

「レシピ探求」から「原理駆動」へ データ＆AIが拓く 「マテリアルズ・インフォ マティクス」の新地平

一人の店主の長年の経験、日々の試行錯誤、研ぎ澄まされた勘によって生み出された極上のラーメン。しかし、レシピを記録に残すことも、味を正確に再現することもできなかった。気温や材料のわずかな違い、寸胴をかき混ぜる力加減など、数値化できない無数の要素が完璧に噛み合った「一期一会の奇跡」だったからだ。奇跡のラーメンは、たった一度きりの幻に終わった――。

この再現できない奇跡のラーメンというフィクションは、私たちの社会を支える「材料」の開発現場で繰り返されてきた現実と驚くほど重なります。

熟練研究者の勘と経験で生まれた特定の配合やプロセス(=レシピ)はものづくりの強みである一方、全ての企業が乗り越えるべき課題でもあります。なぜなら、仮にレシピがうまくいっても、背後にある因果関係が「ブラックボックス」のままだと、再現や予測は困難を極めるからです。不確実性の時代において企業が持続的な成長を実現するには、勘と経験による一時の成功からいち早く脱却し、材料と機能の間に複雑に入り組む因果を客観的な「原理」として解き明かす、抜本的な変革を実践しなければなりません。

こうした変革を担うのが「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」です。MIは単なるツールの導入ではありません。材料開発の思考や行動を「レシピ探求型」から「原理駆動型」へとシフトする。客観的な法則と予測に基づく、確かなものづくりの地平を切り拓く。そうしたパラダイム転換そのものです。

MIを支えるのは「データ基盤」と「人工知能(AI)技術」です。また、これらの性能を拡張するのが、スーパーコンピュータを含む「ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)」であり、近い未来の変革の実践解となる「量子コンピュータ」です。一つひとつを個別に取り入れるのではなく、複数のテクノロジーを最適に連携させることでMIの推進力は一段と高まります。

MIがもたらす果実は単なるデータ分析や検証の正確性、効率性の向上にとどまりません。自律的な実験計画の策定や実行、ロボティクスによる自動検証までを統合した「次世代のものづくりオペレーションシステム」の基盤構築を可能とする道も拓くでしょう。

富士通は説明可能なAIや因果発見AI、AIエージェントといった先進的なAI技術を展開しています。データやHPCでも長年の経験と実績を積み重ねています。また、世界最先端の量子技術の研究開発体制を確立しています。本稿では、MIがもたらす効果、グローバルで成長を続けるMI市場の最前線、MI変革を推進する主要なテクノロジー、MI変革の実効性を高める富士通のアプローチを包括的に紹介します。ありがたい未来をたぐり寄せるために、レシピ探求から原理駆動へ。揺るぎない競争優位性を確立するための一步を共に踏み出しましょう。

目次

Section 1	3
> 材料開発の「Why」の真実を解き放つ	
■ 様々な産業・分野に適用の可能性	
Section 2	5
> 広がる市場、広がるAI	
■ MIがもたらすインパクト	
Section 3	7
> マテリアルズ・インフォマティクス変革を加速するテクノロジー	
■ データ基盤：原理を解き明かすための知の宝庫	
■ AI技術：データに潜む法則を導き出す知の探究者	
■ HPC：スパコンによるシミュレーションはMI変革のエンジン	
■ 量子コンピュータ：現状の限界を超える、MI変革の次世代のエンジン	
Section 4	9
> マテリアルズ・インフォマティクスを実践する富士通の包括的アプローチ	
■ 本質的な課題は「逆解析」の実現	
■ MI技術の全体像	
■ データ基盤にAIやブロックチェーン技術を統合	
■ 「技術革新への備え」と「業務・組織・人材の変革」を実行する	
Section 5	12
> おわりに	



材料開発の「Why」の真実を解き放つ

従来の材料開発の課題は、しばしば「ブラックボックス」に陥ってしまうことです。ベテラン研究者の膨大な知識と経験、あるいは偶然の発見によって生まれた特定の配合やプロセス＝How to(やり方)は、企業にとって確かに貴重な財産となるでしょう。一方、なぜそのレシピが成功したのか、という因果関係が不透明なままだと再現性は限りなく小さくなり、新たな課題にゼロから手探りで挑まなければなりません。地図もコンパスも持たず、嵐の海を航海するような「無謀な挑戦者」になってしまいかねません。

