

マテリアルズ インフォマティクス・AI

を活用した、現場で“即”活かせる
材料開発事例集とMIの将来像

監修:船津 公人

企画委員:向田 志保

夏目 穎

加藤 仁一郎

執筆者紹介

発刊にあたって

船津 公人 奈良先端科学技術大学院大学
データ駆動型サイエンス創造センター 特任教授
東京大学 名誉教授／理学博士

第1章

第1節

室賀 駿 産業技術総合研究所 主任研究員／博士（工学）

第2節

中尾 篤之 株式会社 CrowdChem リードデータサイエンティスト／
博士（科学）

池端 久貴 株式会社 CrowdChem 代表取締役／博士（統計科学）

第3節

吉崎 達 ダイキン工業株式会社
大森 遼 ダイキン工業株式会社
東京大学 工学系研究科 研究員を兼任

橋本 光平 ダイキン工業株式会社
東京大学 工学系研究科 研究員を兼任

第4節

兼子 祐 株式会社ダイセル デジタル戦略推進センター
事業化加速グループ 上席技師／博士（理学）
岩山 将士 株式会社ダイセル デジタル戦略推進センター
事業化加速グループ チームリーダー¹
大阪大学 大学院基礎工学研究科 招へい准教授を兼任
／博士（理学）
岩山 めぐみ 株式会社ダイセル デジタル戦略推進センター
企画推進グループ 研究員／博士（統計科学）

執筆者紹介

福本 康秀 国立大学法人九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所
特任教授／理学博士

Pierluigi Cesana 国立大学法人九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所
教授／Ph.D.

Linh Thi Hoai Nguyen 国立大学法人九州大学 カーボンニュートラル・
エネルギー国際研究所 助教／博士（情報科学）

Edoardo Fabbrini 国立大学法人京都大学 理学研究科
附属サイエンス連携探索センター 学術研究員
／博士（機能数理学）

大木場 慧 国立大学法人宮崎大学大学院 工学研究科
修士課程2年生／学士

宇都 卓也 国立大学法人宮崎大学 工学部 准教授／博士（工学）

第5節

押山 智寛 コニカミノルタ株式会社 技術開発本部 部長／博士（理学）

奥山 優弘 コニカミノルタ株式会社
技術開発本部 アシスタントマネジャー／博士（学術）

池田 祐子 コニカミノルタ株式会社 化成品事業部
アシスタントマネジャー／博士（理学）

中澤 幸仁 コニカミノルタ株式会社 技術開発本部
アシスタントマネジャー／博士（理学）

第6節

藤元 伸悦 日鉄ケミカル&マテリアル株式会社
基盤技術研究開発部長／博士（工学）

執筆者紹介

第2章

第1節

野田 祐輔 九州工業大学 大学院情報工学研究院
物理情報工学研究系 准教授
九州工業大学 データサイエンス・AI研究センターを兼任
／博士（工学）

第2節

松井 康哲 大阪公立大学 大学院工学研究科 准教授／博士（工学）
大垣 拓也 大阪公立大学 大学院工学研究科 特任助教／博士（工学）
麻田 俊雄 大阪公立大学 大学院理学研究科 教授／博士（理学）
池田 浩 大阪公立大学 大学院工学研究科 教授／理学博士

第3節

小林 亘 NTT株式会社 先端集積デバイス研究所 担当部長
／博士（工学）、技術士（電気電子部門）
大塚 琢馬 NTT株式会社 コミュニケーション科学基礎研究所
担当課長／博士（情報学）
若林 勇希 NTT株式会社 物性科学基礎研究所
特別研究員／博士（工学）

第4節

富谷 茂隆 奈良先端科学技術大学院大学
岩満 一功 奈良先端科学技術大学院大学
大竹 義人 奈良先端科学技術大学院大学
赤瀬 善太郎 奈良先端科学技術大学院大学

執筆者紹介

第3章

第1節

藤田 正博 上智大学 理工学部 物質生命理工学科 教授／博士（工学）

畠山 歓 東京大学 工学系研究科 技術経営戦略学専攻
特任准教授／博士（工学）

第2節

松田 翔一 物質・材料研究機構 チームリーダー／工学博士

第3節

山本 里夏 慶應義塾大学 理工学部 後期博士課程／修士（工学）

緒明 佑哉 慶應義塾大学 理工学部 教授／博士（工学）

第4章

第1節

曾我部 東馬 国立大学法人電気通信大学
i-パワードエネルギー・システム研究センター
(兼) 基盤理工学専攻 教授／博士（理学）

斯波 廣大 国立大学法人電気通信大学大学院 情報理工学研究科
基盤理工学専攻／博士（工学）

第2節

堤 翔 株式会社カネカ
薄膜プロセス開発研究所 自動化・DX技術開発グループ
DX技術開発チーム 兼 PV Technology Innovation司令部
幹部職／修士

