く育成
3. 理化学機器メーカーと組み、自動・自律実験の  
世界のデファクトスタンダード獲得  
→ ラボSIが世界中のラボを建設する
4. データプラットフォームソフトウェア構築

すそ野が広い関連産業と強く連携し、  
我が国が世界から頼られる存在へ