TROY TECHNICAL

マテリアルインフォマティクス
ウィークリーレポート

2026年11月14日-11月20日 | Issue 2026-W46

データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ

12	10
分析対象	重点テーマ

発行 2026-11-20 | 日本語版 | 承認済み固定表紙



マテリアルインフォマティクス:個別発表から認定証拠へ境界が移動

日本語記事12件を棚卸しし、意思決定に重要なテーマを選定した。

シグナル 01 | データ取得

NVIDIA cuPotential|分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能

NVIDIAが、分子動力学(MD)シミュレーションを加速させるためのライブラリ「cuPotential」を公開しました。T4からRTX PRO 6000 BlackwellまでのGPU環境において、24,000〜400,000原子のシステムで2倍から3倍以上のエンドツーエンドの高速化を実現しています。これにより、計算コストを抑えつつ、従来の標準的な手法を上回る精度とエネルギードリフトの抑制が可能になります。

シグナル 02 | モデル化

MatOSとは|材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細

北京の中関村科学院および中関村人工知能研究院が、材料研究開発(R&D)に特化したAIエージェントシステム「MatOS」をオープンソース化した。MatOSは3,000以上のデータセットや48の計算ソフトを統合し、3,000万件以上の候補構造から97件の固体電解質を抽出するなど、高度な自律研究能力を示す。これにより、従来は困難だった研究プロセスの再利用や、複雑なワークフローの自動構築が可能になる。

シグナル 03 | 候補設計

MACE-MP-0|リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法

機械学習の基盤モデルを微調整することで、リチウム金属負極と電解液の界面で発生する固体電解質界面(SEI)の形成および劣化反応を高精度にシミュレートする手法が開発されました。微調整後のモデル(MACE-MP-0-R4)は、電解質構造において力(force)の平均二乗誤差を52 millielectronvolts per angstromまで低減し、密度汎関数理論(DFT)と同等の精度を実現しています。これにより、従来は計算コストの制約で困難だったナノ秒スケールの界面化学ダイナミクスの解析が可能になります。

シグナル 04 | 実験

リチウム空気電池|AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能

AIと密度汎関数理論(DFT)を統合したフレームワークにより、リチウム空気電池の性能を飛躍的に向上させるNi-Co二原子触媒(DACs)が開発されました。この触媒は反応経路を従来の2電子経路から4電子経路(LiOH生成)へ制御し、約60,000 mAh g-1の放電容量と2075サイクルの安定した寿命を実現しています。また、正極触媒としてだけでなく、負極のデンドライト成長を抑制する保護層としても機能します。これにより、エネルギー密度の極めて高い次世代電池の実用化に向けた新たな設計指針が提示されました。

編集判断

今週の経営判断は データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ に集中する。自社条件で関連証拠を再現できる場合だけ次へ進む。

経営の3アクション

1. 事業会社: 価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る.
2. 供給企業: 組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する.
3. 経営層: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.

証拠の読み方

FACTは収集記事に書かれた内容、事業への読みとACTIONは編集判断、UNKNOWNは記事だけでは確定しない項目を示す。リンク先があることだけで、全主張が独立検証済みとは扱わない。

条件と一緒に読む主要数値・証拠

2倍
A07

数値の条件
NVIDIAが、分子動力学(MD)シミュレーションを加速させるためのライブラリ「cuPotential」を公開しました。T4からRTX PRO 6000 BlackwellまでのGPU環境において、24,000〜400,000原子のシステムで2倍から3倍以上のエンドツーエンドの高速化を実現しています。これにより、計算コストを抑えつつ、従来の標準的な手法を上回る精度とエネルギードリフトの抑制が可能になります。

000万
A09

数値の条件
北京の中関村科学院および中関村人工知能研究院が、材料研究開発(R&D)に特化したAIエージェントシステム「MatOS」をオープンソース化した。MatOSは3,000以上のデータセットや48の計算ソフトを統合し、3,000万件以上の候補構造から97件の固体電解質を抽出するなど、高度な自律研究能力を示す。これにより、従来は困難だった研究プロセスの再利用や、複雑なワークフローの自動構築が可能になる。

2075サイクル
A01

数値の条件
AIと密度汎関数理論(DFT)を統合したフレームワークにより、リチウム空気電池の性能を飛躍的に向上させるNi-Co二原子触媒(DACs)が開発されました。この触媒は反応経路を従来の2電子経路から4電子経路(LiOH生成)へ制御し、約60,000 mAh g-1の放電容量と2075サイクルの安定した寿命を実現しています。また、正極触媒としてだけでなく、負極のデンドライト成長を抑制する保護層としても機能します。

100万
A03

数値の条件
粉末X線回折(PXRD)データから結晶系、空間群、格子定数を同時に予測する深層学習フレームワーク「AlphaDiffract」が開発されました。3,100万件以上のシミュレーションデータで学習し、RRUFFデータセットを用いた実測値の検証では、結晶系で81.7%、空間群で66.2%の精度を達成しています。

89.33%
A04

数値の条件
インド工科大学デリー校などの研究チームが、科学論文の表データから材料科学の知識を自動的に抽出・統合するフレームワーク「MatSKRAFT」を開発しました。本手法は、物性抽出でF1スコア89.33%、組成抽出で71.35%を達成し、既存の最先端大規模言語モデル(LLM)を大幅に上回る精度と、6〜496倍の処理速度を実現しています。

数値の読み方
数値は収集記事が示した条件と一緒に掲載する。試験法、寸法、温度、商用段階が異なる値を、条件補正なしで比較しない。

バリューチェーンはどこで動いたか

各段階に主テーマと補助テーマを接続する。矢印は装飾ではなく、次工程へ渡す証拠を示す。

1

データ取得

P01/P06

NVIDIAが、分子動力学(MD)シミュレーションを加速させるためのライブラリ「cuPotential」を公開しました。

2

モデル化

P02/P07

北京の中関村科学院および中関村人工知能研究院が、材料研究開発(R&D)に特化したAIエージェントシステム「MatOS」をオープンソース化した。

3

候補設計

P03/P08

機械学習の基盤モデルを微調整することで、リチウム金属負極と電解液の界面で発生する固体電解質界面(SEI)の形成および劣化反応を高精度にシミュレートする手法が開発されました。

4

実験

P04/P09

AIと密度汎関数理論(DFT)を統合したフレームワークにより、リチウム空気電池の性能を飛躍的に向上させるNi-Co二原子触媒(DACs)が開発されました。

5

量産・統制

P05/P10

NVIDIAは、科学的発見を加速させるためのフレームワーク「Nemotron for Science」を発表した。オープンモデルのNemotron 3.5 Super VLを基盤に、化学データセット「LitmusBench v0.

各受渡しで必要な証拠

データ取得 → モデル化	試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.
モデル化 → 候補設計	試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.
候補設計 → 実験	試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.
実験 → 量産・統制	試験条件、受入基準、故障データ、担当、判断日を渡し、再確認する: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.

共通管理点

担当者が関連証拠を再現し、次を記録するまで商用判断へ進めない: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.

プライオリティマップ:実装成熟度と次の判断場所



P01	NVIDIA cuPotential|分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能 事業・制度・供給 | 根拠: 標準
P02	MatOSとは|材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細 システム・導入 | 根拠: システム
P03	MACE-MP-0|リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法 技術・工程 | 根拠: 統合・事業語なし
P04	リチウム空気電池|AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能 事業・制度・供給 | 根拠: 指針
P05	NVIDIA Nemotron for Science|科学特化型エージェント構築の性能と活用事例 事業・制度・供給 | 根拠: インフラ
P06	AlphaDiffract|粉末X線回折データから結晶構造を自動解析する深層学習フレームワーク 技術・工程 | 根拠: 統合・事業語なし
P07	MatSKRAFT|材料科学の表データから知識を大規模抽出するフレームワークの性能 システム・導入 | 根拠: 統合
P08	ワイヤレス光チップ|反応温度をリアルタイム監視する0.5mmデバイスの性能と用途 システム・導入 | 根拠: 用途
P09	NVIDIA DAQIRI|GPUネイティブなデータ収集による科学計測のリアルタイムAI化 技術・工程 | 根拠: 統合・事業語なし
P10	Daviator|VASPのGPUボトルネックを解消するバッチ処理と混合精度の性能 システム・導入 | 根拠: 導入

再現可能な配置ルール
横軸は研究・試作・共同評価・製品採用・量産の5段階。縦の帯は次の判断場所を技術・工程、システム・導入、事業・制度・供給に分ける。まず記事見出しの根拠語を使い、見出しで判断できない場合だけ概要を参照する。上下は影響の大小を意味しない。円径は編集スコアを示す。

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

P01 NVIDIA cuPotential|分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能

A07 | データ取得 | 研究

2026-11-16

FACT

NVIDIAが、分子動力学(MD)シミュレーションを加速させるためのライブラリ「cuPotential」を公開しました。T4からRTX PRO 6000 BlackwellまでのGPU環境において、24,000〜400,000原子のシステムで2倍から3倍以上のエンドツーエンドの高速化を実現しています。これにより、計算コストを抑えつつ、従来の標準的な手法を上回る精度とエネルギードリフトの抑制が可能になります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP01の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 19/25 | 成熟度 1/5 | 判断場所: 事業・制度・供給