高橋 俊匡 株式会社カネカ
薄膜プロセス開発研究所 自動化・DX技術開発グループ
グループリーダー 幹部職／修士

執筆者紹介

第5章

第1節

日下 康成 積水化学工業株式会社 先進技術研究所 所長
京都工芸繊維大学 特任教授を兼任

第2節

鳥越 翔斗 リンテック株式会社 主任

第3節

前田 和久 日東电工株式会社 基幹研究員
滋賀大学（特任准教授）を兼任／博士（工学）

第4節

島津 彰 日東电工株式会社 主任研究員
大阪公立大学（特任研究員）を兼任／博士（薬学）

第5節

新明 健一 積水化学工業株式会社 情報科学推進センター長
／環境科学修士

第6章

第1節

若杉 健介 パナソニック ホールディングス株式会社
リードリサーチャー／修士（科学）

第2節

高羽 洋充 工学院大学 教授／博士（工学）
樋口 隼人 工学院大学 助手／博士（工学）
宮川 雅矢 工学院大学 助教／博士（工学）

第3節

小林 哲也 日鉄ケミカル&マテリアル株式会社 主任研究員
／博士（工学）

執筆者紹介

第4節

岩崎 富生 株式会社日立製作所 シニア所員
群馬大学（客員教授）と島根大学（客員教授）を兼任
／理学博士

第7章

第1節

高原 渉 株式会社日立製作所 技師・
日立認定データサイエンティスト（プラチナ）
奈良先端科学技術大学院大学 社会人博士を兼任

第2節

高須賀 聖五 奈良先端科学技術大学院大学 助教
理化学研究所（客員研究員）を兼任／博士（工学）
富谷 茂隆 奈良先端科学技術大学院大学 教授
東京科学大学 総合研究院 特任教授を兼任／博士（工学）
赤瀬 善太郎 奈良先端科学技術大学院大学 特任准教授／博士（工学）
船津 公人 奈良先端科学技術大学院大学
データ駆動型サイエンス創造センター 特任教授
東京大学 名誉教授／理学博士

第3節

中川 大輔 ストックマーク株式会社
PaaS事業部 用途探索ユニットリーダー

第4節

富田 成明 一般社団法人日本ファインセラミックス協会 技術部長
／博士（工学）
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）を兼任／博士（工学）

執筆者紹介

第5節

内藤 昌信 物質・材料研究機構 高分子・バイオ材料研究センター
副センター長／博士（工学）

第6節

脇内 新樹 JSR株式会社 研究員
奈良先端科学技術大学院大学 共同研究員
JSR-ISMスマートケミストリーラボ 研究員
理化学研究所 客員研究員／博士（理学）
藤井 幹也 奈良先端科学技術大学院大学
データ駆動型サイエンス創造センター 教授／博士（学術）

企画委員

向田 志保 MISTEM合同会社 代表
信州大学 工学部 特任教授、
東北大学 材料科学高等研究所 特任教授（客員）、
大阪大学 基礎工学研究科 招聘教授を兼任／博士（工学）
夏目 穎 旭化成株式会社 研究・開発本部 基盤技術研究所
技術・開発第二部
高度専門職 リードエキスパート／博士（工学）
加藤 仁一郎 AJS株式会社 理事 デジタルイノベーション事業部長／工学博士

目 次

発刊にあたって データ駆動化学が私たちに教えること	001
奈良先端科学技術大学院大学/東京大学 船津 公人	
はじめに	001
1. データ駆動化学の守備範囲の概要	002
2. 新しい研究の仕方 ～リサーチトランスフォーメーション（RX）サイクル～	004
3. プロセスインフォマティクスの可能性	006
おわりに	007
第1章 マテリアルズインフォマティクス・AIの活用による高分子材料の開発動向	009
第1節 高分子の研究開発を加速するインフォマティクス・自律自動実験の動向と課題	010
産業技術総合研究所 室賀 駿	
はじめに	010
1. データ活用のトレンド	010
2. トピックス①：異なるデータを束ねた推論を可能にするマルチモーダルAI	011
3. トピックス②：自律自動実験が切り開くAI駆動材料開発・条件最適化	014
おわりに	016
第2節 フローチャート形式による実験表現による高分子材料実験データの統一的表現	019
株式会社 CrowdChem 中尾 篤之・池端 久貴	
はじめに	019
1. 高分子材料におけるマテリアルズインフォマティクスにおける実験情報表現の課題	019
1.1 さまざまな高分子材料におけるマテリアルズインフォマティクス	019
1.2 実用上の様々な課題	020
2. フローチャート形式による実験表現	021
2.1 実験フローチャートとグラフ構造	021
2.2 実験フローチャートの作成方法	022
2.2.1 実験のフローチャートの階層	022
2.2.2 各プロセスの情報を表現する階層	022
2.2.3 プロセスに使われている各材料の情報を表現する階層	024
2.2.4 最終的なグラフの作製	026
3. グラフニューラルネットワークをベースとしたモデル化	026

