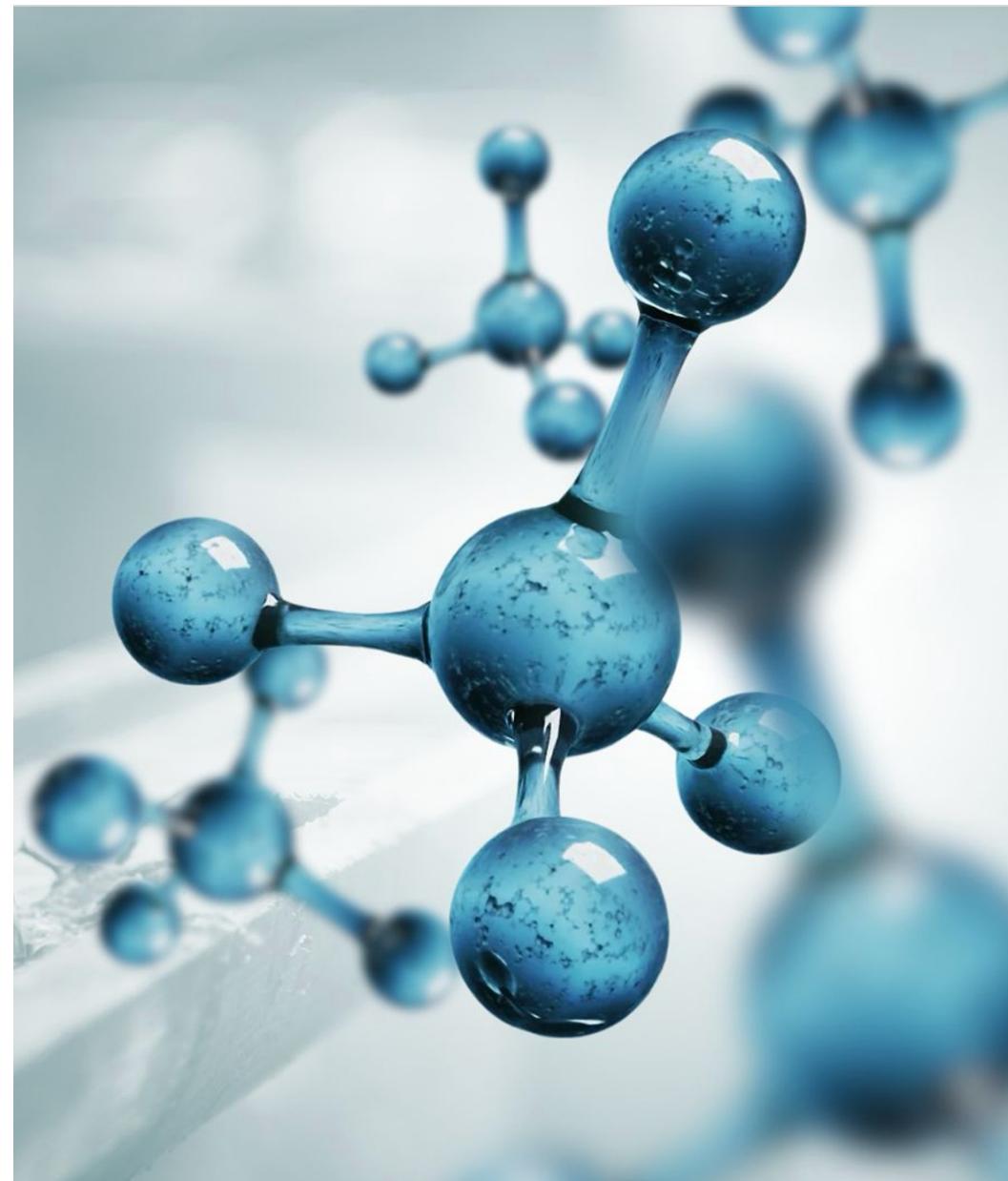


内閣府 第13回マテリアル戦略 有識者会議
2025年12月8日（月）15:00-17:00

AI基盤モデルとエージェントによる 材料化学産業のR&D改革

日本IBM株式会社
東京基礎研究所
武田征士, Ph.D
Principal Research Scientist



我が国の材料産業を取り巻く状況

新材料開発は、半導体、自動車、鉄鋼などあらゆるものづくり産業の進化を支える、日本の重要な産業基盤です。しかし今、各国の規制強化や地政学的リスクの高まり、AI・データ戦略の加速により、我が国の材料産業はかつてない構造的転換点に立たされています。

急変するグローバル環境に伴う産業全体が抱えるリスク

1. 法規制のリスク

急変する国内外の法規制による訴訟リスク・市場アクセスの制限

- PFAS訴訟（3M社 最大1.8兆円、Dupontら化学3社1,700億円）、EU REACH規則 PFAS約1万種規制
- 炭素纖維 ELV指令（26年撤回予定）
- EU REACH, RoHS指令, WEEE指令
- 化審法、改定薬機法、等



