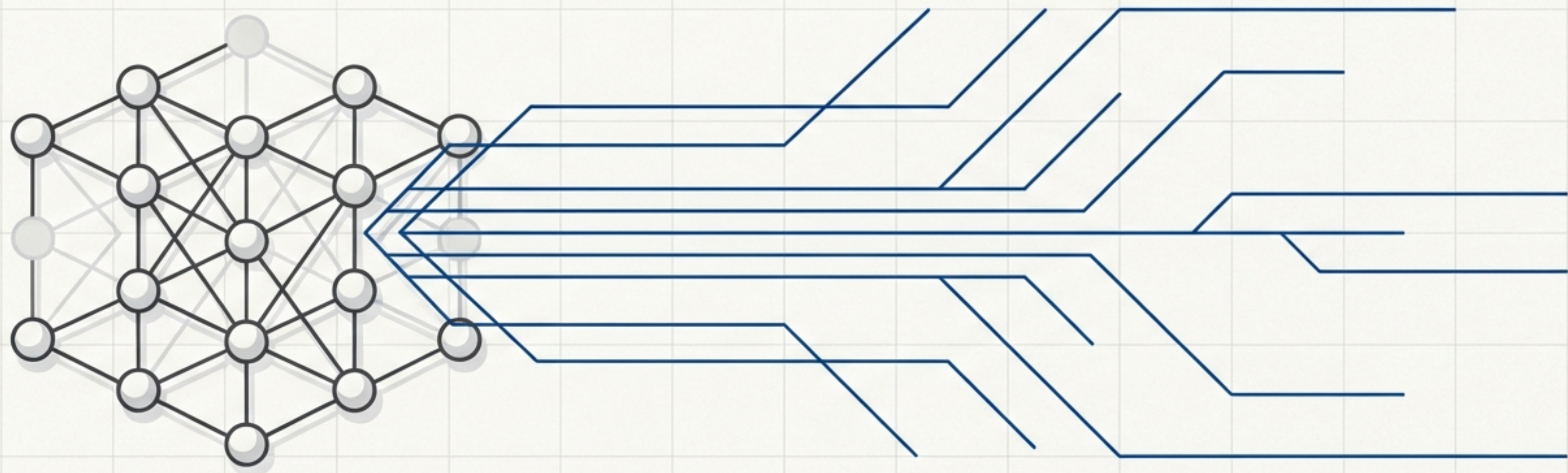


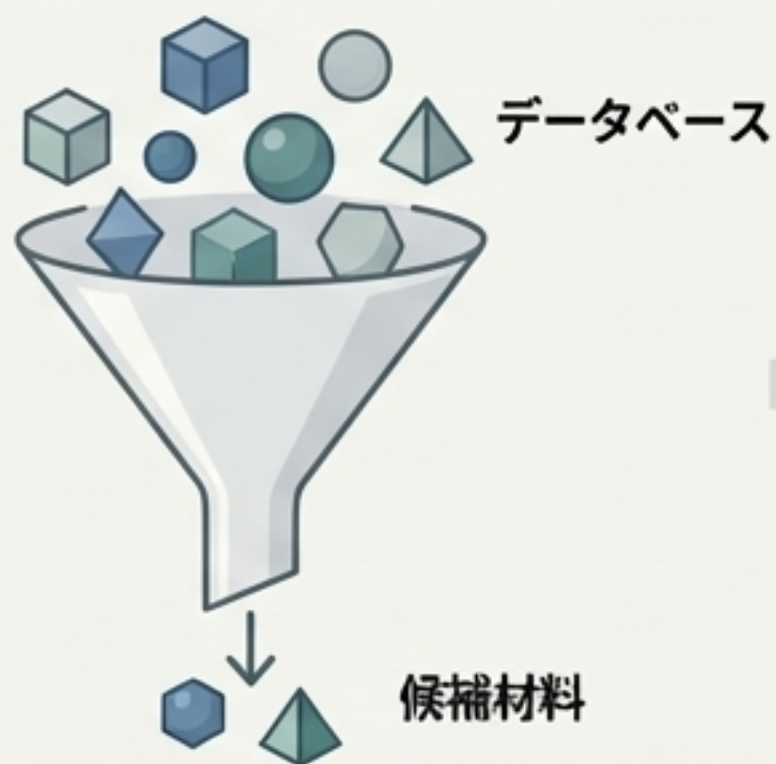
推論駆動型マテリアルズ・インフォマティクスの新地平

東京大学「MatAgent」と巨大テック企業による生成AI技術の比較深層分析



