

☆実験者、熟練度、実験日によるバラツキを削減！！

「ケタ違いの開発スピード」「圧倒的なコスト削減」を実現する秘策を大公開！！

新刊書籍  
2023年12月発行

# 実験の自動化・自律化による R&Dの効率化と運用方法

— AI、ロボット技術、ChatGPT、MI、ベイズ最適化、秘密計算など —

●発行日：2023年12月27日 ●体裁：A4判 545頁 ●定価：88,000円(税込) ●ISBN：978-4-86104-994-1

※大学、公的機関、医療機関の方には割引価格（アカデミック価格）で販売いたします。詳しくはお問い合わせください。

## 本書のポイント

ぜひご試読ください

- ① 担当者に自発的にデータ入力を促すにはどうするか？
- ② 異なる形式で散在している実験データの集積と活用の仕組みをどのように構築するか？
- ③ 規格も仕様もバラバラな装置群をどのように統合制御するか？
- ④ 自動実験ロボット導入へのコスト課題をどう抑えるか？
- ⑤ 自動化したいがどうしたらよいかわからない...
- ⑥ ベイズ最適化による最適な実験条件の効率的探索！
- ⑦ AIとロボットによる実験の短縮、高精度化と再現性向上！
- ⑧ 導入コストを抑え、既存の市販装置を最大限活用する方法！
- ⑨ 材料開発における少ない教師データをもとにした機械学習の活用！
- ⑩ 生成AIを使ったデータ収集と実験空間の拡張！
- ⑪ 秘密計算技術による安全な企業間データ連携と活用の仕方！
- ⑫ 自動計測器とロボットによる遠隔化/自動化システム構築！

## 執筆者(敬称略)

※順不同

旭化成(株)	夏目 稯	エルゼビア・ジャパン(株)	齋藤 美里	竹内技術士事務所	竹内 利一	(国研)物質・材料研究機構	岩崎 悠真
旭化成(株)	何 坤霖	奈良先端科学技術大学院大学	船津 公人	大阪大学	万 偉博	(国研)理化学研究所	菊地 淳
積水化学工業(株)	新明 健一	(一財)総合科学研究機構	富永 大輝	大阪大学	張 竣博	名古屋大学	岡田 真幸
積水化学工業(株)	増山 義和	シュレーディンガー(株)	石崎 貴志	(国研)理化学研究所	田中 信行	静岡県立大学	近藤 健
アステラス製薬(株)	根来 賢二	AJS(株)	加藤 仁一郎	(国研)理化学研究所	藤田 美紀	大阪大学	滝澤 忍
日鉄ケミカル&マテリアル(株)	小林 哲也	三井化学(株)	向田 志保	大阪大学	原田 研介	信州大学	古山 通久
田辺三菱製薬(株)	齋藤 隆太	(一財)日本情報経済社会推進協会	坂下 哲也	(国研)物質・材料研究機構	松田 翔一	信州大学	久間 馨
田辺三菱製薬(株)	松本 健太郎	(一財)日本情報経済社会推進協会	松下尚史	(国研)科学技術振興機構	永野 智己	京都大学	林 博之
沖電気工業(株)	坪井 正志	(一財)日本情報経済社会推進協会	須永卓也	(国研)物質・材料研究機構	吉武 道子	東京大学	長藤 圭介
オムロン(株)	高橋 昌也	(株)日本能率協会コンサルティング	丹羽 哲夫	北海道大学	芦刈 洋祐	大阪大学	紀ノ岡 正博
高砂電気工業(株)	平谷 治之	伊藤忠テクノソリューションズ(株)	森 一樹	(株)altFlow	玉木 孝	名古屋大学	加藤 竜司
高砂電気工業(株)	林 豊	慶應義塾大学	若本 隆	北海道大学	永木 愛一郎	名古屋大学	伊藤 友哉
MI-6(株)	入江 満	(株)キャトルアイ・サイエンス	上島 豊	(国研)産業技術総合研究所	室賀 駿	東京大学	浅野 悠紀
テカンジャパン(株)	伊藤 浩孝	東京工業大学	島山 欽	慶應義塾大学	荒井 規允	東京大学	岡田 慧
(株)東芝	桐淵 大貴	九州大学	浅野 周作	東京理科大学	藤本 憲次郎	東京大学	塩尻 淳一郎
(株)レゾナック	南 拓也	室蘭工業大学	藤平 祥孝	防衛大学校	相見 晃久	京都大学	川又 生吹
(株)インシリコデータ	湯田 浩太郎	月島JFEアクアソリューション(株)	矢澤 伸弘	近畿大学	蟹江 慧	東北大学	清水 稜
カワダロボティクス(株)	杉浦 学	月島JFEアクアソリューション(株)	山本 稔	名古屋大学	百瀬 賢吾	東北大学	Richard J. Archer
(国研)日本原子力研究開発機構	大澤 崇人	(国研)物質・材料研究機構	長田 貴弘	大阪大学	小野 寛太	東北大学	野村 M. 慎一郎
EAGLYS(株)	阿須間 麗	ThreeX Design(株)	櫻井 俊輔	(一社)新技術応用推進基盤	谷村 勇平	岡山大学	佐藤 英祐
(株)モルシス	篠崎 康裕	(株)FCE	永田 純一郎	(国研)量子科学技術研究開発機構	上野 哲朗	岡山大学	菅 誠治
(株)モルシス	福田 智美	(地独)神奈川県立産業技術総合研究所	濱田 健吾	(国研)量子科学技術研究開発機構	岩澤 英明		
東レ(株)	山本 海	NECネクソソリューションズ(株)	山田 拓輝	名古屋工業大学	稲津 佑		