3.1 物性予測モデルの基本的な構成	026
3.2 エンコーダー層を用いたマルチモーダル化	026
3.3 マルチタスク学習	027
3.4 化学基盤モデルの学習とファインチューニングによる応用	027
4. ケーススタディ	028
4.1 問題設定	028
4.2 化学基盤モデルの学習	028
4.3 ファインチューニング	028
おわりに	029
第3節 デジタル技術を活用した高分子材料設計の取り組み	031
ダイキン工業株式会社 吉崎 達・大森 遼・橋本 光平	
はじめに	031
1. 高分子のデジタル材料設計について	031
2. 低誘電高分子材料設計における分子シミュレーションの活用例	032
2.1 低誘電材料開発の背景	032
2.2 MDシミュレーションを用いた誘電特性の解析	033
2.2.1 周波数依存 誘電率・誘電正接の解析	033
2.2.2 実験値との比較	034
2.3 計算データを活用した機械学習モデルの構築	034
2.4 有望構造のスクリーニング	035
2.4.1 代理指標の創出	035
2.4.2 スクリーニングの実行	036
3. 今後の展望	037
3.1 高次構造設計への挑戦	037
3.2 展望1：マルチスケールシミュレーション	037
3.3 展望2：自動実験	039
第4節 計算科学を活用したマテリアルズインフォマティクス基礎検討と開発現場への応用	043
株式会社ダイセル 兼子 祐・岩山 将士・岩山 めぐみ	
国立大学法人九州大学 福本 康秀・Pierluigi Cesana・Linh Thi Hoai Nguyen	
国立大学法人京都大学 Edoardo Fabbrini	
国立大学法人宮崎大学 大木場 慧・宇都 卓也	
はじめに	043
1. 第一原理計算による材料探索技術	043
1.1 全体的なワークフロー	044
1.2 HOMO-LUMOバンドギャップに基づく構造探索	044

1.3 まとめ	046
2. 分子動力学計算による材料探索技術	047
2.1 全体的なワークフロー	047
2.2 探索により得られた学習モデルと物性マップ	048
2.3 分子動力学計算による溶解後の構造と合成候補物の評価	049
2.4 まとめ	050
3. MI技術の社内応用	050
4. 今後の展望	051
第5節 マテリアルズ・インフォマティクスを用いたポリプロピレン複合材料の 弾性率予測モデル構築	055
コニカミノルタ株式会社 押山 智寛・奥山 倫弘・池田 祐子・中澤 幸仁	
はじめに	055
1. ポリマーMIの課題とそれに対する取組み	055
1.1 データ量が少ない課題に対する取組み	055
1.1.1 HT実験によるデータ創出	055
1.1.2 データベースの活用	056
1.2 ポリマー構造の複雑性の課題に対する取組み	056
1.3 ポリマーに関する記述子の課題に対する取組み	057
2. PP複合材料の作製実験	057
3. PP複合材料へのMI適用	058
3.1 特微量設計	058
3.2 弾性率の予測モデル構築	058
3.3 処方発生	059
4. モデルの向上	060
4.1 予測モデルの実験検証	060
4.2 非線形SVRモデルによる予測精度の改良	061
おわりに	063
第6節 高分子材料の最適設計・評価支援ツールの開発	065
日鉄ケミカル&マテリアル株式会社 藤元 伸悦	
はじめに	065
1. マテリアルズインテグレーション	065
2. 開発したツールの概要	066
3. 開発したツールによる主な検討成果	067
3.1 ミクロスケール (\sim nm)	067
3.2 メソスケール (nm \sim μ m)	069

3.3 マクロスケール (μm ~)	071
おわりに	073
第2章 AI・機械学習による半導体材料の開発動向	075
第1節 第一原理計算と組み合わせ最適化アルゴリズムの連携による	
IV族混晶半導体の安定構造探索	076
九州工業大学 野田 祐輔	
はじめに	076
1. IV族混晶半導体	076
2. 計算手法	076
2.1 遺伝的アルゴリズム	077
2.2 第一原理計算	078
2.3 電子物性の解析	078
2.4 配位数の解析	079
3. 結果および考察	079
3.1 SiGe二元系の最安定配列の探索	079
3.2 SiGe二元系の電子物性の評価	080
3.3 SiGe二元系の配位数の評価	082
おわりに	083
第2節 有機半導体・有機エレクトロニクス分野における機械学習の活用動向	087
大阪公立大学 松井 康哲・大垣 拓也・麻田 俊雄・池田 浩	
はじめに	087
1. 機械学習を用いた有機太陽電池の組成および作製プロセスの最適化	088
2. 機械学習を用いた有機EL用熱活性化遅延蛍光材料の開発	089
3. 機械学習を用いた有機半導体の分子設計	090
おわりに	093
第3節 AI活用による半導体薄膜の成膜条件の自動導出	095
NTT株式会社 小林 亘・大塚 琢馬・若林 勇希	
はじめに	095
1. 背景	095
2. 半導体薄膜の成膜条件導出の自動化	096
2.1 対象とする材料系	096
2.2 条件導出の自動化	097
2.2.1 物理知識の導入	097
2.2.2 単調性を考慮した予測モデル	097