材料探索の進化：予測から生成、そして「自律的エージェント」へ

従来のスクリーニング



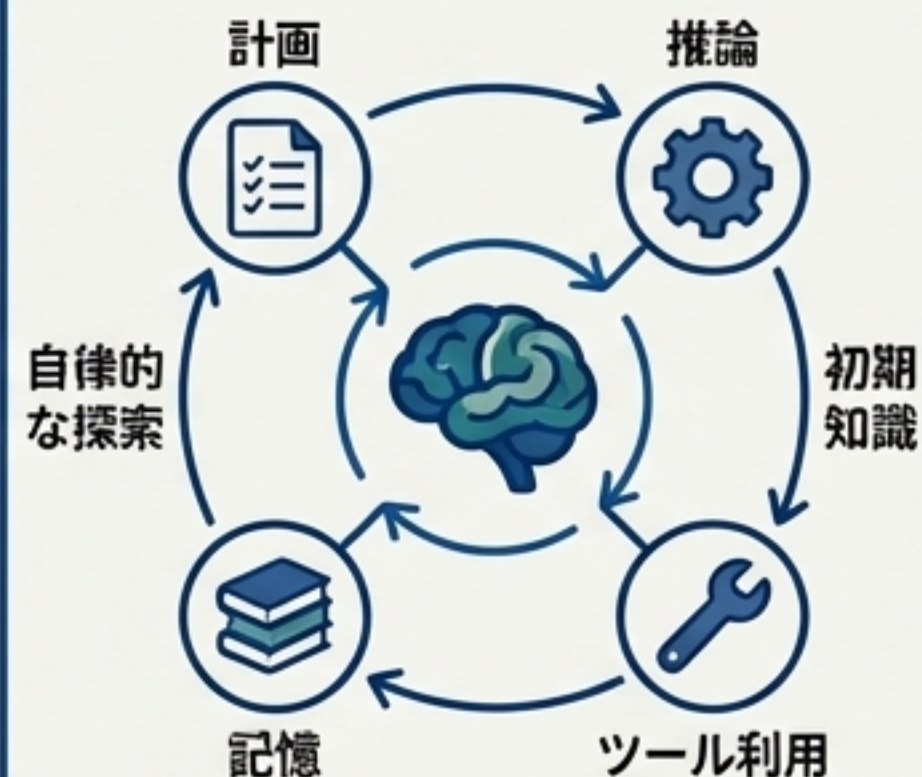
High-throughput screening: 既知のデータベースからのフィルタリング。