P02 MatOSとは|材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細

A09 | モデル化 | 試作

2026-11-17

FACT

北京の中関村科学院および中関村人工知能研究院が、材料研究開発(R&D)に特化したAIエージェントシステム「MatOS」をオープンソース化した。MatOSは3,000以上のデータセットや48の計算ソフトを統合し、3,000万件以上の候補構造から97件の固体電解質を抽出するなど、高度な自律研究能力を示す。これにより、従来は困難だった研究プロセスの再利用や、複雑なワークフローの自動構築が可能になる。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP02の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 19/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: システム・導入

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

P03 MACE-MP-0|リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法

A11 | 候補設計 | 試作

2026-11-16

FACT

機械学習の基盤モデルを微調整することで、リチウム金属負極と電解液の界面で発生する固体電解質界面(SEI)の形成および劣化反応を高精度にシミュレートする手法が開発されました。微調整後のモデル(MACE-MP-0-R4)は、電解質構造において力(force)の平均二乗誤差を52 millielectronvolts per angstromまで低減し、密度汎関数理論(DFT)と同等の精度を実現しています。これにより、従来は計算コストの制約で困難だったナノ秒スケールの界面化学ダイナミクスの解析が可能になります。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP03の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

P04 リチウム空気電池|AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能

A01 | 実験 | 試作

2026-11-18

FACT

AIと密度汎関数理論(DFT)を統合したフレームワークにより、リチウム空気電池の性能を飛躍的に向上させるNi-Co二原子触媒(DACs)が開発されました。この触媒は反応経路を従来の2電子経路から4電子経路(LiOH生成)へ制御し、約60,000 mAh g-1の放電容量と2075サイクルの安定した寿命を実現しています。また、正極触媒としてだけでなく、負極のデンドライト成長を抑制する保護層としても機能します。これにより、エネルギー密度の極めて高い次世代電池の実用化に向けた新たな設計指針が提示されました。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP04の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 事業・制度・供給

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

P05 NVIDIA Nemotron for Science|科学特化型エージェント構築の性能と活用事例

A05 | 量産・統制 | 試作

2026-11-18

FACT

NVIDIAは、科学的発見を加速させるためのフレームワーク「Nemotron for Science」を発表した。オープンモデルのNemotron 3.5 Super VLを基盤に、化学データセット「LitmusBench v0.2」やポストトレーニングのレシピを組み合わせ、専門的な科学エージェントの構築を支援する。これにより、研究者は化学実験やタンパク質設計などの高度なリーズニングを必要とするタスクを、自社インフラ上で安全に実行可能になる。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP05の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 事業・制度・供給

P06 AlphaDiffract|粉末X線回折データから結晶構造を自動解析する深層学習フレームワーク

A03 | データ取得 | 試作

2026-11-15

FACT

粉末X線回折(PXRD)データから結晶系、空間群、格子定数を同時に予測する深層学習フレームワーク「AlphaDiffract」が開発されました。3,100万件以上のシミュレーションデータで学習し、RRUFFデータセットを用いた実測値の検証では、結晶系で81.7%、空間群で66.2%の精度を達成しています。専門家の介入が必要だった従来の反復的な解析手法を、シングルショットの自動予測に置き換えることで、ハイスループットな材料探索を加速させます。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP06の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

P07 MatSKRAFT|材料科学の表データから知識を大規模抽出するフレームワークの性能

A04 | モデル化 | 試作

2026-11-16

FACT

インド工科大学デリー校などの研究チームが、科学論文の表データから材料科学の知識を自動的に抽出・統合するフレームワーク「MatSKRAFT」を開発しました。本手法は、物性抽出でF1スコア89.33%、組成抽出で71.35%を達成し、既存の最先端大規模言語モデル(LLM)を大幅に上回る精度と、6〜496倍の処理速度を実現しています。これにより、膨大な論文に埋もれていた実験データの体系的なデータベース化が可能となり、新たな材料発見を加速させます。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP07の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: システム・導入

P08 ワイヤレス光チップ|反応温度をリアルタイム監視する0.5mmデバイスの性能と用途

A02 | 候補設計 | 試作

2026-11-20

FACT

米国の研究チームが、反応容器内の温度をリアルタイムで監視できるサブミリメートルサイズのワイヤレス光チップを開発した。この0.5mmのデバイスは、外部LEDからの光をエネルギーに変え、温度に依存したパルスレートを送信することで、0.1°Cの精度で0.5秒ごとに温度を測定できる。これにより、自律走行ラボ(self-driving labs)におけるAI駆動の材料発見の加速や、工業プロセスにおける化学反応の安全監視への活用が期待される。

なぜ重要か

判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み

事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION

30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP08の評価票へ記録する。

UNKNOWN

記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: システム・導入

FACTは収集記事に接続し、事業への読み、ACTION、UNKNOWNは編集判断として分離する。

P09 NVIDIA DAQIRI|GPUネイティブなデータ収集による科学計測のリアルタイムAI化

A12 | 実験 | 試作　　2026-11-19

FACT
NVIDIAは、センサーデータを直接GPUメモリに転送し、リアルタイム処理を可能にするソフトウェア定義のデータ収集ライブラリ「DAQIRI」を提供しています。ローレンス・バークレー国立研究所が開発した電子顕微鏡カメラでは、500 Gbpsを超える超高速データストリームのリアルタイム処理を実現しました。これにより、ディスクへの書き出しを介さずに計測中にAIによる解析やフィードバックを行うことが可能になります。

なぜ重要か
判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み
事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION
30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP09の評価票へ記録する。

UNKNOWN
記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 2/5 | 判断場所: 技術・工程

P10 Daviator|VASPのGPUボトルネックを解消するバッチ処理と混合精度の性能

A06 | 量産・統制 | 製品採用　　2026-11-18

FACT
NVIDIAが、平面波DFT計算ソフトVASPのGPUパフォーマンスを劇的に向上させる新ライブラリ「Daviator」を開発しました。k点バッチ処理と混合精度演算の導入により、CPU実行比で最大22倍の高速化と最大75%のコスト削減を実現しています。これにより、MLIP(機械学習原子間ポテンシャル)の学習に不可欠な膨大なDFTデータの生成コストと時間を大幅に削減することが可能になります。

なぜ重要か
判断上の焦点は「データ品質から実験検証まで閉じた学習ループ」である。見出しだけで採用せず、用途と運用条件で再現できるかを確認する。

事業への読み
事業会社は現在の認定・調達・製品ロードマップへの影響を比較する。材料・装置・技術企業は、組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する。

ACTION
30日以内に、価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る。結果と担当者をP10の評価票へ記録する。

UNKNOWN
記事だけでは確定しない項目: データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用。

編集スコア 18/25 | 成熟度 4/5 | 判断場所: システム・導入

関係者別プレイブックと0-5年ロードマップ

関係者	NOW | 0-30日	NEXT | 1-12か月	LATER | 1-5年
事業会社	価値の高い意思決定を選び、データ来歴と実験フィードバックを測る	量産相当条件で受入基準と停止基準を明示して評価する。	技術・供給者の変更を吸収できるポートフォリオと設計へ移る。
材料・装置・技術企業	組成、工程、試験条件、不確実性、失敗データを機械可読で提供する	顧客と信頼性・工程窓・故障解析の共通データを作る。	界面、履歴、ライフサイクル支援、回収サービスを標準化する。
商社・投資・法務	Map データ偏り、再現性、知財、モデル転移、実験費、採用.	能力、品質、変更通知、責任、代替、撤退を契約へ入れる。	地域・技術・顧客の集中リスクを分散する。

ロードマップ

NOW | 0-30日
証拠台帳
担当: Strategy + quality
成果物: claim, source, condition, owner

NOW | 0-30日
リスク選別
担当: Procurement + legal
成果物: unknowns, alternatives, stop

NEXT | 1-12か月
共同認定
担当: R&D + supplier
成果物: 工程窓・故障データ

NEXT | 1-12か月
商用ゲート
担当: Business + finance
成果物: 単位採算・供給能力

LATER | 1-5年
プラットフォーム戦略
担当: 経営
成果物: ポートフォリオ・界面ロードマップ

LATER | 1-5年
サービス層
担当: Operations + channel
成果物: 監視・保守・回復

Go / No-Goゲート

ゲート	担当	必要な証拠	中止条件
G1 証拠	品質	出典・試験条件・再現性	追跡可能な証拠なし
G2 統合	研究開発	界面・工程窓・故障解析	システム条件を満たさない
G3 商用	事業	能力・総原価・契約・代替	採算または供給が成立しない
G4 運用	運用	監視・保守・変更通知・撤退	責任ある運用計画なし