2.2.3 PIBOによる予測エンジン	098
3. 提案手法を適用した実験例	099
3.1.1 従来BOとPIBOの予測の比較	099
3.1.2 実験結果	100
3.2.1 短波側の外挿予測	101
3.2.2 測定結果からの確認	102
おわりに	103
第4節 半導体材料・デバイスにおける計測インフォマティクス	105
奈良先端科学技術大学院大学 富谷 茂隆・岩満 一功・大竹 義人・赤瀬 善太郎	
はじめに	105
1. 計測の目的と計測インフォマティクス	106
2. SEM-CLスペクトルイメージングと片側直交ONMF	107
3. 3DAPとETとの非剛体レジストレーション	110
おわりに	112
第3章 マテリアルズインフォマティクス・AIの活用による リチウムイオン電池・全固体電池材料の開発動向	115
第1節 マテリアルズインフォマティクスの活用による固体電解質の効率的な探索手法の開発	116
上智大学 藤田 正博	
東京大学 畠山 歆	
はじめに	116
1. IPCのイオン伝導度の予測精度	117
2. 高イオン伝導性IPCの探索	119
おわりに	122
第2節 次世代蓄電池用電解液材料のデータ駆動型ハイスループット材料探索	125
物質・材料研究機構 松田 翔一	
はじめに	125
1. 電気化学自動実験ロボットと探索アルゴリズムを組み合わせた電解液材料探索	125
2. 自律自動実験のための汎用ソフトウェア：NIMO	127
3. 並列電気化学セルの改良による電池評価系の拡張	128
4. ラミネートセル作製ロボットを用いた高品質データの創出	129
おわりに	130

第3節 新規リチウムイオン二次電池有機電極活物質の性能予測と探索	133
慶應義塾大学 山本 里夏・緒明 佑哉	
はじめに	133
1. 小規模データをもとにした実験主導MI	133
1.1 小規模データに対するMIの必要性	133
1.2 小規模データに対するMIの手順	134
2. リチウムイオン二次電池有機正極活物質の探索	135
2.1 有機正極活物質に関するデータセットの構築	135
2.2 正極性能予測モデルの構築・予測精度の検証	137
3. リチウムイオン二次電池有機負極活物質の探索	138
3.1 有機負極活物質に関するデータセットの構築	138
3.2 負極性能予測モデルの構築・予測精度の検証	140
3.3 予測モデルによる新規負極活物質の探索・高性能化	141
おわりに	142
第4章 マテリアルズインフォマティクス・AIの活用による太陽電池材料の開発動向	145
第1節 AI最適化手法による高効率太陽電池デバイスの逆設計	146
国立大学法人電気通信大学 曾我部 東馬・斯波 廣大	
はじめに	146
1. 中間バンド型太陽電池と量子ドット超格子	146
2. ペロブスカイト太陽電池とコロイド量子ドット	147
3. AIを用いた中間バンド型太陽電池の逆設計	149
4. GaAs/AlGaAs中間バンド太陽電池に対するAI設計結果	150
5. PbS量子ドット/ペロブスカイトIBSCへの展開	152
おわりに	156
第2節 太陽電池製造プロセスにおける品質管理とAI活用による検査自動化	159
株式会社カネカ 堤 翔・高橋 俊匡	
はじめに	159
1. 太陽電池の品質（性能、安全性、信頼性、意匠性）管理とEL検査の位置付けと課題	160
2. AIを活用したEL検査自動化に向けた技術開発	161
2.1 近年のAI技術による検査自動化の動向及びEL検査への適用	161
2.2 教師有り学習（SL）手法である欠陥分類モデルによる既知欠陥に対する高精度な判定の実現	162
2.3 教師なし学習（UL）手法である良品学習モデルによる未知欠陥に対する異常検知	164

2.4 ハイブリット型EL自動検査システムの適用例	166
3. 持続可能なEL検査システムの実現に向けた技術開発	167
3.1 EL検査を含む自動検査システム運用における課題	167
3.2 半自動的な欠陥判定モデル（SLモデル）更新の仕組み	167
3.3 再学習システム導入による効果	168
おわりに	169

第5章 マテリアルズインフォマティクス・AIの活用による

接着剤・粘着剤・テープの開発動向

171

第1節 マテリアルズインフォマティクスの推進：新規材料開発への活用にあたって	172
--	-----

積水化学工業株式会社 日下 康成

はじめに	172
------	-----

1. 製品開発現場への適用事例	173
1.1 高機能樹脂製品へのMI適用と多物性の同時予測	173
1.2 熱材料の高度な物性予測の実現に向けた粘弾性カーブの活用	174
1.3 機械学習を用いたエポキシ樹脂の物性（誘電率・Tg）予測モデルの構築	175
1.4 波長選択とピーク分離の組合せによる有意特微量生成手法の構築	176
1.5 AIと計算を活用した抗原-抗体の親和性制御	177
1.6 全原子分子動力学計算によるアクリル系粘着剤の親和性評価	177
1.7 粗視化分子動力学を用いた架橋エラストマーの力学物性に対する 架橋剤官能基数の影響解析	178
2. MIにおけるデータ活用とドメイン知識の重要性	178
3. 素材開発の歴史とデータの多様性を背景にした今後の発展	179