生成的逆設計



Generative inverse design: 所望の特性から構造を直接生成。

AIエージェント - MatAgent

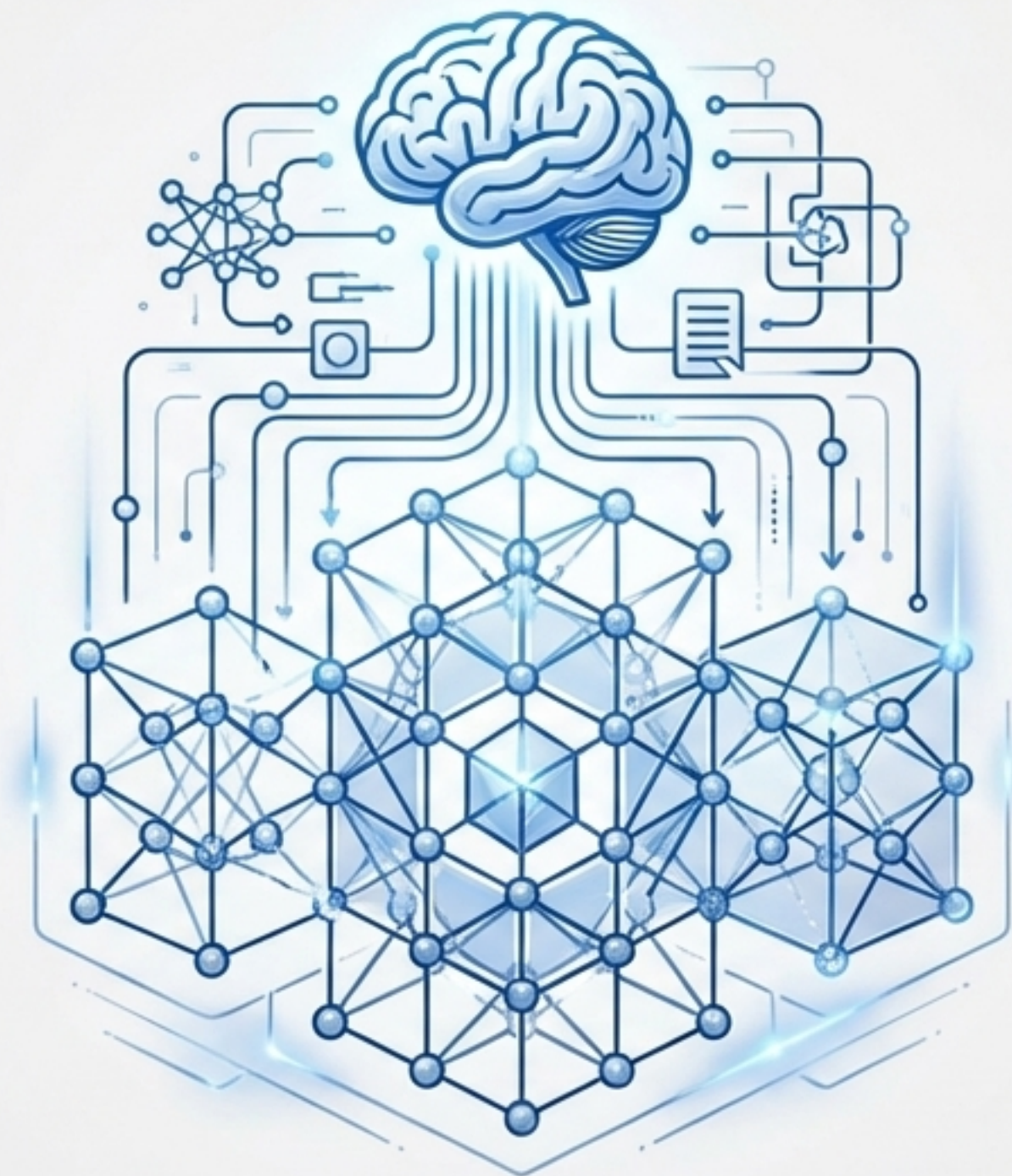


AI Agent: LLMによる推論、計画、記憶、ツール利用を統合した自律的な探索ループ。

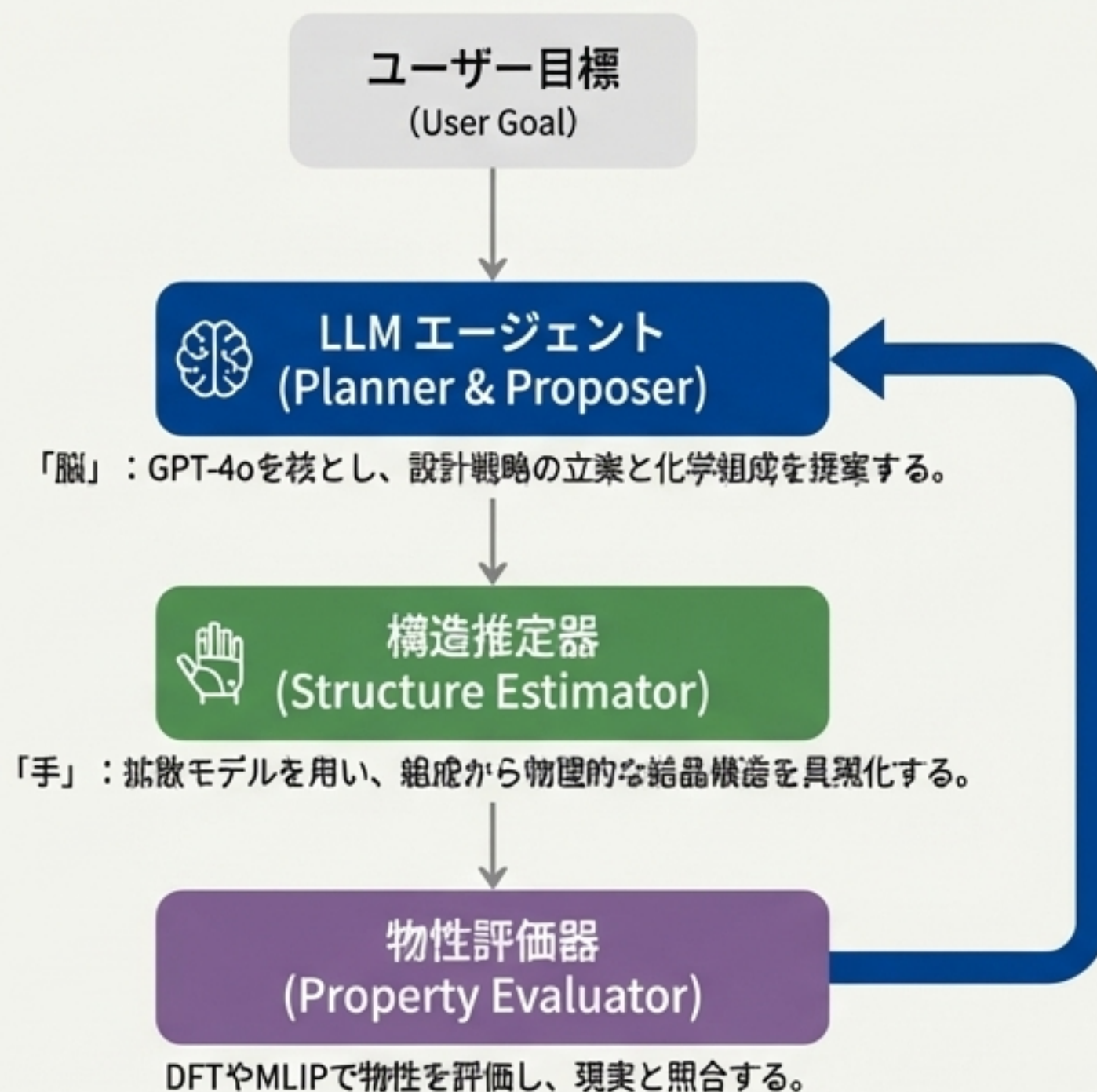
パラダイムは「予測」から「生成」へ、そして自律的に仮説検証を行う「エージェント」へと移行している。

MatAgent：LLMの「推論能力」を核とする、 対話可能な研究パートナー

- 東京大学（溝口照康教授、Takahara Izumi氏ら）が開発した無機材料設計のための画期的なフレームワーク。
- 単に構造を出力するのではなく、「**エージェント性**」を持つ。人間のように文献や物理法則を参照し、試行錯誤を通じて設計目標に到達する。