分析対象記事 | 01-12件目

全記事の正式タイトルと元記事URLを省略せず表示する。URLは折返しても全文を保持し、クリックできる。

ID	記事タイトル(全文)	元記事URL(全文・クリック可能)
A01	リチウム空気電池|AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能	https://doi.org/10.1038/s41467-026-79335-6
A02	ワイヤレス光チップ|反応温度をリアルタイム監視する0.5mmデバイスの性能と用途	https://www.chemistryworld.com/news/sand-grain-sized-wireless-chip-can-monitor-reactions-to-provide-data-for-self-driving-labs/4024549.article
A03	AlphaDiffract|粉末X線回折データから結晶構造を自動解析する深層学習フレームワーク	https://doi.org/10.1038/s41524-026-02388-0
A04	MatSKRAFT|材料科学の表データから知識を大規模抽出するフレームワークの性能	https://doi.org/10.1038/s41524-026-02359-5
A05	NVIDIA Nemotron for Science|科学特化型エージェント構築の性能と活用事例	https://blogs.nvidia.co.jp/blog/nvidia-introduces-nemotron-for-science-to-accelerate-discoveries-with-agents/
A06	Daviator|VASPのGPUボトルネックを解消するバッチ処理と混合精度の性能	https://developer.nvidia.com/blog/tackling-gpu-bottlenecks-in-plane-wave-dft-with-k-point-batching-and-mixed-precision/
A07	NVIDIA cuPotential|分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能	https://developer.nvidia.com/blog/accelerate-molecular-dynamics-simulations-with-accurate-flexible-primitives-using-nvidia-cupotential/
A08	天然プラスチック代替材の探索|ロボティクスと機械学習による開発期間の短縮	https://doi.org/10.1038/s41596-026-01449-4
A09	MatOSとは|材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細	http://eu.36kr.com/en/p/4073503237329796
A10	高周波磁気損失|東京理科大学がAIで特定したエネルギー損失の微視的構造と要因	https://www.miragenews.com/how-ai-identifies-magnetic-structures-behind-1778948/
A11	MACE-MP-0|リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法	https://bioengineer.org/machine-learning-model-simulates-solid-electrolyte-interphase-reactions-in-lithium-batteries/
A12	NVIDIA DAQIRI|GPUネイティブなデータ収集による科学計測のリアルタイムAI化	https://developer.nvidia.com/blog/enabling-real-time-ai-for-scientific-instruments-with-gpu-native-data-acquisition/

マテリアルインフォマティクス 採用記事 全文集

出力日: 2026-11-22

採用記事数: 12 件

収録記事一覧

#01 リチウム空気電池｜AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能

#02 ワイヤレス光チップ｜反応温度をリアルタイム監視する0.5mmデバイスの性能と用途

#03 AlphaDiffract｜粉末X線回折データから結晶構造を自動解析する深層学習フレームワーク

#04 MatSKRAFT｜材料科学の表データから知識を大規模抽出するフレームワークの性能

#05 NVIDIA Nemotron for Science｜科学特化型エージェント構築の性能と活用事例

#06 Daviator｜VASPのGPUボトルネックを解消するバッチ処理と混合精度の性能

#07 NVIDIA cuPotential｜分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能

#08 天然プラスチック代替材の探索｜ロボティクスと機械学習による開発期間の短縮

#09 MatOSとは｜材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細

#10 高周波磁気損失｜東京理科大学がAIで特定したエネルギー損失の微視的構造と要因

#11 MACE-MP-0｜リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法

#12 NVIDIA DAQIRI｜GPUネイティブなデータ収集による科学計測のリアルタイムAI化

#01 リチウム空気電池｜AI設計のNi-Co二原子触媒による4電子経路の実現と性能

公開日 2026年11月18日　Nature Communications



概要

AIと密度汎関数理論（DFT）を統合したフレームワークにより、リチウム空気電池の性能を飛躍的に向上させるNi-Co二原子触媒（DACs）が開発されました。この触媒は反応経路を従来の2電子経路から4電子経路（LiOH生成）へ制御し、約60,000 mAh g^{-1}の放電容量と2075サイクルの安定した寿命を実現しています。また、正極触媒としてだけでなく、負極のデンドライト成長を抑制する保護層としても機能します。これにより、エネルギー密度の極めて高い次世代電池の実用化に向けた新たな設計指針が提示されました。

詳細

主要成果

AI（人工知能）と密度汎関数理論（DFT）を組み合わせたデータ駆動型アプローチにより、リチウム空気電池の酸素還元反応を最適化するNi-Co二原子触媒（NiCo-DACs）が特定されました。この触媒を用いることで、反応経路を従来の2電子経路から4電子経路へと精密に制御することに成功し、約60,000 mAh g^{-1}という高い放電容量を達成しました。さらに、電圧降下を抑制しながら2075サイクルという長期的なサイクル安定性を実現しています。

技術・詳細

本研究では、数千もの活性サイトからなる膨大な化学空間を探索するため、解釈可能な機械学習（ML）を導入しました。電気陰性度や価電子構成などの物理化学的記述子と電気化学的性能の間の非線形な相関を解析した結果、Ni-Coの二原子構成が最適であると導き出されました。理論解析によれば、NiとCoの二つのサイト間で相乗的な電子結合が生じることでdバンドセンターが再構成され、酸素還元反応の熱力学的障壁が低下します。

この触媒の最大の特徴は、反応生成物を絶縁性で不溶性の過酸化リチウム（Li_2O_2）ではなく、化学的安定性が高く理論容量に優れた水酸化リチウム（LiOH）へと転換させる点にあります。また、この構造は多機能な界面保護層としても機能し、リチウム金属負極におけるデンドライト（樹枝状結晶）の成長を抑制することで、電池全体の安定性を向上させています。

背景・業界の文脈

リチウム空気電池は、理論エネルギー密度が約3500 Wh kg^{-1}（LiとO_2の合計質量ベース）と極めて高く、ガソリンに匹敵するエネルギー貯蔵システムの実現に向けて期待されています。しかし、従来の2電子転移経路（$2Li + O_2 + 2e^- \leftrightarrow Li_2O_2$）では、生成される$Li_2O_2$が正極界面を不活性化させ、反応速度の低下や大きな過電圧、サイクル寿命の短縮を招くことが大きな課題となっていました。

この課題を解決するために4電子経路（LiOH生成）への転換が検討されてきましたが、従来の単一金属活性サイトでは「線形スケーリング関係」という制約があり、プロトン化中間体の吸着エネルギーを最適に制御することが困難でした。

今後の展望

本研究は、試行錯誤的な実験手法ではなく、AIを用いたデータ駆動型の戦略によって原子レベルの構造設計が可能であることを証明しました。二原子触媒による電子的な相乗効果を利用して吸着エネルギーの制約を打破し、多電子電極化学を制御する手法は、リチウム空気電池のみならず、他の高エネルギー密度電池の開発においても極めて有効なアプローチになると考えられます。

元記事: https://doi.org/10.1038/s41467-026-79335-6

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#02 ワイヤレス光チップ｜反応温度をリアルタイム監視する0.5mmデバイスの性能と用途

公開日 2026年11月20日　Chemistry World　アメリカ



概要

米国の研究チームが、反応容器内の温度をリアルタイムで監視できるサブミリメートルサイズのワイヤレス光チップを開発した。この0.5mmのデバイスは、外部LEDからの光をエネルギーに変え、温度に依存したパルスレートを送信することで、0.1°Cの精度で0.5秒ごとに温度を測定できる。これにより、自律走行ラボ（self-driving labs）におけるAI駆動の材料発見の加速や、工業プロセスにおける化学反応の安全監視への活用が期待される。

詳細

主要成果

スタンフォード大学のSong Lin氏、コーネル大学のPaul McEuen氏らとスタートアップ企業のOWiC Technologiesは、試験管の内部に配置または壁面に貼付可能な、サイズ0.5mmの光電子集積回路（ワイヤレスチップ）を開発した。このデバイスは、反応容器内の温度を0.5秒ごとに、誤差0.1°Cという高精度で測定できる。最大24本の試験管から同時にデータを取得することが可能であり、1時間あたり10万点以上のデータポイントを蓄積できる。制御された反応条件下では、これらのデータを熱出力および反応速度へと変換できる。

技術・詳細

本チップは、外部LEDから照射された光を半導体光起電素子で吸収し、電気エネルギーに変換して駆動する。このエネルギーでレーザーをポンプし、温度に依存した繰り返し率を持つナノ秒光パルスを放出させる。外部の光検出器でこのパルスレートを検出することで、ワイヤレスでの温度測定を実現している。研究チームは、熱管理が重要となる強発熱性のコバルト触媒による末端エポキシドの加水分解的速度論的光学分割のほか、Buchwald-Hartwigアミノ化やSuzuki-Miyauraカップリングといった比較的低発熱の反応を用いて動作を検証した。

背景・業界の文脈

化学反応の効率的なモニタリングは困難な課題となっている。NMR分光法などの既存手法はサンプルの抽出と外部分析（ex situ）が必要であり、in situ分光法は特殊な装置を要し、得られる濃度測定値が累積的であるため解釈が難しい。反応速度を直接的に測定できる熱量測定（カロリメトリー）が最も有効だが、高性能な熱量計は10万ドルを超える高コストが課題であった。また、AIを用いた材料発見の分野では、データサイエンスツールは高度化しているが、モデルに入力される実験情報の精度や量に不足があるという現状がある。

今後の展望

本技術は、ロボットが並列的に実験を行う「自律走行ラボ」において、各実験にチップを投入することでリアルタイムに情報を得て、次の実験条件を決定するプロセスを容易にする。また、工業プロセス化学における安全監視への応用が期待されている。特に医薬品製造などの分野では、反応の暴走によるプラント爆発のリスクを回避するための熱量測定が不可欠であり、本チップによる監視が重要な役割を果たすと考えられている。

元記事: https://www.chemistryworld.com/news/sand-grain-sized-wireless-chip-can-monitor-reactions-to-provide-data-for-self-driving-labs/4024549.article

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#03 AlphaDiffract｜粉末X線回折データから結晶構造を自動解析する深層学習フレームワーク