第2節 MIを活用した粘着剤処方設計	183
--------------------	-----

リンテック株式会社 鳥越 翔斗

はじめに	183
------	-----

1. 研究開発へのMIの適用	184
1.1 MIを適用した開発アプローチ	184
1.2 研究開発におけるMI適用の課題	185
2. MIを活用した粘着剤の配合設計	185
2.1 データ解析手段	185
2.2 データ前処理手法の検討	185
2.3 機械学習のアルゴリズム選定	187
2.4 効率的な実験データ収集方法について（実験計画法やベイズ最適化）	188
3. 開発事例	189
3.1 製品開発へのMI適用のポイント	189

3.2 粘着製品開発への適用事例	190
おわりに	191
第3節 マテリアルズインフォマティクスを用いたデータドリブンR&Dの検討	193
日東電工株式会社 前田 和久	
はじめに	193
1. Nittoについて	193
1.1 Nittoの事業	193
1.2 NittoにおけるMIの重要性	193
2. 事例紹介	193
2.1 ホットメルト粘着剤の検討1	193
2.1.1 MI適用にて解決する課題	194
2.1.2 説明変数と目的変数	195
2.1.3 教師データの解析	196
2.1.4 網羅的探索による結果と考察	196
2.1.5 結果	198
2.2 ホットメルト粘着剤の検討2	199
2.2.1 説明変数と目的変数	199
2.2.2 検討の流れ	200
2.2.3 結果	200
おわりに	202
第4節 高分子接着界面研究における分子シミュレーションと マテリアルズインフォマティクスの利用	203
日東電工株式会社 島津 彰	
はじめに	203
1. 第一原理計算による接着界面の相互作用解析	204
2. 第一原理計算を利用したMIによる接着界面研究事例	205
3. 全原子系分子動力学法による接着界面剥離挙動のシミュレーション	206
4. 粗視化分子動力学法による接着剤バルク高分子の凝集破壊シミュレーション	211
おわりに	212
第5節 MIによる接着剤の探索、物性予測への応用	215
積水化学工業株式会社 新明 健一	
はじめに	215
1. MIによる接着剤の設計	215
1.1 接着剤の設計に必要な要素	215

1.2 中間物性の活用	216
2. 潜在変数を活用した質的変数の量的変数への変換	218
2.1 質的変数の潜在変数への変換	218
2.2 中間物性を活用した予測モデル	219
3. 構造物性相関を活用した接着剤の設計	221
3.1 配合情報からの設計と構造情報からの設計	221
3.2 化学構造の構造記述子化と配合系への適用	222
3.3 変数選択	224
3.4 機械学習モデルの構築と評価	225
おわりに	226
第6章 マテリアルズインフォマティクス・AIを活用した各種材料開発	229
第1節 無機材料分野における結晶構造予測技術の進展と	
サロゲートモデルを活用した結晶構造予測	230
パナソニック ホールディングス株式会社 若杉 健介	
はじめに	230
1. 結晶構造予測の最新動向	230
1.1 エネルギー予測	230
1.2 対称性を利用した構造予測	231
1.3 GNNベース生成モデルによる構造生成	232
1.4 大規模言語モデル（LLM）の応用	233
1.5 材料開発への応用事例	233
2. ShotgunCSP	234
2.1 対称性に基づく仮想構造生成とサロゲートモデルによるスクリーニング	234
2.2 構造予測結果	235
3. 無機材料におけるMIの課題と展望	235
おわりに	236
第2節 MIを応用したガス分離膜および水処理膜の材料設計	241
工学院大学 高羽 洋充・樋口 隼人・宮川 雅矢	
はじめに	241
1. 分離膜のデータベース	241
2. 機械学習を用いた分離膜の性能予測と設計手法	242
3. CO ₂ 分離膜への適用例	243
4. 水処理膜（吸着）への適用例	244
5. 深層生成AI（JT-VAE）による高性能な分離膜の逆設計	245
5.1 JT-VAEの基本原理と潜在空間の特徴	246

5.2 生成AIを用いた高性能CO ₂ 分離膜の設計	246
5.3 水処理膜（耐ファウリング性）の逆設計	248
おわりに	249
第3節 マテリアルズインフォマティクスを活用した 高周波対応フレキシブル誘電材料の開発	251
日鉄ケミカル&マテリアル株式会社 小林 哲也	
はじめに	251
1. 開発背景	252
2. MIを活用した材料開発スキームの提案	252
3. 低誘電率材料の探索	254
4. 機械学習による誘電率の回帰モデルの構築	255
5. 分子動力学法による原子分極、配向分極に起因する誘電特性の推算	257
おわりに	258
第4節 少数データのマテリアルズインフォマティクスを活用した 電子デバイス向け材料の開発事例	261
株式会社日立製作所 岩崎 富生	
はじめに	261
1. 仮想材料を用いた記述子ベースの網羅的探索	261
2. 直交表を用いた記述子ベースの高効率探索	264
3. 応答曲面法を用いた関数化による材料探索	268
4. 直交表と機械学習を用いた最適化による材料探索	273
おわりに	276
第7章 材料開発の現場における MI・AI の将来技術	279
第1節 大規模言語モデル（LLM）を用いた材料開発の取り組みと MI の将来像	280
株式会社日立製作所/奈良先端科学技術大学院大学 高原 渉	
はじめに	280
1. LLMの登場	280
1.1 ChatGPTの与えた衝撃とLLMの潮流	280
1.2 クラウドベースLLM vs ローカルLLM	281
2. 材料開発におけるLLMの取り組みの潮流	281
2.1 LLMのドメイン特化	281
2.2 2つの潮流	281
3. MIの将来像	282