2. 地政学的リスク

国際情勢の変化による、従来のサプライチェーンの不安定化

- 素材外交（レアアース、レアメタル、黒鉛の輸出規制）
- 輸出先各国・川下産業の材料内製化（フォトレジスト、フッ化水素、EV材料など）
- 戦争・紛争による供給途絶リスク（ネオン・パラジウム供給危機）



3. 各国のデジタル戦略

材料開発の「デジタル霸権」を巡る国家間競争が激化

- 米国：半導体に527億ドル（CHIPS法）、量子に38億ドル超（NQI等）
- EU：Horizon Europe（約935億€／7年）+ InvestAI（2,000億€動員計画）
- 中国：「AI+」国家戦略+量子に153億ドル



日本の材料化学R&Dの現状（産官学）

従来の強みであった「現場力」が、高度なデジタル競争時代にはスピード感に欠き、構造的な弱点に転じている。

1. 知見や技術の属人化

- 過度の現場依存
- 退職に伴う技術継承の困難
- AI、データサイエンスへの抵抗感

2. R&D投資・連携の停滞

- R&D投資額の伸び悩み
- オープンイノベーションの遅れ
- 基礎→応用の「死の谷」問題

3. 学術競争力の低下

- 材料分野の論文シェア低下（材料科学Top10%論文：10年間で▲23%減）
- 若手研究者・博士人材の不足
- 国際共同研究への参画減少

このままでは、2030年までに日本は「**素材敗戦**」を迎える？

従来の属人的な材料開発を脱却し、AIや量子コンピュータなど次世代コンピューティング技術をフル活用したR&D体制への、**トップダウンでの戦略的な転換**が急務です。

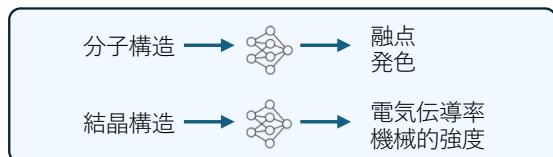
材料化学におけるAI技術の最新状況

AIの急速な発達により、材料開発のパラダイムは大きく変わろうとしています。
これらをプラットフォーム化し、「経営資源」として統合的に整備・活用できるかが、日本の材料産業の命運を握ります。

1. 古典的なAI・機械学習

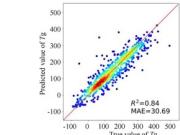
1990年代~2020年代前半

材料構造 v.s. 物性値など、入出力のペア（物質とそれに対応する「ラベル」）を用意して、その相関をモデル学習。さまざまな予測（順問題）、生成（逆問題）に利用。



(例1) 材料の物性値を予測

- ・ポリマーの融点予測
- ・低分子薬の標的蛋白への結合係数予測



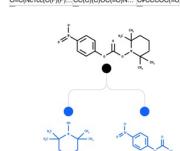
(例2) 材料構造を生成（設計）

- ・分子構造や結晶構造の候補を改良・新規生成



(例3) 合成パスを予測

- ・分子を合成する方法（合成経路・プロセス条件）を予測・生成・最適化



2. 基盤モデル・LLM

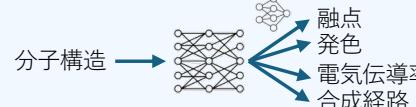
2020年頃~

ラベル（物性値など）のない大量データで大規模モデルを自己教師あり学習（事前学習）することで、データの基本的なパターンを捉える。
その後、ラベルのある少量データで、特定のタスクへ向けてファインチューニング。

自己教師あり学習（事前学習）：上流タスク
(大量データ)



ファインチューニング：下流タスク
(少量データ)



(例1) ChemBERTa : SMILESデータ

- ・事前学習：7,700万分子
- ・下流タスク：MoleculeNet物性予測

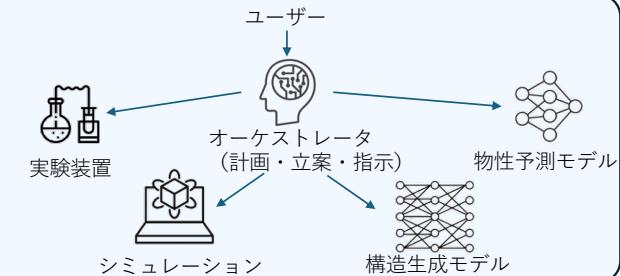
(例2) SELF-BART : SELFIESデータ

- ・事前学習：10億分子
- ・下流タスク：MoleculeNet物性予測+分子生成

3. エージェント

2023年頃~

LLMを中心とした外部ツール（データベース、AIモデル、実験装置など）と連携して、計画→実行→評価→改善を自律的に繰り返すシステム。
自然言語による指示で複雑な研究タスクを遂行。