公開日 2026年11月15日　npj Computational Materials　アメリカ



概要

粉末X線回折（PXRD）データから結晶系、空間群、格子定数を同時に予測する深層学習フレームワーク「AlphaDiffract」が開発されました。3,100万件以上のシミュレーションデータで学習し、RRUFFデータセットを用いた実測値の検証では、結晶系で81.7%、空間群で66.2%の精度を達成しています。専門家の介入が必要だった従来の反復的な解析手法を、シングルショットの自動予測に置き換えることで、ハイスループットな材料探索を加速させます。

詳細

主要成果

研究チームは、粉末X線回折（PXRD）パターンから結晶系、空間群、および6つの格子定数を直接かつ同時に予測できる深層学習フレームワーク「AlphaDiffract」を開発しました。本モデルは、シミュレーションデータで学習した内容を実際の実験データへ強力に転移させることができ、RRUFFデータセットを用いた評価において、結晶系の予測精度81.7%、空間群の予測精度66.2%を記録しています。

技術・詳細

AlphaDiffractは、トランスフォーマーの主要な設計原理を統合した最新の畳み込みニューラルネットワークである「ConvNeXt」アーキテクチャを1次元的に適応させたモデルを採用しています。各結晶学的特性を予測するための専用の予測ヘッドを備えているのが特徴です。

モデルの学習には、物理ベースの最大規模のデータセットが使用されました。具体的には、ICSDおよびMaterials Projectデータベースから精選された312,267個の構造を拡張し、3,100万件以上のシミュレーション回折パターンを生成して学習および検証に利用しています。

背景・業界の文脈

材料科学において、PXRDデータから材料を特定し構造を理解することは、新材料の発見と特性評価の基礎となる長年の課題です。完全な構造解析を行うには、前提条件として格子定数や結晶学的対称性を含む結晶格子の正確な決定が必要となります。

しかし、従来の決定手法は反復的なプロセスであり、通常は専門家による入力が必要でした。既存の深層学習アプローチも有望視されていましたが、実験データから包括的な格子決定をシングルショット（一度の処理）で実行できる堅牢な手法の確立が重要な目標となっていました。

今後の展望

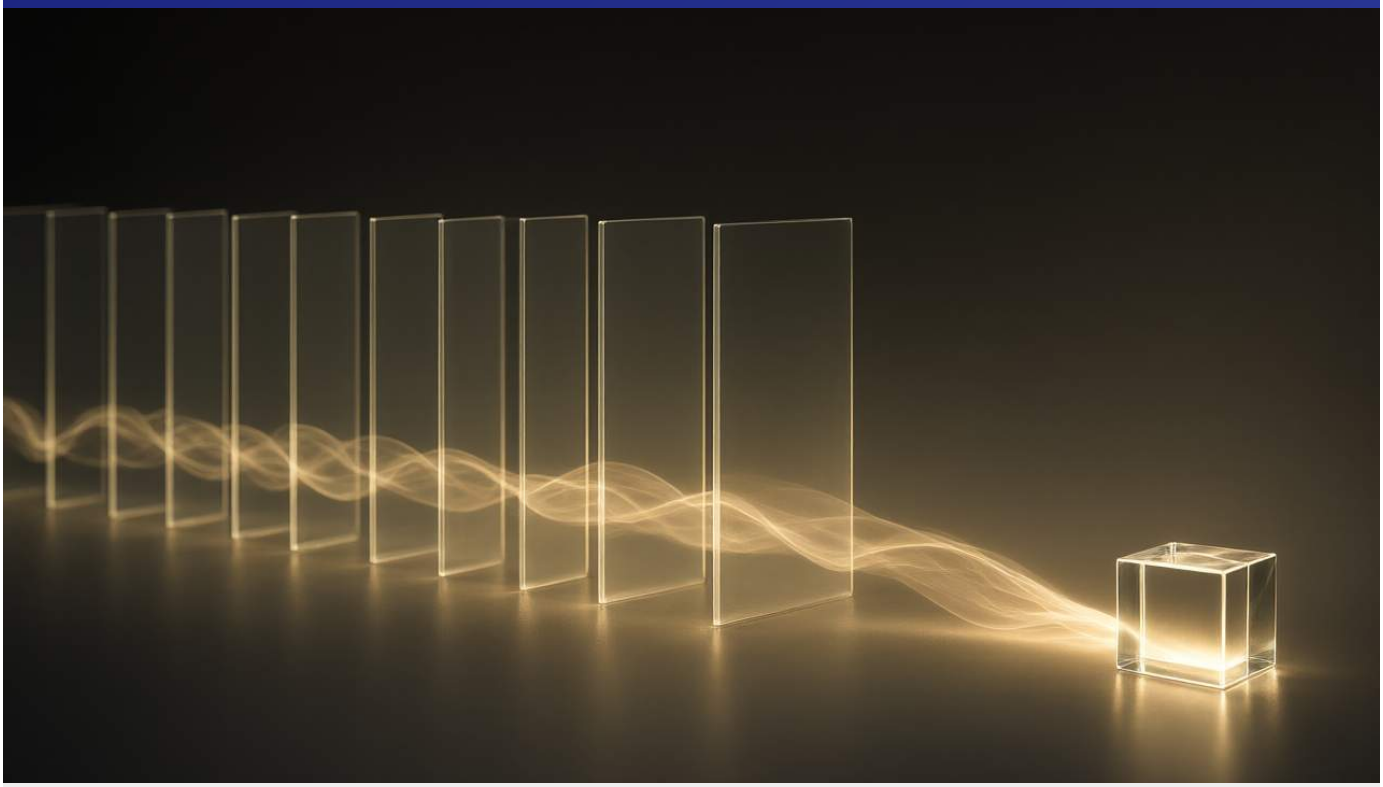
AlphaDiffractは、PXRDデータから格子の対称性とパラメータを迅速かつ同時に予測できる統合モデルを提供します。これにより、深層学習を活用したハイスループットな材料探索における大きな前進となり、材料同定および構造解析の自動化が期待されます。

元記事: https://doi.org/10.1038/s41524-026-02388-0

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#04 MatSKRAFT｜材料科学の表データから知識を大規模抽出するフレームワークの性能

公開日 2026年11月16日　npj Computational Materials　インド



概要

インド工科大学デリー校などの研究チームが、科学論文の表データから材料科学の知識を自動的に抽出・統合するフレームワーク「MatSKRAFT」を開発しました。本手法は、物性抽出でF1スコア89.33%、組成抽出で71.35%を達成し、既存の最先端大規模言語モデル（LLM）を大幅に上回る精度と、6〜496倍の処理速度を実現しています。これにより、膨大な論文に埋もれていた実験データの体系的なデータベース化が可能となり、新たな材料発見を加速させます。

詳細

主要成果

MatSKRAFTは、科学論文に含まれる半構造化データ（表）から、材料の組成や物性などの知識を前例のない規模で自動抽出する計算フレームワークです。性能評価において、物性抽出で89.33%、組成抽出で71.35%という高いF1スコアを記録しました。特筆すべきは処理効率であり、比較対象となった最速のモデルと比べても6倍、最遅のモデルと比べれば496倍の高速処理を実現しており、かつハードウェア要件も控えめであるとしています。

技術・詳細

本フレームワークの核心は、表データをグラフベースの表現に変換し、制約駆動型グラフニューラルネットワーク（GNN）で処理するアプローチにあります。このアーキテクチャにより、科学的な原則をモデルに直接組み込むことが可能となりました。この手法を実際の研究論文に適用した結果、45,500以上の出版物から66,267個の表を解析し、合計509,281エントリーを含む包括的なデータベースを構築しました。このデータベースには、104,000件の組成データと広範な材料物性が含まれており、既存の主要なデータベースを上回るカバー範囲を実現しています。

背景・業界の文脈

材料科学における進歩は、膨大な文献にわたる知識の統合に依存していますが、多くの実験データは「表」という半構造化形式で保存されており、体系的な抽出や分析が困難な「データ閉じ込め」の状態にありました。これまでも大規模言語モデル（LLM）などの活用が検討されてきましたが、処理速度や精度の面で課題がありました。MatSKRAFTは、科学的原則を組み込んだ専用のGNNを用いることで、汎用的なLLMを凌駕する効率性と精度を両立させています。

今後の展望

この体系的な抽出アプローチにより、これまで見落とされていた特異な物性組み合わせを持つ材料の発見が可能になります。また、抽出された大規模なデータセットは、組成と物性の関係性をデータ駆動型で解明するための基盤となります。研究チームは、こうしたアプローチが材料科学および科学的発見全体の礎になると述べています。

元記事: https://doi.org/10.1038/s41524-026-02359-5

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#05 NVIDIA Nemotron for Science｜科学特化型エージェント構築の性能と活用事例

公開日 2026年11月18日　NVIDIA 日本版ブログ　アメリカ



概要

NVIDIAは、科学的発見を加速させるためのフレームワーク「Nemotron for Science」を発表した。オープンモデルのNemotron 3.5 Super VLを基盤に、化学データセット「LitmusBench v0.2」やポストトレーニングのレシピを組み合わせ、専門的な科学エージェントの構築を支援する。これにより、研究者は化学実験やタンパク質設計などの高度なリーズニングを必要とするタスクを、自社インフラ上で安全に実行可能になる。