第2節 材料開発における電子ラボノートと計測機器との連携	285
奈良先端科学技術大学院大学 高須賀 聖五・富谷 茂隆・赤瀬 善太郎・船津 公人	
はじめに	285
1. ELNの導入	286
1.1 アナログ記録の限界とデータ資産化	286
1.2 MI指向のELN選定と要件	287
1.3 導入の障壁とチェンジマネジメント	288
1.4 計測機器連携の技術的アプローチ	288
2. 活用事例	289
2.1 自動実験装置を用いた光触媒探索	289
2.1.1 システム構成: シリアル通信とAPIによる統合アーキテクチャ	290
2.1.2 運用フロー: 物理的サンプルとデジタルデータの同期プロセス	290
2.2 電子ラボノートによるデータ整理の効率化	291
おわりに	293
第3節 新規事業創出の確度向上・効率化に向けた生成AI技術の開発 ～ナレッジグラフ・大規模言語モデル構築技術～	295
株式会社ストックマーク 中川 大輔	
はじめに	295
1. 汎用AIの限界と「プロセス指向」アプローチ	295
1.1 汎用LLMでは不十分な理由	295
1.2 R&D革新を実現する4つの戦略	296
2. 中核技術（1）— ナレッジグラフが拓く「関係性」の検索	297
2.1 RAGの普及と次なる課題	297
2.2 R&Dの推論を可能にする「ナレッジグラフ」	297
2.3 技術的課題の克服: 15万件のデータと顧客知見の活用	298
3. 中核技術（2）— データを「知識」に変えるAIコンポーネント群	298
3.1 VLM (Vision Language Model) : 非構造化データを読み解く「目」	299
3.2 DeepResearch : 高品質な外部情報を収集・分析する「調査員」	299
3.3 評価エージェント (LLM as a Judge) : アイデアの「質」を担保する「審査官」	300
4. 実証が示す価値—R&D変革の最前線	301
4.1 事例1: 株式会社日本触媒 — 「暗黙知」と「社外知」の融合	301
4.2 事例2: 某自動車サプライヤーA社 — 10年後を見据えた未来テーマ創出	302
4.3 事例3: 国立研究開発法人 産業技術総合研究所（産総研） グループ— 産学連携の加速	302
5. 結論と今後の展望	303
おわりに	303

第4節 機械学習とロボット技術を活用したデジタルラボラトリーの構築	305
日本ファインセラミックス協会 富田 成明	
東京大学 一杉 太郎	
はじめに	305
1. 協調と競争	306
1.1 克服すべき技術的課題	307
2. 筆者らの研究グループにおける取り組み	307
2.1 「大きなループ」と「小さなループ」	307
2.2 薄膜系実験システムの開発	308
2.3 セラミックス（粉体系）自動化プロセスの概要	309
2.4 システムアーキテクチャ	309
3. 今後の期待	310
3.1 データ品質の革新	310
3.2 機械学習の「創発」への期待	310
4. システム定着に向けて	311
おわりに	311
第5節 高分子材料開発におけるMIと自動・自律実験の融合	315
物質・材料研究機構 内藤 昌信	
はじめに	315
1. 高分子材料分野の現状と課題	316
2. 世界における自動実験動向：AIが拓く高分子研究	317
3. データベース／プラットフォームの現状	319
4. 日本における研究動向とプロジェクト	321
4.1 産官学連携プロジェクト「化学MOP」による水平連携	321
4.2 NIMS RDEによるデータ共有基盤とインフラ整備	321
4.3 RadonPyプロジェクトと計算データ基盤	321
4.4 MaiMLによるデータ記述標準化	322
5. 具体的な研究事例	322
5.1 フロー合成による自律的なポリマー分子量制御	322
5.2 フロー合成とペイズ最適化による共重合組成の制御	323
5.3 ランダムヘテロポリマーブレンドの自律探索	323
5.4 X線回折とスパースモデリングによるポリプロピレンの物性予測	325
5.5 機械加工と自動試験機による接着強度のハイスループット確率分布評価	325
5.6 自動合成 + MIに適した合成系・評価系	326
6. マテリアルズ・インフォマティクスの新潮流：高分子基盤モデルへの期待	327
おわりに データ駆動型高分子研究の未来	327