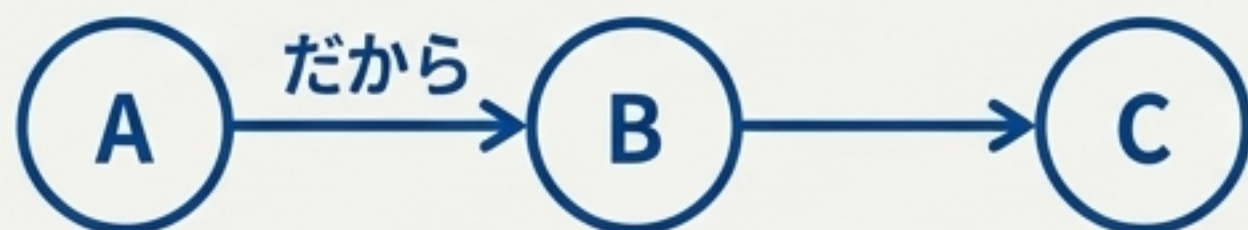


設計思想の核心：「思考する脳」と「構造を生成する手」の機能分離



「なぜこの材料か？」を言語で説明する、解釈性の戦略的価値

MatAgent (White-box) 明示的推論 (Explicit Reasoning)



LLMが自然言語で仮説を提示する。

『A元素とB元素のイオン半径差が大きいため、ペロブスカイト構造の歪みを誘起して強誘電性を高める』

人間の専門家がAIのロジックを評価・検証可能。
科学的発見の serendipity を促す。

Conventional AI (Black-box) 暗黙的相関 (Implicit Correlation)



深層学習モデルが潜在空間でベクトル操作を行う。
深層因为には、スミューカラー🎲で操作を行う。

数学的には正当でも、化学的な意味の解釈は困難。

ハルシネーションのリスクがあり、
AIの思考プロセスは検証不可能。

失敗から学ぶ自律的修正ループ：試行錯誤するAI



Step 1: Target & Initial Proposal

USER: 目標設定「バンドギャップ 1.5 eV」

MATAGENT (LLM): 知識ベースと周期表を参照し、最初の組成を提案: **SrTiO₃**



Step 2: Evaluation & Feedback (FAIL)

EVALUATOR: 特性評価器がバンドギャップを計算。結果: **3.2 eV**

フィードバック: 「目標値より高すぎる (+1.7 eV)」



Step 3: Reasoning & Correction

MATAGENT (LLM) 推論: 「**Sr** (ストロンチウム) は大きすぎる。よりイオン半径の大きい **Ba** (バリウム) に置換することで、格子定数を変化させバンド構造を調整する。」



Step 4: Re-proposal & Success

SYSTEM LOOP: 修正提案 **BaTiO₃** を再評価。

再評価結果: **~1.6 eV** (目標に近似)。プロセス完了。

この「推論・修正ループ」こそが、MatAgentを単なる計算機から研究パートナーへと昇華させる。

巨大テック企業の潮流：圧倒的データと計算力による「確率的生成」



Core Philosophy: MatAgentが「推論」に焦点を当ててる一方、巨大テック企業は「圧倒的な計算資源」と「大規模データ」を武器とする。



Method: アプローチの根幹は「確率的生成」。数百万のデータから物性と構造の暗黙的な相関を学習する。



Metaphor: これは狙い撃ち（Mat Agent）ではなく、巨大な底引き網（Big Tech）による探索である。

主要プレイヤーとそのアプローチ：MS、Google、IBM

Microsoft (MatterGen)	Google (GNoME / Co-scientist)	IBM (FM4M)
Technology: • End-to-End拡散モデル。所望の物性値から結晶構造を直接生成。 Philosophy: • 高効率な専門「工作機械」。R&DのOS化を目指すプラットフォーム戦略「Microsoft Discovery」。	Technology: • GNoMEによるGNNでの大規模探索（220万以上の新候補）。GeminiベースのマルチエージェントCo-scientist。 Philosophy: • 力技による「底引き網」的探索。ロボットと連携した「Self-driving Labs」を志向。	Technology: • 化学構造を文字列として扱う「化学言語モデル」（SMILES等）。 Philosophy: • 量子コンピュータとの連携による「量子・古典ハイブリッド」ワークフローという長期的ビジョンが独自性。