詳細

主要成果

NVIDIAが発表した「Nemotron for Science」は、研究者が分野特化型の科学エージェントを構築するための包括的なツールセットである。基盤となる「Nemotron 3.5 Super VL」オープンモデルに、科学分野の評価手法、新たな化学データセット、およびポストトレーニングのレシピを統合している。これにより、科学的な問題に対するリーズニング（論理的推論）を行い、専門的な研究ツールを自在に活用するエージェントの開発が可能となった。

技術・詳細

本フレームワークの核となる構成要素と技術的特徴は以下の通りである。

- **LitmusBench v0.2：** 化学リーズニングのトレーニングと評価に用いる約5万件の質問を収録したオープンデータセット。分子の特性や実験的な創薬データに基づき、溶解度や人体内での挙動などの予測能力を向上させる。
- **ポストトレーニング：** 分野特化型のデータを用いてモデルを最適化することで、専門タスクの性能を向上させる。これにより、科学情報の解釈、コード生成、CUDA-Xによって高速化された計算ツールの呼び出しを行うワークフローが実現する。
- **展開インフラ：** NVIDIA DGX Sparkおよびデータセンターインフラにより、研究者のデスクトップからスーパーコンピューティングセンターまで、組織管理下の安全な環境で展開できる。

背景・業界の文脈

すでに複数のライフサイエンス企業や研究機関がこのモデルを導入し、具体的な成果を上げている。Terray Therapeuticsは、科学的な図から反応物や条件を抽出するポストトレーニングを行い、RxnScribeテストにおいてアノテーション付き反応の約76%を抽出することに成功した。Lila Sciencesは、量子ドット合成の精度をほぼ2倍の61%まで向上させ、推論コストを10分の1から20分の1に抑えつつ、GPT-6 Astraの54%を上回る性能を達成した。また、ThernaはmRNA治療薬の設計に適用し、タンパク質発現量の予測精度をフロンティアモデルのほぼ2倍に高めている。

今後の展望

本技術は、個々の研究室から国家レベルの計算基盤まで幅広く適用される。アルゴンヌ国立研究所はがん治療薬候補の設計に、スウェーデン王立工科大学（KTH）はGROMACS分子動力学シミュレーションの自律的な修復エージェント（修復率81%を達成）に活用している。また、理化学研究所はAIスーパーコンピューティングプラットフォーム「RIKYU」上で本シリーズを利用可能にした。これらの取り組みにより、新規分子の設計や材料科学、国家安全保障、がん治療などの複雑な課題解決が加速することが期待される。

元記事: https://blogs.nvidia.co.jp/blog/nvidia-introduces-nemotron-for-science-to-accelerate-discoveries-with-agents/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#06 Daviator｜VASPのGPUボトルネックを解消するバッチ処理と混合精度の性能

公開日 2026年11月18日　NVIDIA Technical Blog　アメリカ



概要

NVIDIAが、平面波DFT計算ソフトVASPのGPUパフォーマンスを劇的に向上させる新ライブラリ「Daviator」を開発しました。k点バッチ処理と混合精度演算の導入により、CPU実行比で最大22倍の高速化と最大75%のコスト削減を実現しています。これにより、MLIP（機械学習原子間ポテンシャル）の学習に不可欠な膨大なDFTデータの生成コストと時間を大幅に削減することが可能になります。

詳細

主要成果

NVIDIAが開発した新しいGPUカーネルライブラリ「Daviator」をVASPに導入することで、平面波密度汎関数理論（DFT）計算におけるGPUのボトルネックが解消されました。ベンチマークの結果、想定されるOMat24データセットのワークロードにおいて、CPU実行と比較して計算時間を最大22倍短縮し、コストを最大75%削減できることが示されています。また、混合精度実行レイヤーを活用することで、RTX PRO 6000のようなFP32性能が高いGPUでは、エンドツーエンドで約2倍の加速を実現しています。

技術・詳細

Daviatorは、従来のVASPにおける逐次的なk点処理を、バッチ化されたGPU操作に置き換えることで性能を向上させます。特に、バッチ化されたDavidson固有値ソルバーを導入し、バッチFFTやGEMM、カスタムカーネルを用いることで、GPUカーネルの起動回数を劇的に削減しました。これにより、GPUのSM（ストリーミングマルチプロセッサ）の占有率を大幅に高め、計算リソースを最大限に活用することが可能です。

さらに、数値的に敏感なステップにはFP64（倍精度）を維持しつつ、選択的なコンポーネントにFP32（単精度）を採用する混合精度ワークフローを導入しています。この構成では、カーネルごとに必要な最小精度を特定し、収束に不可欠な操作のみを「FP64アイランド」として保持することで、精度を担保しながらスループットを向上させています。

背景・業界の文脈

次世代の機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）のトレーニングには、数千万から数億件に及ぶDFT計算による正解データ（エネルギー、力、応力）が必要です。VASPは業界標準のツールですが、MLIP用データ生成に多い「小さな単位格子」かつ「密なk点グリッド」という条件下では、GPUへのディスパッチ回数が増え、カーネル起動のオーバーヘッドが計算時間を支配するという課題がありました。実際、単一原子の鉄システム（752 k点）では、高価なGPUよりもCPUの方が8倍高速に動作するという逆転現象が起きていました。また、近年のGPUハードウェアはAI需要の影響でFP32性能が飛躍的に向上している一方、FP64性能は停滞しており、FP64のみに依存する従来のHPCコードではハードウェアの潜在能力を引き出せない状況にありました。

今後の展望

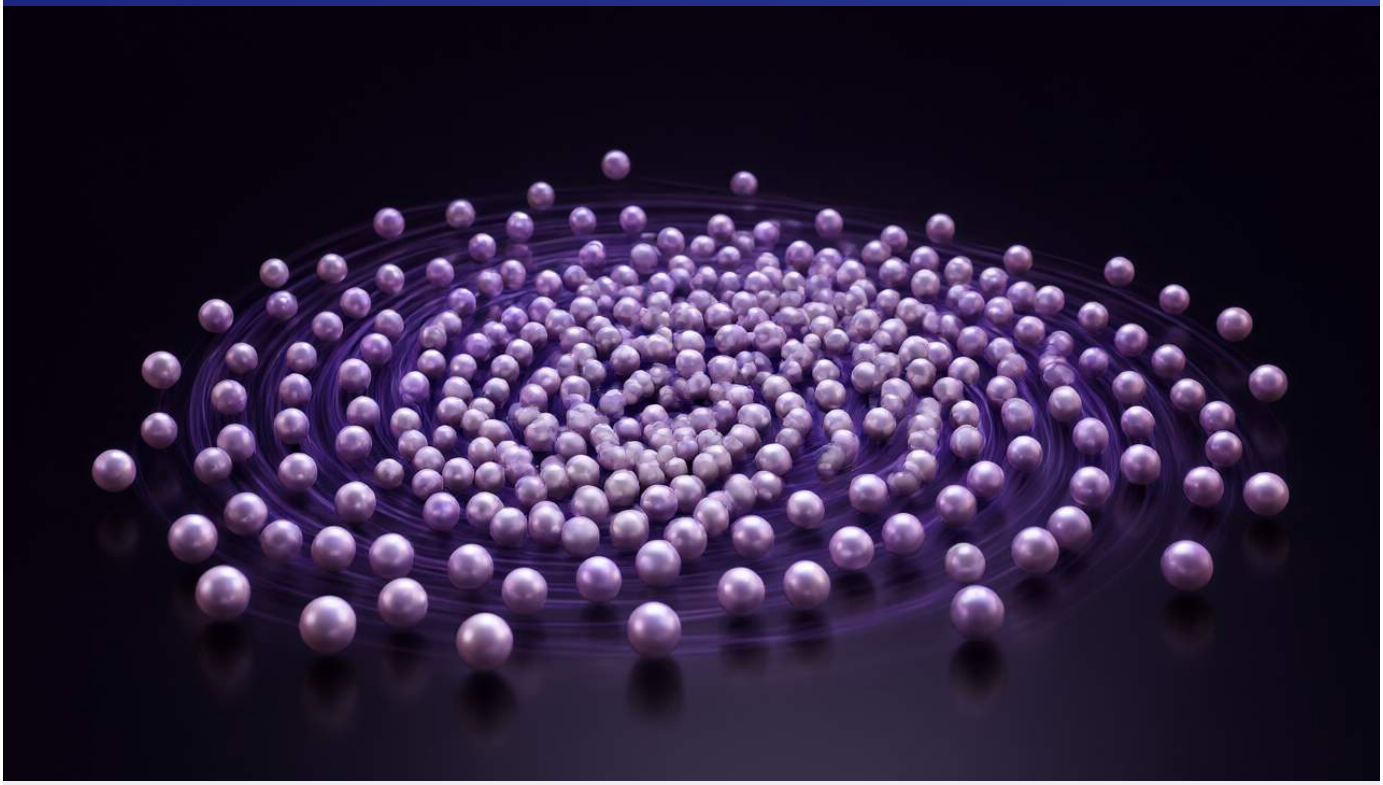
Daviatorおよび混合精度オプションは、NVIDIA ALCHEMI VASPマイクロサービスを通じて提供されます。ユーザーはINCARファイル内で「LDAVIATOR=True」および「LDAVIATOR_MIXED_PRECISION=1」を設定するだけで利用でき、既存のVASP入力ファイルを変更することなく導入可能です。これにより、研究者は計算規模に応じたハードウェア選択に悩まされることなく、効率的に大規模な材料データセットを構築できる環境が整います。