第6節 フロー重合、量子化学、情報化学、ロボットの融合による
精密合成からスケールアップ

331

JSR株式会社 脇内 新樹
奈良先端科学技術大学院大学 藤井 幹也

はじめに	331
1. 高分子フロー重合の導入	331
1.1 反応性比の重合プロセス依存性	332
1.2 反応チューブ内の一様性	332
2. デジタル技術の活用	333
2.1 コポリマー計算化学データベースの構築	333
2.2 計算化学を用いた高分子フロー合成の生成物予測	334
2.3 ベイズ最適化による所望高分子の合成プロセスパラメータの最適化	335
2.3.1 単目的最適化	335
2.3.2 多目的最適化	335
2.4 FTIRスペクトルのWavelet変換とElastic Net回帰による共重合モノマー濃度推定	336
2.4.1 単出力WT-ENCVの構成と検証	336
2.4.2 多出力への拡張と性能比較	337
2.4.3 量子化学計算に基づく可視化解釈	338
2.5 デジタル制御されたフローバッチ：	
装置統合による組成・分子量の安定化とスケール化	339
2.5.1 連続フロー・バッチ統合システムの全体構造と目的	339
2.5.2 マイクロミキサ+フロー反応の組み合わせ	339
2.5.3 バッチにおける追加添加とスケーラビリティ	340
2.5.4 並列運転の再現性と生産性	340
3. アーム型ロボットと模倣学習による高分子合成手技の自動化	341
おわりに	342

発刊にあたって データ駆動化学が私たちに教えること

奈良先端科学技術大学院大学/東京大学 船津 公人

はじめに

1965年、スタンフォード大学でDENDRALプロジェクトがスタートした¹⁾。質量分析装置から得られるデータを分析し、有機化学の知識を使って構造未知の有機化合物の構造を決定することを目的に、Edward A. Feigenbaum、Bruce Buchanan、Joshua Lederberg、Carl Djerassiによる化学を対象とした世界初の挑戦的プロジェクトであった。ソフトウェアとしてのDENDRALは、化学者が行うような判断と問題解決の過程を自動化したものであるため、世界初のエキスパートシステム、人工知能と言われている。

ここで改めてDENDRALの考え方について述べることにしたい。DENDRALの基本は、構造推定の際に化学者が利用する知識表現と複雑な構造決定の論理網を一つ一つ辿りながら、その思考の過程をコンピュータに実現させたものである。いわば順方向の取組みである。だとすれば知識の量や表現の仕方、その知識の利用のための知識（仮説）の在り方で結論が決まってくる。人工知能と言いながらも人の行っていることを、その時点での限られた知識や知識利用の論理によってなぞっているに過ぎなかつたといえる。その知識や使い方に誤りや欠落があれば当然ながら正解の候補構造は提示されないのである。つまり、このシステム開発に関わった研究者の知識とその利用の論理の投影でしかなかつた。いわば単なる知識適用の手順であって、制約を設けたごく限られた対象での利用はできても実用にはほど遠かだったのである。

DENDRALが抱えていた問題を克服するために、観測データに矛盾しないすべての候補構造を「生成する仕組み」が考えられた。たとえば、構造未知の有機化合物の構造推定のために分子式しか分かっていなければその構造異性体を列挙することになるが、その中には必ず正解は含まれる。一例として分子式C₆H₆のみが与えられた場合を考えてみよう。列挙されるべき構想異性体は図1に示した217個である。この中には必ず求める正解は含まれている。分子式の他にC¹³-NMRスペクトルデータ（化学シフト136 ppmにダブルレットのシグナルが1本）が与えられると、それらに矛盾しない候補構造として図1中に赤枠で囲んだベンゼンの構造のみが生成される。決して正解構造を取り逃すことなく候補構造を提示できる点でDENDRALとはデータの活用の戦略が全く異なっていることが分かる。この考え方は、我が国では佐々木慎一と著者のCHEMICS²⁾として、またアメリカではM. E. MunkのCASE³⁾として結実し実用レベルにまで達した。この構造生成の考え方は、分子式やスペクトルデータという特性を満足する候補構造を求めるという、まさに逆問題への取組みそのものであることから、のちに構造活性（物性）相関モデルの逆解析の考え方へと発展し、医薬品や材料候補構造の生成として、いまや研究・開発の中核的な思想となっている^{4, 5)}。まさに逆解析こそがデータ駆動化学に求められる重要な事項であると理解され始めてきたのである。こうした歩みの中で、データ駆動化学はもはや研究・開発にとって不可欠なコンセプトとして大きな飛躍を遂げてきた。



K. Funatsu, S. Sasaki: Recent Advances in the Automated Structure Elucidation System, CHEMICS -Utilization of Two-Dimensional NMR Spectral Information and Development of Peripheral Functions for Examination of Candidates, *J. Chem. Info. Comput. Sci.*, 36, 190-204 (1996).