## 第1章 実験自動化・自律化

### (ラボラトリーオートメーション)への期待と支援制度

#### ★人為ミスを削減！自動化技術による研究開発のさらなる加速！

- 第1節 ラボラトリーオートメーションの現状と期待：  
「自動型化学研究」から「自律型化学研究」への展開と課題
- 第2節 実験の自動化・自律化により期待される効果と導入のポイント
- 第3節 日本におけるデジタル戦略の特徴と補助金や支援制度について

## 第2章 ラボラトリーオートメーション実現へのステップ

### ★日常の研究をそのまま移管するだけでは達成できない！ 実験に必要なデジタル機器と実験装置の連携によるデータ取得！

- 第1節 ラボラトリーオートメーションへのステップと実験自動化推進のポイント
- 第2節 大型実験施設・研究開発現場におけるDX化へ向け
- 第3節 ラボラトリーオートメーションの概要と実験自動化推進のポイント

## 第3章 自動・自律実験の運用における組織体制と社内展開の仕方

### ★データプラットフォーム構築と自律型実験システムとの連携！ 不必要なコストをかけず必要に応じたデータを保存する方法とは！

- 第1節 研究開発部門のDX化を進めるための組織体制と社内展開
- 第2節 OKIにおけるDX戦略とイノベーション創出のための組織変革
- 第3節 DXを用いた研究開発活動を中心とした業務の効率化
- 第4節 DX活用へのデータプラットフォーム構築、  
社内普及と実験自動・自律化への活用
- 第5節 マテリアルズ・インフォマティクスに向けた  
材料データの記録・データ活用法の展開
- 第6節 材料開発の効率化と加速化：DXにおける先端IT技術の役割と課題
- 第7節 秘密計算を用いた企業間データ連携による材料開発効率化
- 第8節 クラウド型電子実験ノートを活用した研究データの統合的管理
- 第9節 少ないデータでDX、インフォマティクスを行うための準備と工夫の仕方
- 第10節 研究開発型企業に求められるデータドリブンな意思決定
- 第11節 間接部門へのDX導入による生産性向上とイノベーション創出
- 第12節 新規事業を担うDX人材：オムロンDXスクールの仕組みと人材育成

## 第4章 自動実験設備・自律型実験システムの 特徴と研究開発業務への導入ポイント

### ★高い記述自由度を持ちながら、 日常的な材料実験の過程を効率的に記録、解析する方法！！

- 第1節 R&D部門における自動・自律実験運用の  
データプラットフォーム構築とその運用・推進体制
- 第2節 電子ノートによるAI自動解析システムの構築と実験の効率・自動化への展望
- 第3節 自動化フロー法による新規プロセスと反応解析
- 第4節 卓上4軸ロボットとIoTデバイスを組み合わせたジャーテスト自動化システム
- 第5節 自律型ハイスループット薄膜材料探索の  
基盤となるデータ共有と薄膜材料開発

## 第5章 RPAによる研究開発業務効率化と生産性向上

### ★導入目的を明確にし、R&D業務の「作業時間」を短縮！

- 第1節 RPAによる業務改善・業務効率化と研究開発業務への導入検討
- 第2節 RPAによる研究開発業務の短縮
- 第3節 RPA導入による業務効率化と効果的な運用