元記事: https://developer.nvidia.com/blog/tackling-gpu-bottlenecks-in-plane-wave-dft-with-k-point-batching-and-mixed-precision/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#07 NVIDIA cuPotential｜分子動力学シミュレーションの高速化と精度向上の性能

公開日 2026年11月16日　NVIDIA Technical Blog　アメリカ



概要

NVIDIAが、分子動力学（MD）シミュレーションを加速させるためのライブラリ「cuPotential」を公開しました。T4からRTX PRO 6000 BlackwellまでのGPU環境において、24,000〜400,000原子のシステムで2倍から3倍以上のエンドツーエンドの高速化を実現しています。これにより、計算コストを抑えつつ、従来の標準的な手法を上回る精度とエネルギードリフトの抑制が可能になります。

詳細

主要成果

NVIDIAが提供するcuPotentialは、周期境界条件下での長距離相互作用の評価を最適化し、分子動力学（MD）シミュレーションを大幅に高速化します。ベンチマークの結果、T4からRTX PRO 6000 Blackwellに至るGPUアーキテクチャにおいて、24,000原子から400,000原子のシステム（NPT条件下）で、2倍から3倍以上のエンドツーエンドのスピードアップを達成しました。また、エネルギードリフトの測定では、デフォルトのPME（Particle Mesh Ewald）設定と比較してドリフトを数百倍低減させており、一般的なバイオ分子シミュレーションの要件を上回る精度を示しています。

技術・詳細

cuPotentialは、C APIを備えたモジュール式のプリミティブを提供しており、開発者はスタックの複数のレイヤーから特定のコンポーネントを選択してワークロードを加速させることができます。具体的には、カットオフベースの相互作用評価器や電荷分散関数などの直接空間および逆空間のユーティリティが含まれています。また、普及しているMDエンジンであるOpenMM向けのプラグインも提供されており、非結合力、ランジュバン積分器、モンテカルロ・バロスタットを最小限のコード変更で置換することが可能です。

技術的な核心は、D. E. Shaw ResearchおよびFlatiron Instituteと共同開発した新しいC2連続の分割および分散関数にあります。これにより、標準的なEwald法やu-series手法と比較して、より低いグリッド解像度と削減されたカットオフ距離で目標精度を達成できます。さらに、静電相互作用以外に分散エネルギーの精度も数千倍向上させており、計算コストを抑えながら同等の力誤差を維持することに成功しています。

背景・業界の文脈

分子動力学（MD）は物理学、化学、生物学、材料科学において不可欠なツールであり、その演算構造（特に多くの原子ペア間相互作用の並列評価）から、早期にGPUへの移植が進んだ分野です。しかし、GPUの進化に伴い、カーネルの最適化やヘテロジニアスなハードウェア間での互換性確保は、MDエンジン開発者にとって極めて困難な課題となっていました。特に、古典的な力場を用いたシミュレーションにおける静電相互作用や分散などの長距離相互作用の評価は、計算およびエンジニアリング上の大きなボトルネックとなっていました。

今後の展望

cuPotentialは、GitHubリポジトリを通じてサンプル、ベンチマーク、統合コードを公開しています。厳格な精度管理とエネルギードリフトの抑制を実現したことで、開発者はシミュレーション結果に影響を与えることなく、cuPotentialカーネルによる加速の恩恵を受けることができます。これにより、より大規模な系や長時間のシミュレーションが現実的な時間で実行可能になると期待されます。

元記事: https://developer.nvidia.com/blog/accelerate-molecular-dynamics-simulations-with-accurate-flexible-primitives-using-nvidia-cupotential/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#08 天然プラスチック代替材の探索｜ロボティクスと機械学習による開発期間の短縮

公開日 2026年11月16日　Nature Protocols



概要

ロボティクスと機械学習を統合したワークフローにより、天然資源由来のプラスチック代替材料の探索を加速させる手法が開発されました。自動ピペッティングロボットと機械学習モデルを組み合わせることで、約2ヶ月という短期間で目的の物性を持つナノ複合材料の特定を可能にしています。これにより、従来の非効率な反復最適化を脱し、環境負荷の低い機能性材料の迅速な発見が期待されます。

詳細

主要成果

ロボティクスによる液体ハンドリングと機械学習を統合し、天然資源由来のプラスチック代替材料を迅速に探索するワークフローが構築されました。このハイブリッドアプローチを用いることで、約2ヶ月という期間で、一般に安全と認められる（GRAS）データベースの成分を用いた、プログラム可能な機能を持つエコフレンドリーな材料の発見が可能になります。

技術・詳細

本ワークフローは、以下の段階的なプロセスで構成されています。

- **初期スクリーニング：**ピペッティングロボットを用いて286種類のナノ複合材料ライブラリを調製します。得られた基本的な物理特性を用いてサポートベクターマシン（SVM）分類器を学習させ、4成分系における「実現可能な組成」と「不可能な組成」を分ける決定境界を特定し、設計空間を定義します。
- **最適化と予測モデルの構築：**データ拡張（実験誤差範囲内での微小なランダム変化の追加）を伴う14回の能動学習（Active Learning）ループを通じ、ロボットが135種類の天然ナノ複合材料を段階的に作製します。これにより、人工ニューラルネットワーク（ANN）予測モデルを構築します。
- **予測と設計：**構築されたモデルを用いて、組成から物理化学的特性を予測すること、および透明性や耐火性などユーザーが指定した目標物性を備える可能性が高い組成を特定することが可能です。
- **検証と拡張：**モデルの解釈にはShapley Additive Explanations（SHAP）を用い、分子動力学シミュレーションによる検証を行います。また、新しい構成要素を組み込んでモデルを拡張する手法も詳細に定義されています。

背景・業界の文脈

世界的な非分解性石油化学プラスチック廃棄物の蓄積に伴い、天然資源由来の生分解性代替材の需要が高まっています。しかし、市販プラスチックと同等の光学特性、熱特性、機械的性能を持つ天然複合材料を発見することは極めて困難でした。これは、従来の材料開発における反復的な最適化プロセスが非常に非効率であるためです。

今後の展望

本ワークフローは、ユーザーが指定した物性ターゲットを満たす製品の「逆設計（インバースデザイン）」を自動化するものです。この手法は、天然プラスチック代替材のみならず、他の機能性材料システムにも適用可能であり、材料開発のスピードを劇的に向上させる汎用的なフレームワークとなる可能性があります。

元記事: https://doi.org/10.1038/s41596-026-01449-4

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#09 MatOSとは｜材料開発を自動化するAIエージェント、性能とオープンソース化の詳細

公開日 2026年11月17日　36Kr（量子位）　中国



概要

北京の中関村科学院および中関村人工知能研究院が、材料研究開発（R&D）に特化したAIエージェントシステム「MatOS」をオープンソース化した。MatOSは3,000以上のデータセットや48の計算ソフトを統合し、3,000万件以上の候補構造から97件の固体電解質を抽出するなど、高度な自律研究能力を示す。これにより、従来は困難だった研究プロセスの再利用や、複雑なワークフローの自動構築が可能になる。

詳細

主要成果

MatOSは、材料研究における自律的な研究能力を大幅に向上させ、幅広いタスクで高い成功率を達成した。ベンチマーク「ResearchClawBench」では、同一のベースモデルを使用するCodex CLIと比較して、平均で33.6%高く、特に材料関連タスクでは80.8%高いスコアを記録した。また、材料ソフトウェアの使用能力を測る「MatTools」では、Codex CLIやClaude Codeを上回る97.96%という最高水準の正解率を達成している。

実用面では、3,000万件を超える候補構造から97件の固体電解質候補を絞り込む階層的スクリーニングを実現したほか、合金の融点予測モデル「DuoCompNet」の開発を支援し、固定テストセットにおける平均絶対誤差を3.18°Cまで低減させた。これは、次点となったモデルよりも13.6%低い数値である。

技術・詳細

MatOSは、データ、知識、ツール、スキル、役割、ワークフローを「科学的資産（Scientific Assets）」として体系的に整理し、これらを組み合わせて新機能を構築する設計を採用している。具体的には、3,135のデータセット、386のスキル、104のワークフロー、51のエキスパートロールを保有し、48の材料計算ソフトウェアを統合している。

システムの核となるのは以下の3つの設計である。第一に「階層的科学資産グラフ」により、既存の資産を組み合わせて新しい能力を構築できる。第二に「状態保持型適応ワークフロー」により、長期にわたるタスクでも状態を保存し、結果を確認しながら実行できる。第三に「エビデンス駆動型資産進化」により、実践で得られた経験を検証・レビューを経て資産として更新し、後続の研究で再利用することを可能にしている。

背景・業界の文脈

材料研究におけるAIエージェントの導入には、3つの大きな課題があった。一つは、新しいデータベースやシミュレーションソフト、機械学習ポテンシャル（原子間力を近似して計算を加速させる手法）が登場するたびにシステムを再構築しなければならない点。二つ目は、文献解析から計算、実験に至る長期間のタスクにおいて、状態の保存と結果の検証が必要な点。そして三つ目は、サンプリング戦略などの実践的な経験を蓄積し、効率的に再利用する仕組みが欠けていた点である。

