

材料の計測・評価の自律化

大阪大学 小野寛太

材料の研究開発において、材料の計測および評価は不可欠なプロセスである。計測機器の性能向上とマテリアルズ・インフォマティクスや計測インフォマティクスの進展により、材料の計測・評価は新しい時代を迎えようとしている。次の時代に重要となるのは自律的な計測および計測データ解析であるとわれわれは考えており、自律的な計測・解析を行うシステムの研究を進めている。

自律化と自動化とは何が違うのだろうか。自律化の特色は自動化に加えて従来は専門家が行っていた意思決定の大部分をシステムが担うことにある。また、専門家の判断や結果の吟味などの意思決定こそが計測・評価にとって最も重要だと考えている。計測・評価の自律化を目指すためには、解決すべき問題が多数ある。それらは、熟練した人間が無意識に行っていることが多く、定式化が困難である。計測・評価の自律化により、最適な実験計画の自動策定・自動実行、計測やデータ解析の効率や再現性の向上、ヒューマンエラーの軽減、研究者のバイアスの軽減などが期待される。講演では材料の計測・評価の自律化について下記のテーマを紹介する。

- 1) 計測の自律化：最適な計測実験の実験計画をどのようにして自動策定するか [1]
- 2) 計測の自律化：計測実験はどこで止めれば良いのか [2]
- 3) インフォマティクスを用いることにより計測は高速化できる [3]
- 4) 計測データ解析の自動化：結晶構造解析とスペクトロスコーピー [4,5,6]
- 5) 計測データ解析の自律化：第一原理計算の活用と意思決定の支援 [7]

本研究の一部は JST 未来社会創造事業「共通基盤」領域、「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」により行われた。

[1] T. Ueno et al., npj Computational Materials 4, 4 (2018).

[2] T. Ueno et al., npj Computational Materials 7, 139 (2021).

[3] K. Saito et al., Sci. Rep. 9, 1526 (2019).

[4] Y. Suzuki et al., npj Computational Materials 5, 39 (2019).

[5] Y. Ozaki et al., npj Computational Materials 6, 75 (2020).

[6] Y. Suzuki et al., Sci. Rep. 10, 21790 (2020).

[7] M. Matsumoto et al., Phys. Rev. Applied 13, 064028 (2020)