原理とは、ある材料が特性を発現する根本の因果関係、物理や化学的な法則、設計ルールを指します。MIはデータやAI、シミュレーションといったツールを通じ、ブラックボックスに隠れていた普遍的な知識の獲得を目指します。材料の原子や分子といったミクロレベルの構造が、どんな道をたどってマクロレベルの機能や性能へとつながるのか、客観的な法則を導くのが狙いです。一度原理が明らかになれば、目指す特性の実現に向け、設計図を書くように材料をデザインすることができるようになります。How toからWhyへ、という思考と視点、行動の転換こそ、材料開発に真の知性をもたらすのです。

MIによる革新的材料の創出

仮説構築 → デザイン (D) → 実験 (Build/Make) → 検証 (Test) → プロセス開発設計 → 製造

学習・解析 (Learn/Analyze)

研究現場を支える AI

データ

使えるデータを蓄積

クラウド・コンピューティング基盤

「レシピ探求」から「原理駆動」へ データ&AIが拓く「マテリアルズ・インフォマティクス」の新地平

■ 様々な産業・分野に適用の可能性

MI がもたらす変革の波は、多くの産業や分野に押し寄せようとしています(図表2)。

図表2: MI は多岐にわたる産業分野でイノベーションを加速する可能性を秘める

主な産業	主な開発分野	
化学・素材	- 高機能性ポリマー - 塗料・インク・接着剤	界面活性剤、添加剤
自動車	- 軽量・高強度素材 - 高性能バッテリー材料	燃料電池材料の耐久性向上
航空宇宙	- 極限環境に耐える超合金、複合材料 - 構造軽量化と安全性向上	耐腐食・耐摩耗材料
医療・ヘルスケア	生体適合性の高いバイオマテリアル	診断材料に使う新規センサー材料
エレクトロニクス	- 半導体材料の高性能化 - ディスプレイ材料の機能向上	次世代通信向け誘電体や高周波対応材料
エネルギー	- 高効率太陽電池材料 - 次世代蓄電デバイス材料	- 核融合炉材料 - カーボンニュートラル実現への新触媒材料

MIの活用はじわりと多方面に広がりつつあります。ただ、多くの企業や研究機関で部分的にとどまっているのが実態です。裏を返せば、先行した企業にとって市場の評価と競合優位性を高める絶好の機会になり得る、ということです。

MI変革は材料開発にかかる期間とコストを大きく削減し、新たなイノベーションの創出を加速するでしょう。資源の制約の克服、環境負荷の低減といった効果ももたらします。MIは企業の持続可能な成長と持続可能な社会の実現を同時に、強力に後押しする可能性を秘めているのです。



Section 2

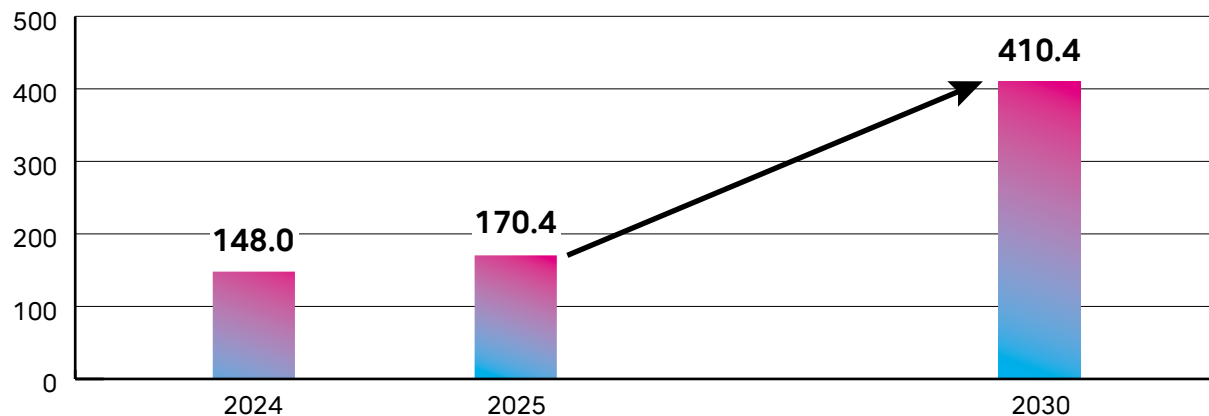
広がる市場、広がる AI

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)市場はグローバルで急速に成長を遂げている分野の一つです。

市場調査の MarketsandMarkets が 2025 年に公表したレポート「Material Informatics Market Size, Share & Trends, 2025 To 2030^{*1}」によると、世界の MI 市場規模は 2025 年の 1 億 7,040 万米ドルから 2030 年には 4 億 1,040 万米ドルに膨らむ見通しです。この間の年平均成長率は 19.2% に達します (図表 3)。