## 第6章 協働ロボによる実験の短縮と 実験自動化・自律化への応用方法

### ★狭い実験室環境への設置、既存の理学機器との統合！ 導入コストを抑えながら遠隔でロボットを使った実験を行うには！

- 第1節 協働ロボット導入における  
考慮すべきポイントと研究開発業務自動化への活用

- 第2節 ヒト型協働ロボットNEXTAGEを活用した自動化、効率化の取り組み
- 第3節 多関節ロボットを用いた湿式分離自動化システムの開発
- 第4節 ハンドアイカメラを有するロボットマニピュレーターを用いた  
マイクロピペットの自律点検と液体分注作業
- 第5節 自動実験ロボットと機械学習による蓄電池用電解液材料探索

## 第7章 AI技術を活用した実験の短縮と実験自動化・自律化

### ★高速なデータ収集、AIによる迅速最適化、自動最適化！ 熟練者の暗黙知を定式化し、自律的な計測や自動データ解析を実現！

- 第1節 リサーチ・トランスフォーメーション(RX)による研究の効率化
- 第2節 マテリアルキュレーション®を活用した  
データの補い方と実験自動化・自律化へのAI技術活用
- 第3節 AI技術を用いたフロー自動合成と実験の短縮
- 第4節 複数の生成AIを統合したマルチモーダルAIによる材料開発の効率化
- 第5節 AIと分子シミュレーションを組み合わせた  
ソフトマター材料の物性予測と開発効率化
- 第6節 計算科学と機械学習を活用した高周波対応フレキシブル誘電材料の開発
- 第7節 素材・材料開発効率化へのMI活用と実験自動化・自律化への展望
- 第8節 創薬研究のデジタルトランスフォーメーション  
～AIとロボットを活用した創薬～
- 第9節 AIを活用した創薬探索研究の効率化と高速化
- 第10節 結晶構造精密化の自動化法の開発と活用の仕方
- 第11節 動物細胞培養の計測と自動化への取り組み、今後の展望
- 第12節 自律的な計測のための実験計画の立て方と自動データ解析
- 第13節 Chat-GPTを用いた研究開発の効率化と実験短縮への応用

## 第8章 ベイズ最適化による 実験条件の効率的探索と実験効率化への活用

### ★サンプル作製、物性評価の工程を自動化！ 最適な実験条件や手順を設計し、最小限の試行で最大の情報を取得！

- 第1節 機械学習によるスペクトル計測・解析の効率化・自動化
- 第2節 ベイズ最適化を用いた実験工程の効率化
- 第3節 ベイズ最適化と低次元化によるモノづくりの効率化と試行回数の低減化
- 第4節 ベイズ最適化を用いた実験条件の探索と効率的なポリマー設計
- 第5節 第一原理計算と機械学習を組み合わせた自律材料探索システム
- 第6節 時間領域NMRおよび固体高分解能NMRとプロセスインフォマティクス
- 第7節 ベイズ最適化による電解・フロー精密有機合成反応条件の探索と効率化
- 第8節 機械学習と汎用ニューラルネットワークポテンシャルを  
活用した触媒モデリングの最先端：  
計算材料科学の超高速化が拓く新たな材料探索と物性予測

## 第9章 自動・自律実験による材料探索の効率化と運用のポイント

### ★膨大な材料探索空間から最適なものを効率的に発見するか！ プロセス開発に情報科学を取り入れたプロセスインフォマティクス！

- 第1節 ラボラトリーオートメーションの自律化を支える最適化技術
- 第2節 AIによる合成条件推薦システムの構築
- 第3節 データ駆動型開発へのプロセスインフォマティクスの活用方法

## 第10章 ラボラトリーオートメーションに向けた 実験自動化・自律化の取り組みと事例

### ★より少ない実験サイクルで目標を達成！大幅な研究期間の短縮！ 研究者の作業を減らし“思考”の時間を確保できる“真の自動化の世界”

- 第1節 材料開発におけるMIと自律実験システム構築の取り組み
- 第2節 細胞製造の機械化・自動化への取り組み
- 第3節 細胞品質管理に向けた細胞培養DXの  
重要ポイントと画像解析による効率的デザインスペースの理解
- 第4節 オープンソースロボティクスの活用によるラボオートメーションシステム
- 第5節 実験自動化による人工多細胞体の作製と観察への取り組みと今後の展望
- 第6節 有機合成の自動化への新合成手法開発への取り組みと今後の展望