技術比較：東京大学 MatAgent vs 企業製AIモデル

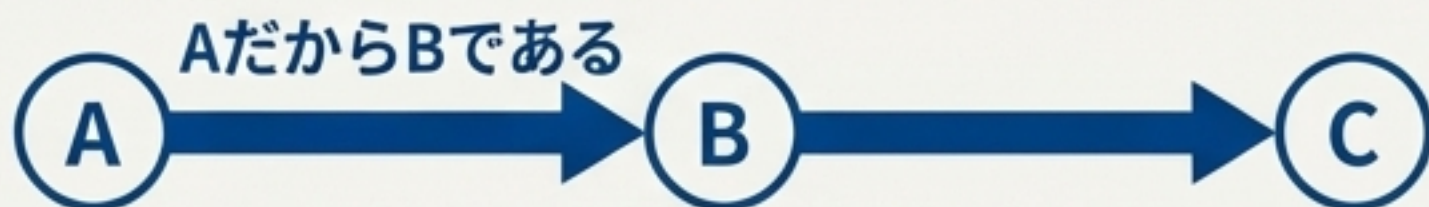
比較項目	東京大学 MatAgent	MS MatterGen	Google GNoME / Co-scientist
コア技術 Architecture	LLM駆動 + 拡散モデル 中央エンジンとしてLLMを使用し、計画と推論を実行。構造推定には拡散モデルを使用。	生成AI（Generative AI） 特性誘導型の生成モデル。ラベル付きデータセットによるファインチューニングを採用。	Deep Learning / Multi-agent GNoMEのグラフネットワークと、Gemini 2.0を用いたマルチエージェントシステム。
主な強み Key Strengths	解釈性と明示的推論 LLMが組成提案の理由を言語で説明。「なぜこの材料か」という解釈性を担保。	条件付き生成 磁性や機械的特性など、任意の条件（制約）に基づいて新規材料を生成可能。	圧倒的な規模と探索 220万の新規結晶発見と、自己改善サイクルによる新規仮説の立案。
プロセス Methodology	反復的な計画・提案 計画(Planning) → 提案(Proposition) → 評価のループを回し、フィードバックを活用。	プロバビリティ誘導型探索 スクリーニング法の限界を超え、より広い探索空間から材料候補を直接生成。	安定性評価と自己改善 Convex Hull基準に基づく安定性フィルタリングと、AIエージェント間の協調。

東京大学のMatAgentは「解釈性」と「言語的推論」に特化しているのに対し、MicrosoftのMatterGenは「生成精度」と「条件付き生成」、GoogleのGNoMEは「圧倒的な規模」と「探索」に重点を置いている。

知能の実装：言語化された「明示的推論」 vs モデルに内包された「暗黙的相関」

MatAgent

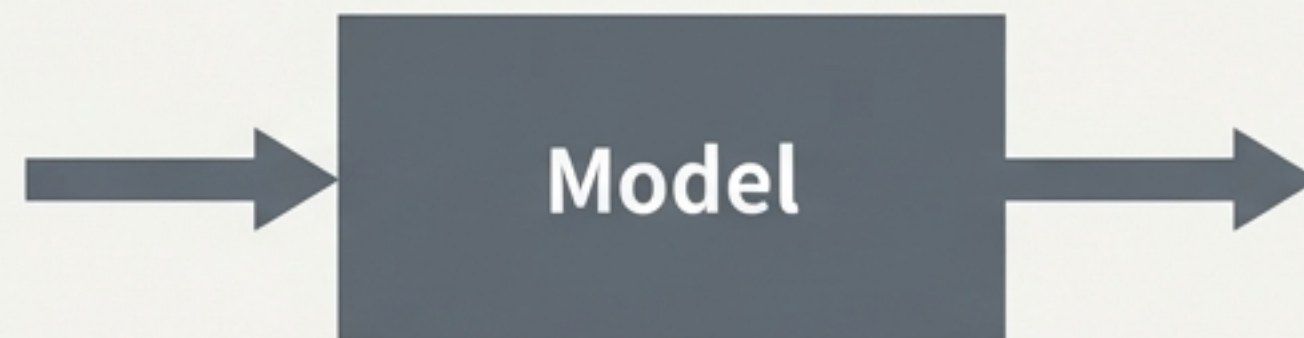
Explicit Reasoning (明示的推論)