(例1) ChemCrow, Bran et al. (2024)

指示：「虫除け剤を合成して下さい」
→文献検索→DEET特定→合成ルート計画→ロボット自動合成

(例2) LLMatDesign, Jia et al. (2024)

指示：「バンドギャップ1.4 eVの材料を設計して下さい」
→元素置換を提案→ML予測→自己反省→次の修正（10回で目標達成）

(例3) ChatMOF, Kang et al. (2024)

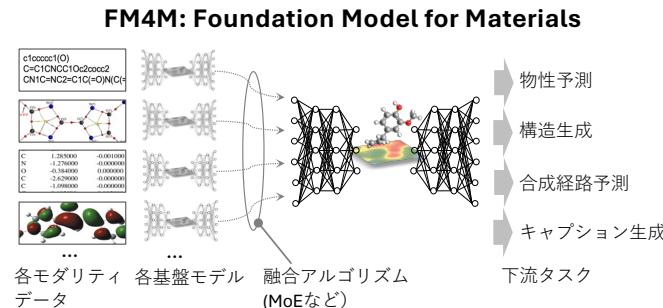
指示：「水素吸着量500 cm³/cm³のMOFを作って下さい」
→遺伝的アルゴリズムで最適化→構造生成→MD計算で検証

材料化学産業用AIに関するIBMの取り組み（IBM Material DX）

数10億パラメータをもつ材料科学用のマルチモーダル基盤モデル、対話型エージェント、そしてグローバルなオープンコミュニティを構築し、材料産業のパートナー様とともに、AIによる材料R&Dの変革に取り組んでいます。

基盤モデル

材料構造のマルチモーダルな特徴を捉え、大規模データによって事前学習したモデル。物性予測・分子生成など様々なタスクに応用。



世界最大規模：

- 数10億サンプルで事前学習済み（数10万GPU時間）
- 数10億パラメータ
- SMILES, 3次元座標などマルチモーダルデータで事前学習

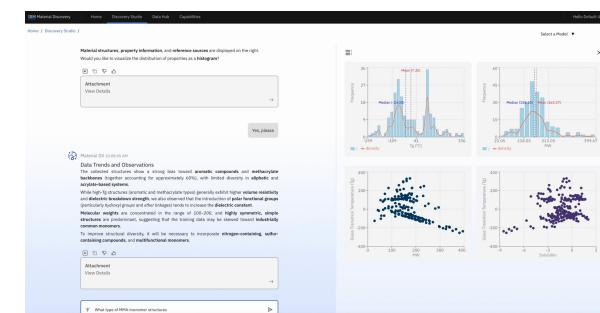
特徴：

- モジュラーな構造でオープン開発に向いている。
 - モデル拡張が容易。
 - 各stakeholderが担当部分のownershipを持ち、全体の開発に貢献できる。
- Nature誌、NeurIPS、ICML等AIトップ会議で、各種ベンチマークスコア首位。

エージェント

大規模データベース）、材料用基盤モデル（FM4M）、材料化学用LLMなどを複数組み合わせ、材料開発に関するタスクを自律的にプラン、実行。

- エージェントにより、以下のモデルや技術を連結、ユーザと対話しながら材料発見を進める。
- 各国の特許、材料関連の論文誌などの文献情報をもつデータベース
 - 材料情報（教科書など）で追加学習したLLM
 - Chain-of-Thoughtによる、化学的な根拠生成を行うLLM
 - FM4M（基盤モデル）および下流タスクモデル
 - IT非専門家でも容易に利用可能な、マルチモーダルな対話型UI



対話型のインターフェース

オープン開発

IBMは、FM4Mの主要部分をオープンソース化し、AI Allianceを通じたオープンな再利用、共同開発、コミュニティ形成を促進しています。

GitHub, Hugging Faceでのモデル公開

- 50万回以上の累計ダウンロード数
- 様々な研究機関（Acceleration Consortiumなど）による、再利用・追加開発



オープンコンソーシアムAI Allianceにおける、マテリアル・ワーキンググループの発足

- 材料メーカー、アカデミアの参画
- 定期技術セミナー（招待講演、デモ、ハンズオン）、データ共有、モデルのオープン開発
- オープンなイベント開催



IBM ResearchとJSRの共催する
マテリアル・ワーキンググループでのイベント活動

様々な材料分野におけるIBM Material DXの活用事例

お客様とのパートナーシップや社内外のプロジェクトを通じて、アカデミアおよびR&Dの実利用フェーズにわたる、様々な材料分野の課題を解いてきた実績があります。

フォトレジスト

環境毒性の低いフォトレジスト用の材料（PAG：光酸発生剤）を、約半年間で新規に発見

- Step1: Deep Searchにより、米国特許からデータ自動抽出
- Step2: 物理サロゲートモデルにより、物性値補完
- Step3: 分子生成モデルでPAG構造をデザイン