今後の展望

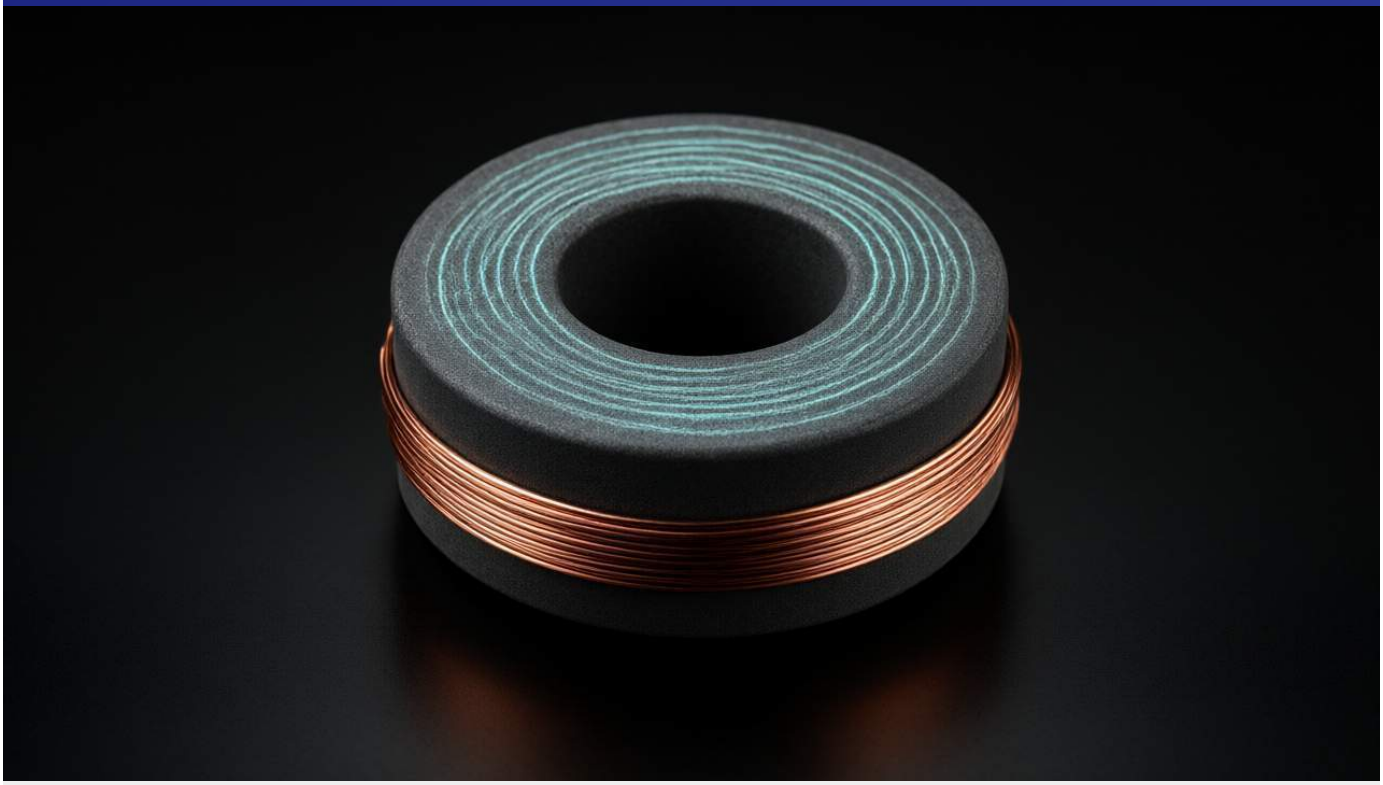
MatOSは、単なる質問回答ツールから、自律的に研究を遂行し、高品質な科学的資産を継続的に提供するシステムへの進化を目指している。技術レポートはarXivで公開され、コードはGitHubでオープンソース化されており、研究者が自らデータベースや手法を資産として登録し、能力を拡張させることが期待される。

元記事: http://eu.36kr.com/en/p/4073503237329796

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#10 高周波磁気損失｜東京理科大学がAIで特定したエネルギー損失の微視的構造と要因

公開日 2026年11月17日　Mirage News（Tokyo University of Science）　日本



概要

東京理科大学の研究チームが、高周波動作時の磁性材料におけるエネルギー損失の微視的な要因を特定する、物理的に解釈可能なAIアプローチを開発しました。スーパーコンピュータ「富岳」を用いた大規模シミュレーションとトポロジー解析を組み合わせ、エネルギー障壁に最も寄与する構造が、反転ドメインの先端や特定の微細な壁セグメントに集中していることを明らかにしました。この成果により、電気自動車やデータセンター向け電源変換装置に使用される低損失磁性材料の設計に新たな指針がもたらされます。

詳細

主要成果

東京理科大学の小杉正人教授らによる研究チームは、高周波領域における軟磁性材料のエネルギー損失の起源を微視的に特定する手法を開発しました。本研究では、磁化反転時にエネルギー障壁へ強く寄与する構造が、ネットワーク全体に均一に分布しているのではなく、伝播する反転ドメインの先端（チップ）や、選択的な微細壁セグメントに集中していることを突き止めました。この発見は、同様の磁壁であっても反転過程において異なる役割を果たすことを示唆しています。

技術・詳細

研究チームは、物理的な原理に基づいて結果を説明できる「物理的に解釈可能なAI」を構築し、以下のプロセスで解析を行いました。

- **シミュレーション：**スーパーコンピュータ「富岳」を用い、理想的な鉄ベースのナノ結晶軟磁性体を対象に、100 kHz、1 MHz、10 MHzの各周波数で大規模なマイクロマグネティック・シミュレーションを実施しました。
- **構造の定量化：**画像内の形状や接続性を定量化する数学的手法「パーシステントホモロジー（persistent homology）」を適用し、進化する磁気ドメイン壁ネットワークを特徴付けました。
- **次元圧縮とマッピング：**主成分分析（PCA）を用いて画像ベースの記述子を2次元表現に圧縮し、これを画像由来の交換エネルギー尺度と結びつけてエネルギーランドスケープを構築しました。さらに、逆写像（inverse mapping）を用いることで、エネルギー障壁に最も寄与する構造を特定しました。

解析の結果、励起周波数が高くなるにつれて磁気ドメインの細分化が進むこと、および磁化が反転する保磁力領域付近で周波数とともに増大するエネルギー障壁が存在することが確認されました。なお、ここで特定された障壁は交換相互作用に由来する構造的なエネルギーコストであり、散逸した熱を直接測定したものではないとしています。

背景・業界の文脈

電気自動車（EV）、再生可能エネルギーシステム、データセンターなどの現代技術は、効率的な電力変換に依存しており、そこではトランスやインダクタなどの磁性コンポーネントが不可欠です。しかし、磁性材料は動作中にエネルギー損失を起こして発熱し、システム全体の効率を制限します。特に電気システムが高周波化する中で、磁化反転を担う磁気ドメイン壁の挙動など、損失の微視的な起源を理解することが、エネルギー効率向上のための極めて重要な課題となっていました。従来のモデルでは全体の損失推定は可能でしたが、どの微視的構造が抵抗に最も寄与しているかを特定することは困難でした。

今後の展望

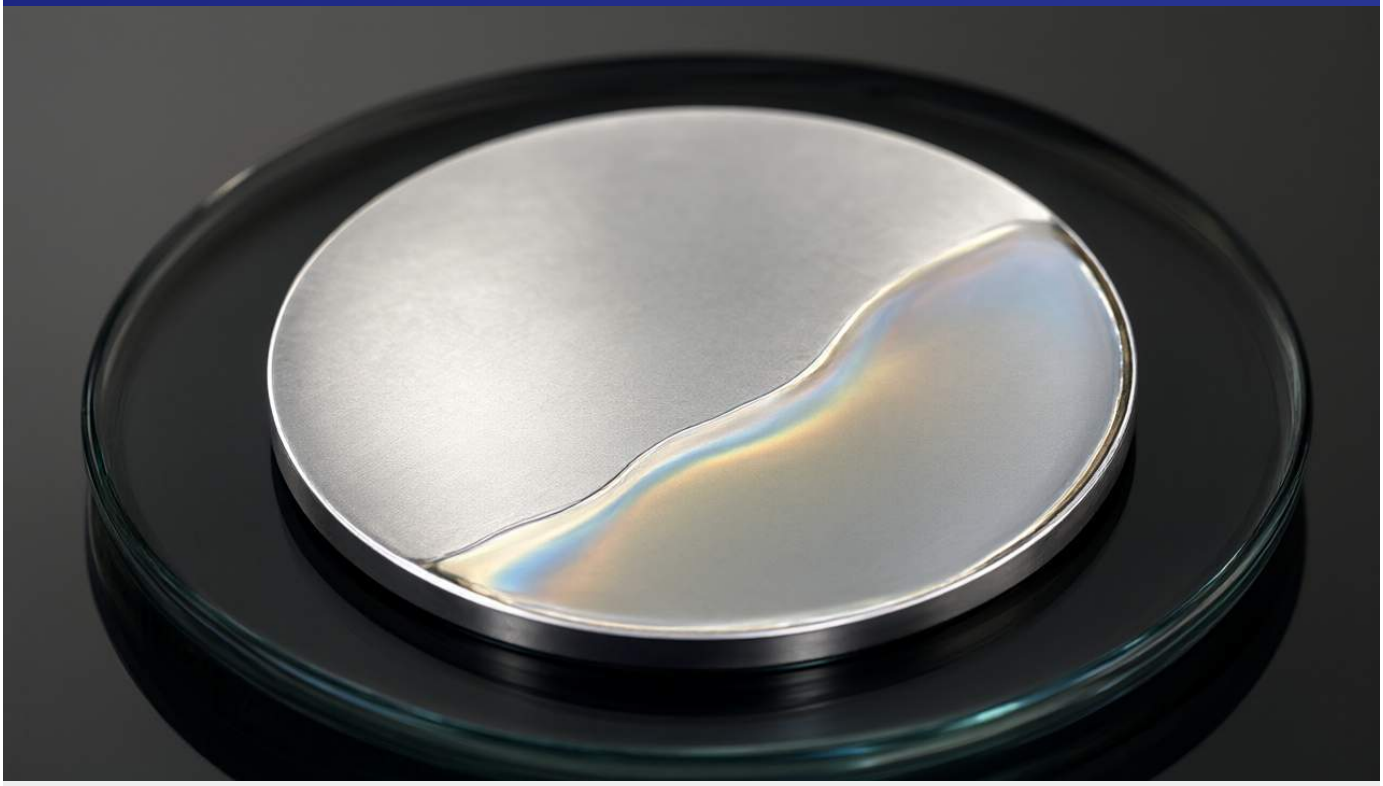
本研究で確立された、スーパーコンピューティング、トポロジー、磁気物理学、および説明可能なAIを統合したフレームワークは、磁性材料のエネルギー損失に関する微視的な調査に新たな道を切り拓きます。今後は、材料の組成や加工プロセスがドメイン壁の挙動にどのような影響を与えるかを詳細に調査することが可能になります。これにより、データセンターの電源変換設備やEV向けの低損失磁性材料の開発が加速し、電力変換効率の向上と発熱抑制を通じた省エネルギー化およびCO2排出量の削減に寄与することが期待されます。

