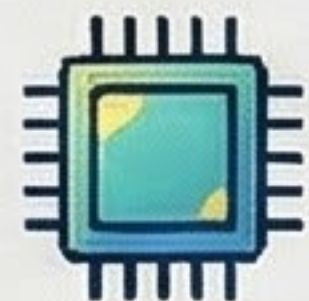
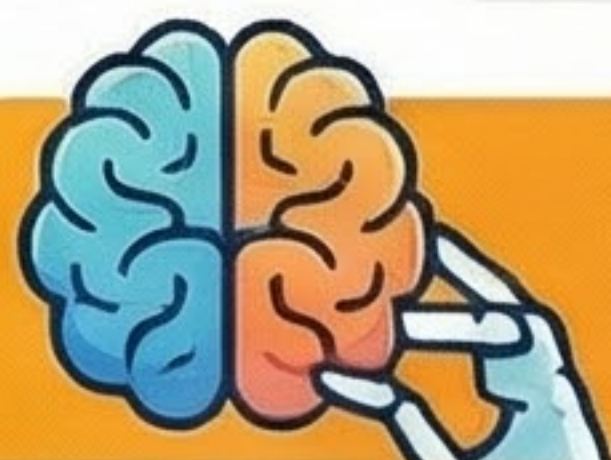


AI材料開発の新時代：東大式「思考するAI」 vs 巨大テックの「生成AI」



マテリアルズ・インフォマティクスは、従来の「予測」を超え、AIが自律的に仮説を立てて新材料を設計する「エージェント」の時代へ。本図では、その最先端を走る2つの異なる設計思想を比較します。



東京大学「MatAgent」：
対話と思考で設計する「研究パートナー」



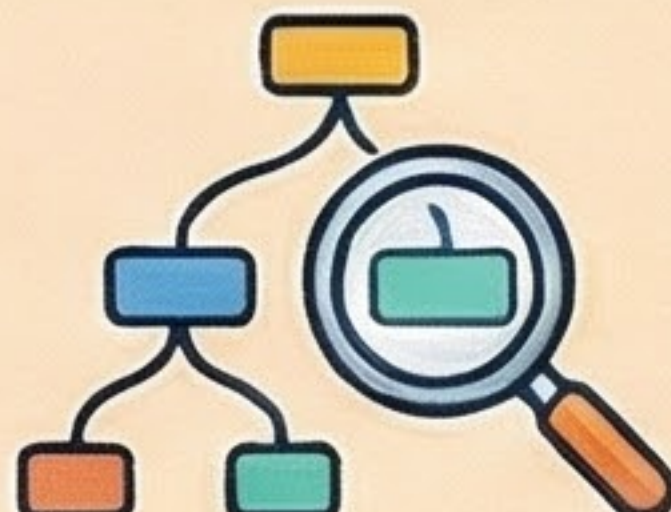
脳 (LLM)



手 (生成モデル)

「脳 (LLM)」と「手 (生成モデル)」の連携

LLMが思考・計画し、専門モデルが物理構造を具現化する分業体制。



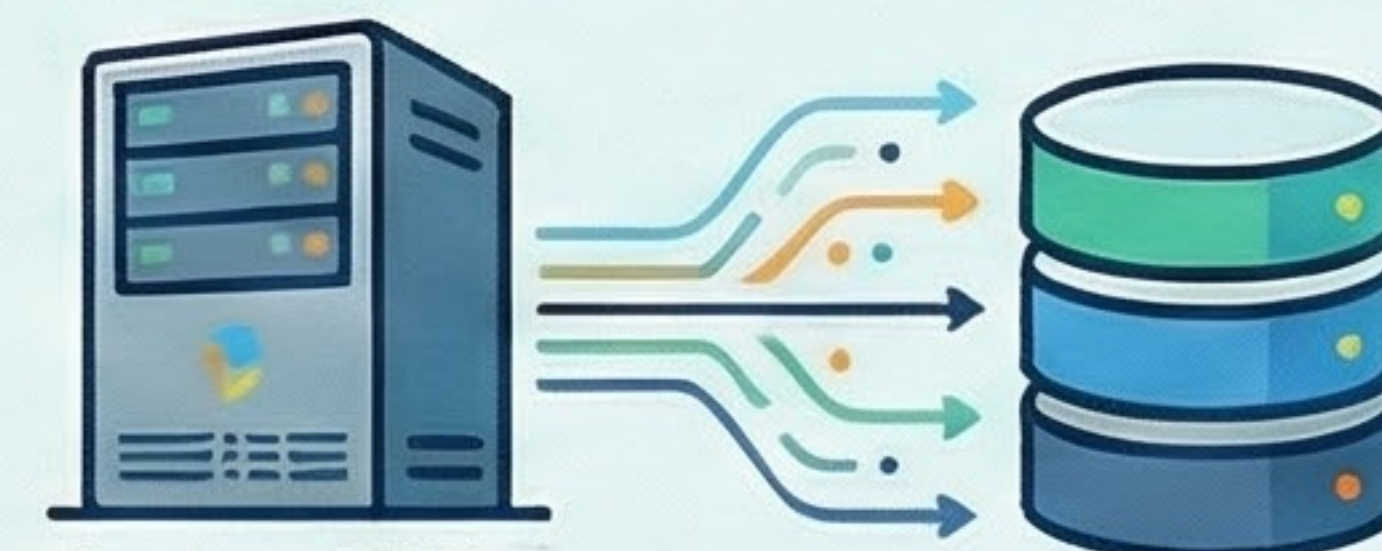
「なぜ？」に答える高い解釈性
AIの思考プロセスが自然言語で説明され、人間が妥当性を検証可能。