- 約**3,000種類**の多様性に富んだPAG構造を高速設計
 - **1分子/7秒**の速度でデザイン - 数日間かかる初期構造設計プロセスを**10-100倍程度短縮**

Step4: PAG分子を自動実験ラボRoboRXNで合成・検証

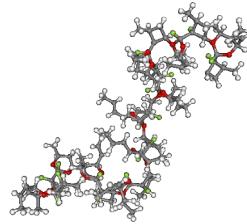
“Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics” (2022) **npj** | computational materials

カーボンリサイクル用ポリマー・フィルム

燃焼後回収に用いるCO₂分離フィルタリング用のポリマーフィルムを新規に設計する。

以下の性質を満たすポリマーフィルムの分子構造を設計

- 高い透過性(permeability)と選択性(selectivity)を持つ
 - 低成本
 - 高耐性、熱安定性



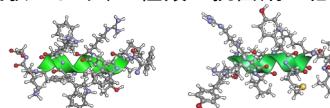
"AI powered, automated discovery of polymer membranes for carbon capture" | **Nature姊妹誌** **npj** | computational materials

抗菌作用のあるペプチド鎖

生成モデルにより新構造のペプチド鎖を設計、ウェットラボでの実験で抗菌作用確認。

- 従来手法
- 必要期間：2-4年
- 成功確率：1%以下

- AIがデザインした新規ペプチド鎖のうち、20種類を選択
 - 実験により、2種類の抗菌剤が低毒性を持つことを確認



Nature姊妹誌表紙揭載 Nature biomedical engineering

“Accelerating Antimicrobial Discovery with Controllable Deep Generative Models and Molecular Dynamics.”

各種産業におけるお客様とのパートナーシップ事例

JSR株式会社

- ・R&Dに関する人材育成も兼ねた長期パートナーシップ
 - ・半導体材料に関するMaterial DXプラットフォーム構築

L'oreal

- 中経目標「ロレアル・フォー・ザ・フューチャー」を達成するための、化粧品処方のための基盤モデル、DXプラットフォーム構築。今後数年間にわたり、世界中のロレアルの4,000人の研究者が活用。

国内半導体装置メーカー様

- 半導体装置内で使用する新材料の開発に貢献。

Demo Video

ユーザが分子を描画

AIがこののような
プランはどうですか?
とステップを提案

Now, please plan for 6 new molecular structures with higher water solubility than
C=C1CC(CC(=O)N[C@H]2CCN(C(=O)c3cccc3C)C23CC3)C1

Material DX 00:49:43

We will proceed with the following steps:
Step 1. Predict the water solubility of the target molecule using FM4M model. This step involves using the FM4M model to estimate the water solubility of the given molecular structure C=C1CC(CC(=O)N[C@H]2CCN(C(=O)c3cccc3C)C23CC3)C1. The predicted solubility value will serve as a baseline for generating new structures with improved solubility.
Step 2. Generate structural variations of the target molecule using the predicted property value as a baseline using FM4M model. In this step, we will utilize the FM4M model to generate a set of new molecular structures that are variations of the original target molecule. These new structures will be designed to have higher water solubility.

わが国の材料化学産業のさらなる成長のために

1. AI・量子コンピュータなど最新IT技術の、経営レベルでの戦略的導入が不可欠。
 - 現場からのボトムアップでは、特定タスクでの精度比較などの局所戦に陥って、戦略的アクションへ至る前に頓挫する事が多い。
 - GPUなどインフラ、人材育成などへの思い切った戦略的な投資判断が必要。
2. オープン＆クローズな取り組みの推進
 - AIなど最新コンピューティング技術の強さの源泉は、オープン開発。
 - 材料メーカーからは「オープンという概念自体が分野と合わない」という声も多くあった。
 - しかしマテリアルでも、**共有財産となる部分は可能な限りオープン開発にし、各社・各アカデミアの知財・ノウハウ部分はクローズにする**など工夫できる。
 - オープン部分（データベース、基盤モデル開発）は、国家予算を投じ、日本の戦略資源として整備すべき。
 - 基盤モデルは、下流タスクモデルよりは包括的だが、モデルの得手不得手に応じて複数存在して良い（唯一絶対のモデルは存在しない）。
3. グローバルなコミュニティをリードできる国際人材の育成
 - 日本人は現場の要素技術に強い一方、全体を俯瞰した「物語・ナラティブ」で国際議論やプロジェクトをリードする力が弱い。
 - 技術力を「発信力・構想力」に転換できる国際人材の育成が急務。