- 知能はLLMの言語的推論に宿る (Intelligence resides in LLM's linguistic reasoning)。
- プロセスは透明 (White-box) で、人間が介入・修正可能。
- 理論的裏付けが重要な高機能材料や、データが少ない領域で強力。

Big Tech

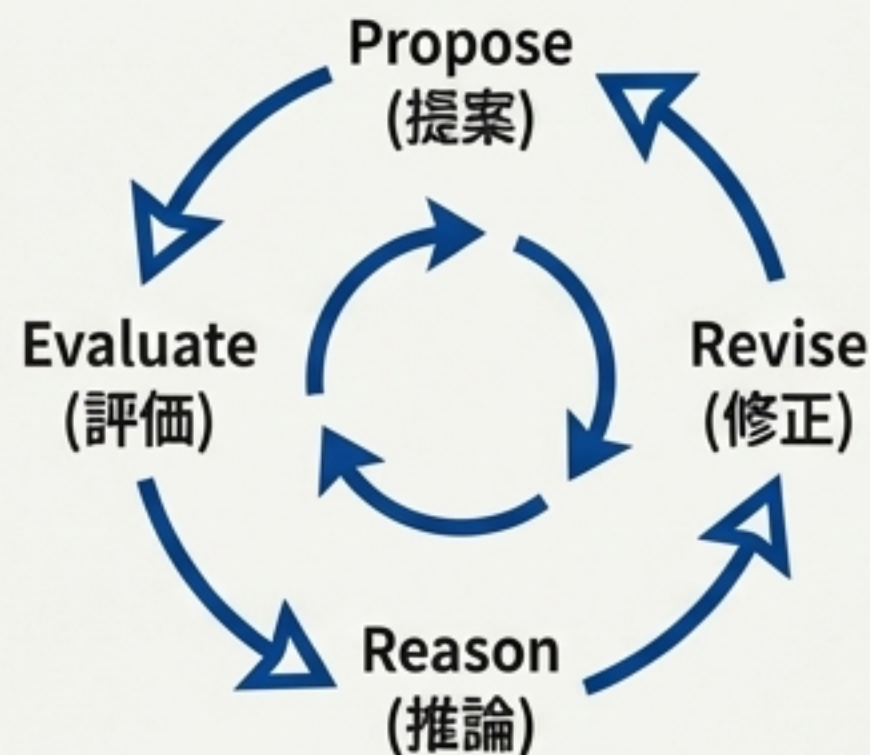
Implicit Correlation (暗黙的相関)



- 知能はモデルパラメータ内の確率的相関に埋め込まれている (Intelligence is probabilistic correlations within the model)。
- プロセスは不透明 (Black-box)。「なぜ？」には答えない。
- 膨大なデータで学習した場合、極めて高い精度と網羅性を発揮。