自律的な試行錯誤ループ

評価→フィードバック→修正を繰り返す、失敗から学び最適解へ迫る。



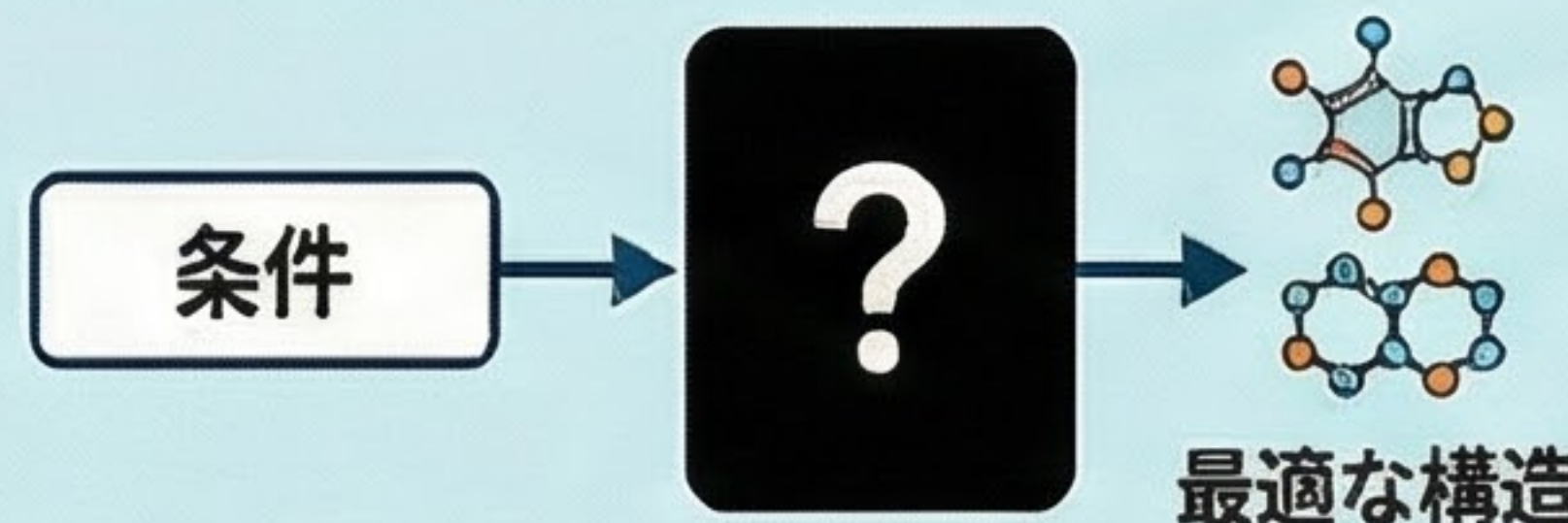
巨大テック企業AI：データと規模で探索する
「自動化エンジン」



データと計算力

圧倒的なデータと計算力

数百万件以上のデータで学習し、確率的に有望な材料を網羅的に探索。



条件



最適な構造

条件から構造を直接生成

欲しい特性を入力すると、AIが直接的に最適な構造を一括で出力する。



ブラックボックス

ブラックボックス型のアプローチ

高速・高精度だが、なぜその構造が生成されたかの理由は不明瞭。

比較項目	東京大学 MatAgent	企業モデル (MS/Google)
コア技術	LLM駆動+拡散モデル	生成AI / 深層学習
主な強み	解釈性と明示的推論	圧倒的な規模と探索力
プロセス	反復的な計画・提案ループ	直接生成 or 大規模スクリーニング