元記事: https://www.miragenews.com/how-ai-identifies-magnetic-structures-behind-1778948/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#11 MACE-MP-0｜リチウム電池のSEI反応をシミュレートする機械学習モデルの精度と手法

公開日 2026年11月16日　BIOENGINEER.ORG



概要

機械学習の基盤モデルを微調整することで、リチウム金属負極と電解液の界面で発生する固体電解質界面（SEI）の形成および劣化反応を高精度にシミュレートする手法が開発されました。微調整後のモデル（MACE-MP-0-R4）は、電解質構造において力（force）の平均二乗誤差を52 millielectronvolts per angstromまで低減し、密度汎関数理論（DFT）と同等の精度を実現しています。これにより、従来は計算コストの制約で困難だったナノ秒スケールの界面化学ダイナミクスの解析が可能になります。

詳細

主要成果

研究チームは、リチウム金属負極と炭酸塩ベースの液体電解質の接触境界で起こる固体電解質界面（SEI）の初期形成および劣化反応を正確にシミュレートする機械学習モデルを構築しました。特に、基盤モデルであるMACE-MP-0を段階的に微調整した「MACE-MP-0-R4」モデルを用いることで、予測精度を大幅に向上させています。検証の結果、未調整のベースモデルでは電解質構成の力（force）の平均二乗誤差が0.251 electronvolts per angstromであったのに対し、R4モデルでは52 millielectronvolts per angstromまで改善し、DFT（密度汎関数理論）の標準的な精度閾値内に収まる結果となりました。

技術・詳細

本研究では、Materials Projectの軌跡データセットで事前学習された等変機械学習原子間ポテンシャル「MACE-MP-0」をベースに、破滅的忘却を避けつつ物理構成空間を拡大させるため、R1からR4までの4段階の反復的な微調整スキームを採用しました。

- **R1:** バルク液体電解質を用い、ONETEP DFTコードによるエネルギーと力の評価に基づき微調整。
- **R2:** リチウム金属表面に吸着した電解質分子の構造を組み込み。
- **R3:** バルク電解質と接触する未処理のリチウムスラブ界面を導入。
- **R4:** リチウムスラブと液体電解質の間に保護用無機コーティングを配置したデータセットを統合。

トレーニングには、150 Kelvinから350 Kelvinの温度範囲でサンプリングされた517の代表的な構成を使用し、Materials Projectのリポジトリから131,331個の構造を用いたマルチヘッドリプレイにより、50エポックの微調整を行いました。このモデルをLAMMPS分子動力学パッケージに組み込むことで、300〜450 Kelvinの温度条件下で、標準的なLP57電解質（1 molar LiPF6をECとEMCに3:7の体積比で溶解）を用いたナノ秒スケールのシミュレーションを実現しました。

背景・業界の文脈

リチウム金属負極は、理論比容量が3860 milliampere-hours per gramと高く、標準水素電極に対してマイナス3.04 voltsという低い電気化学ポテンシャルを持つため、非常に注目されています。しかし、実用化においてはリチウムデンドライトの成長や電解質の継続的な劣化が課題となっており、内部短絡や熱暴走、電池爆発のリスクを伴います。これらの問題を抑制するには、電子絶縁性とイオン伝導性を備えた安定的な界面層の設計が不可欠ですが、量子力学レベルでの界面化学ダイナミクスのシミュレーションは計算コストが極めて高く、従来のab initio DFTではシミュレーション時間が1〜10ピコ秒という極小の範囲に制限されていました。

今後の展望

本モデルの導入により、従来の経験的力場では困難だった複雑な界面反応における結合の形成と切断を捉えつつ、DFTレベルの精度を維持したまま計算時間を大幅に延長することが可能になりました。これにより、リチウム金属電池の安定性を高めるための界面層設計や、劣化メカニズムの解明が加速することが期待されます。

元記事: https://bioengineer.org/machine-learning-model-simulates-solid-electrolyte-interphase-reactions-in-lithium-batteries/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)

#12 NVIDIA DAQIRI｜GPUネイティブなデータ収集による科学計測のリアルタイムAI化

公開日 2026年11月19日　NVIDIA Technical Blog　アメリカ



概要

NVIDIAは、センサーデータを直接GPUメモリに転送し、リアルタイム処理を可能にするソフトウェア定義のデータ収集ライブラリ「DAQIRI」を提供しています。ローレンス・バークレー国立研究所が開発した電子顕微鏡カメラでは、500 Gbpsを超える超高速データストリームのリアルタイム処理を実現しました。これにより、ディスクへの書き出しを介さずに計測中にAIによる解析やフィードバックを行うことが可能になります。

詳細

主要成果：500 Gbps超のデータストリームをリアルタイム処理

NVIDIA DAQIRIの導入により、科学計測機器におけるデータ収集と処理のボトルネックが解消され、リアルタイムAIによる制御や解析が可能になりました。具体的な事例として、ローレンス・バークレー国立研究所（LBNL）のMolecular Foundryが開発した高ダイナミックレンジ電子顕微鏡カメラが挙げられます。このカメラは、従来の500倍以上の速度となる500 Gbpsを超えるデータストリームを生成しますが、DAQIRIを用いることで、計測と同時にGPU上でのフレーム組み立て、補正、およびエネルギー損失分光（EELS）の低減処理を実現しています。

技術詳細：GPUネイティブなデータ転送と新機能

DAQIRIは、NVIDIA Holoscanプラットフォームのライブラリであり、センサーからGPUへのデータパスを最適化することで、ディスクへの書き込みを挟まずにワークフローへデータを投入します。最新のリリースでは、以下の機能が追加され、パフォーマンスが向上しています。

- **ハードウェアパケット再順序付け：** NVIDIA ConnectX-7以降のNIC（ネットワークインターフェースカード）でパケットの再順序付けをオフロードし、CPUとGPUのリソースを解析に集中させることが可能です。
- **ibverbsエンジンの最適化：** 小さなパケットサイズにおいて、コアあたりのスループットをほぼ倍増させました。
- **ダイレクトポーリングモード：** アプリケーションの送信から受信までのレイテンシを2〜4 μsまで短縮し、時間的にシビアなパケット処理に対応しています。

また、FPGA読み出し電子回路からEthernet経由で送信されたデータをDAQIRIが直接GPUメモリで受信し、処理することで、5マイクロメートルのセンサーピクセルからサブミクロン単位の空間分解能を復元することにも成功しています。

背景：科学計測におけるデータ処理の課題

従来の電子エネルギー損失分光（EELS）では、強い信号と弱い信号を同時に捉えるために、最適化された2つの異なる収集プロセスを迅速に繰り返す必要がありました。これは電子光学系や露出タイミングの精密な調整を要し、後処理での整合合わせなど、収集と処理の両面で複雑な工程を伴っていました。しかし、データ転送速度がセンサーの性能に追いつかないため、計測機器の設計自体がデータ移動の制限によって制約されるという課題がありました。

今後の展望：インテリジェントな計測機器への展開

DAQIRIによるGPUネイティブなデータ収集は、電子顕微鏡以外の科学計測や産業用センサーにも応用可能です。計測中にデータをリアルタイムで検査し、関心領域（ROI）や収集パラメータを即座に調整できるため、実験の効率化や最適な動作条件の探索が加速します。既存のEthernet対応機器への処理・フィードバック機能の追加だけでなく、設計段階からGPU処理を前提とした新しい計測機器の開発が可能になると期待されます。

元記事: https://developer.nvidia.com/blog/enabling-real-time-ai-for-scientific-instruments-with-gpu-native-data-acquisition/

収集日: 2026年11月21日 | 自動記事収集・翻訳システム (AI使用)