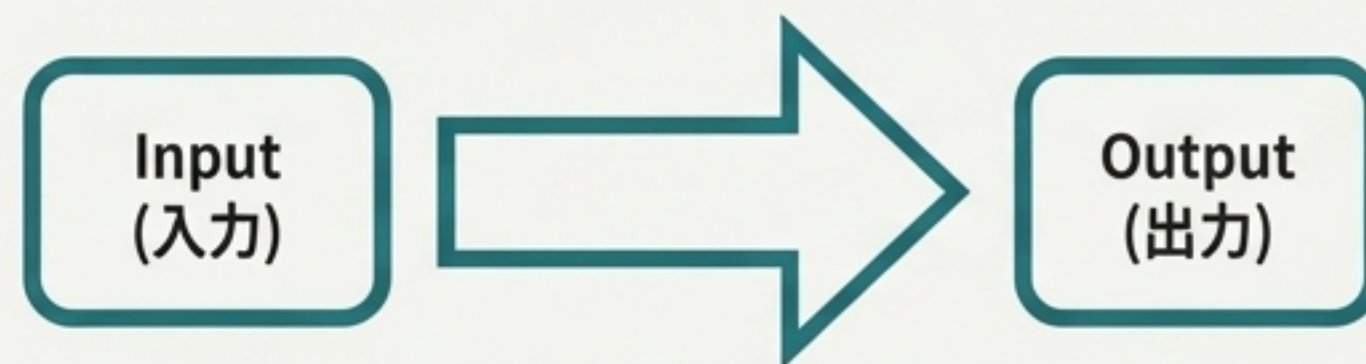
プロセスの制御：「対話・反復型」の設計 vs 「一発生成型」の探索

Iterative & Interactive (対話・反復型)



- 提案、評価、修正案という反復プロセスを前提とする。
- 人間の研究者のDMTA (Design-Make-Test-Analyze) サイクルを模倣。
- 失敗から学び、徐々に最適解へ収束させることが可能。

One-shot Generation (一発生成型)



- 条件を与えれば、一回の処理で最適な構造分布を出力することを目指す。
- 計算コストのかかる反復を避け、プロセスは非常に高効率。
- 意図と異なる結果の場合、微修正は困難で、一からやり直す必要がある。

データ戦略：「スモールデータ」での適応力 vs 「ビッグデータ」による網羅性

MatAgent

Small Data Adaptability (スモールデータ適応力)



- スモールデータ環境下でも機能するよう設計。
- LLMの持つ一般的な化学知識（教科書レベル）と外部ツールを活用。
- In-context Learningにより、少数の事例でタスクに適応可能。
- 大規模データセットが存在しないニッチな材料開発で大きな利点。

Big Tech

Big Data Dominance (ビッグデータ網羅性)



- 根本的に「ビッグデータ」を前提とする。
- 数十万～数百万件のデータで事前学習し、汎化性能を獲得。
- 訓練データに存在しない新規材料系では性能が低下する可能性。

日本の産業界への示唆：「匠の技」との融合と「ニッチトップ戦略」の加速

1. 熟練研究者の「暗黙知」との融合



MatAgentの対話的・解釈可能な性質は、日本の「擦り合わせ」技術やベテラン研究者の経験と親和性が高い。AIと「議論」しながら、研究者の直感を設計プロセスに組み込むことで、ブラックボックスAIへの抵抗感を低減し、導入を促進する。

2. ニッチトップ戦略の加速



巨大モデルで正面から競合するのではなく、特定の高付加価値領域（例：全固体電池電解質、特殊媒）に特化した「専門家エージェント」を開発する戦略が有効。限られた専データとドメイン知識武器に、その領域で世界最高の設計AIを構築できる可能性がある。

結論：材料設計の「知能化」と「大規模化」—融合する未来へ



MatAgentは材料設計の「知能化・透明化」を、巨大テックは材料発見の「自動化・大規模化」を象徴する。

これらは排他的な道ではない。未来は両者の融合にある。

アカデミア発の高度な推論制御（脳）が、産業界の強力な生成モデル（手）を導いていく。

2025年は、その融合の始まりの年として記憶されることになるはずだ。

ご清聴ありがとうございました

本分析に関するお問い合わせは...

主要参考文献: Accelerated Inorganic Materials Design with Generative AI Agents (Univ. of Tokyo, 2025) 他