図1 分子式 C_6H_6 の構造異性体

現在、新規分子・材料開発のためにデータ駆動の考えが大きく広がり、マテリアルズインフォマティクスおよび後述するプロセスインフォマティクスが世界的な広がりを見せている。40年以上に亘り、データ駆動化学の分野で研究を進めてきた者として嬉しい気持ちでこの様子を見ている。一方、ここで改めて考えたいことは、こうしたデータ駆動化学の展開の中で、私たちが求めるものは一体何なのかということである。データや情報などを用いて目的の特性を実現する新しい分子や材料を設計し、その作り方を設計、制御することは確かに大きな目的ではある。ただ、その目的の実現のために便利さや効率性だけが求められるのであれば、それは作業でしかなく必ずしもサイエンスにはつながらない。サイエンスにつながるには解釈性と応用性が重要である。こうしたデータに語らせる仕組みを作るには、課題の構造の理解と仮説の設定、そしてデータ駆動により何をしたいのかを明確にすることが必要となる。当然ながらこのためにはその分野の多くの知識とそれにもとづく人々の深い洞察が求められることを改めて理解しなければならない。

1. データ駆動化学の守備範囲の概要

ここで現在のデータ駆動化学の守備範囲を見ておこう。図2はその概要である。所望の物性や機能を持つ材料や分子を得たいと考えると、それはまず「何を作るか」から始まる。分子設計・材料設計に相当するが、ここで構造と物性との間の関係性のモデル化を検討する。モデル化が上手くいけば、そのモデルの逆解析を通して目的の物性を満足すると考えられる材料構造や分子構造の候補を提案することになる。この逆解析こそがデータ駆動化学に求められる重要な役割である。

この逆解析を通して仮想的に様々な材料候補が得られるが、最終的に一般化学品として世の中に提供する場合には安全性評価が不可欠となる。「それは作って良いのか」という問い合わせである。画期的な

機能性化学品を早期に市場投入し、国際競争力を確保するためには、合成研究などの具体的な開発作業に着手する前にこれら候補の安全性スクリーニングを実施することで、可能性のある化学品開発の間口を広くとることが重要となる⁶⁾。

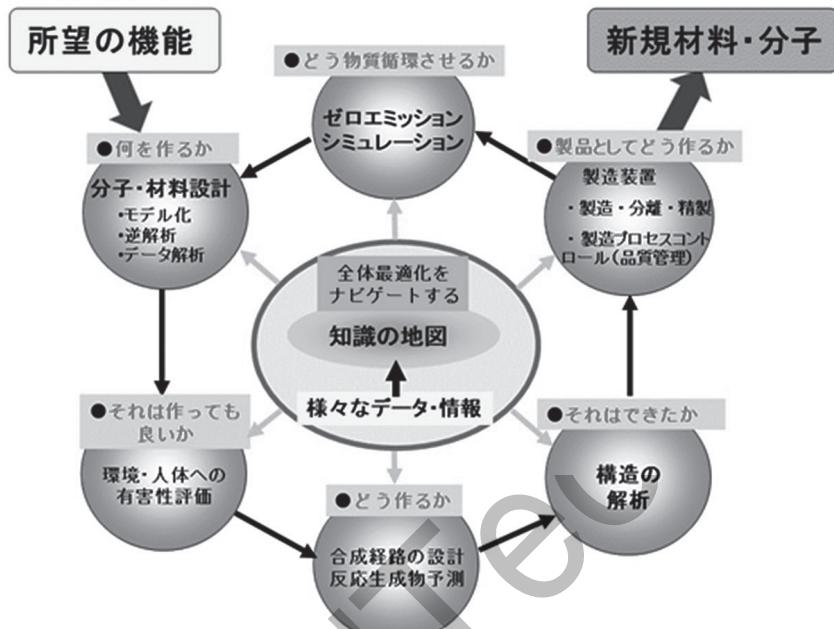


図2 データ駆動化学の概要

この安全性評価を経た後は「それをどう作るか」に移る。ここでは合成経路設計が該当する。そのあとは「それはできたか」を確認する構造解析となる。ここまでくると「製品としてどう作るか」が課題となる。化学プラントなどを利用して化学製品を製造するが、ここで大切なことは品質を維持して安定した製造を続けることである。製造される製品の品質（物性、特性等）をリアルタイムに確認し、求められる品質から外れそうであれば、そなならないようにプラントを制御しなければならない。しかしながら、従来このリアルタイムによる確認は困難で、製造中の製品をサンプリングして実験室で品質を確認していた。これでは結果が出るまでに時間がかかり、その間化学プラントからどのような製品が製造されているのかは把握できることになる。こうした問題を解決するために、化学プラントでオンライン・リアルタイムに簡単に計測できる温度、圧力や流量というプロセス変数を用いて、オンライン・リアルタイム監視が難しい製品濃度や物性などをリアルタイムに予測できる仕組みとしてソフトセンサーが開発され、現在多くの化学プラント、その他の製造装置などで利用されている⁷⁾。

こうして製造された製品は社会に提供されていくが、いずれ使用済みとなり廃棄される。ここで必要となる概念は、「どう物質循環させるか」である。これは廃棄物の概念を捨ててこれらの回収品（未利用資源とでも呼ぶことにしよう）をどのように物質循環サイクルに乗せてゼロエミッションを実現するかという問い合わせである。ここでも未利用資源の量とその物質変換技術、そして再生品利用のニーズ