図表 3: MI 市場は年平均 20% 近い成長率で拡大する見通し

(単位: 100 万米ドル)



(出典) MarketsandMarkets のレポートをもとに富士通作成

MI を効果的に実践するうえで欠かせないのが AI です。市場調査を展開する 360iResearch のレポート「AI in Chemical & Material Informatics Market^{*2}」(2025 年公表)によると、化学と MI における AI の市場規模は 2025 年の 171 億米ドルから 2030 年に 896 億 6000 万米ドルに達する見通しです。同レポートは「産業界の実務家は、AI を実験支援から戦略的能力へと総合的に高める、いくつかの変革的变化を目の当たりにしている」と指摘します。

■ MI がもたらすインパクト

MI を実践し、かつ AI を最適に活用することで、どのような「変革的变化」をもたらすのでしょうか。以下、MI がもたらす主なインパクトを紹介します。

- 開発期間・コスト削減
市場投入までの時間や投資を短縮し、競合優位性を引き寄せる大きなアドバンテージをもたらします。
- 新規材料創出の機会拡大
人間の直感や経験だけでは到達できなかった「未知の材料空間」の探索を可能にします。
- サプライチェーンの最適化
材料の特性予測向上により、歩留まり率の向上に貢献します。また、使用済み燃料から高効率な資源回収プロセスを確立することで、資源循環型社会の実現を後押しします。
- エコシステムと研究開発体制の変化
MI を社会変革の基盤と位置づけ、企業と大学や研究機関との産学連携を促し、新たな知見や技術を素早く社会実装する体制を敷くことができます。

これらのインパクトの効果は、テクノロジーを局所的に導入しても極めて限られます。また、たくさんのビジネス課題が複雑に絡む時代において、1社だけでMI変革を成し遂げるのは困難を極めるでしょう。様々なテクノロジーの相互連携を実現する、志を同じくする企業・団体が手を携える。柔軟かつアジャイルな思考と実行がMIの実践力を高め、揺るがぬ競争優位性を保つことにつながるのです。

*1 Material Informatics Market Size, Share & Trends, 2025 To 2030
<https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/material-informatics-market-237816259.html>

*2 AI in Chemical & Material Informatics Market
<https://www.360iresearch.com/library/intelligence/ai-in-chemical-material-informatics>



Section 3

マテリアルズ・インフォマティクス変革を加速するテクノロジー

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) 変革は、複数のテクノロジーを最適に活用し、それらをお互いに連携させることで飛躍的に実践力を高めます。データ基盤、AI 技術、スーパーコンピュータ (スパコン) を含む HPC、そして量子コンピュータ。これらを MI 変革の好循環を促す主軸と位置づけ、「レシピ探求」から「原理駆動」への移行を加速させることが、材料開発に真の知性をもたらすのです。

■ データ基盤：原理を解き明かすための知の宝庫

データは、材料開発の原理を解き明かす「知の宝庫」であり、AI の性能を決定づける重要な要素です。MI 変革の大元の土台には、確かなデータ基盤が欠かせません。

- **質と量**: MI が機能するためには、データ量の豊富さだけでなく、高い質も極めて重要です。信頼性に乏しいデータをいくら集めても誤った知見しか得られません。データの標準化、信頼性の評価を通じて異なる実験結果やシミュレーション結果を統合し、価値ある原理を導き出すことが重要です。
- **データベース構築**: ばらばらに散らばっている研究や測定、シミュレーションの各データを構造化し、一元管理するデータベースの構築が不可欠です。パブリックデータベースはもちろん、企業独自のデータを安全に蓄積し、共有するプライベートデータベースの有効活用が知の体系化を促します。
- **データプロセス技術**: 欠損値の補完、ノイズ除去、正規化など、データを AI がきちんと扱える形に変換する前処理技術こそ、AI の学習効率と予測精度を決める重要な要素になります。高品質なデータプロセス技術の有無が、MI を通じて得られる原理の深さを決めるのです。

■ AI 技術：データに潜む法則を導き出す知の探究者

AI 技術は MI の根幹です。レシピの裏側に隠れた原理を、能動的に探索して導き出す「知の探究者」の役割を担います。人間には見つけられないデータに潜む細かい法則や複雑な因果関係を解き明かし、材料設計への具体的かつ明確な説明と洞察を示します。

- **AI モデル高度化**: グラフニューラルネットワーク (GNN) は原子や分子の構造の表現に優れ、材料の物性予測精度を高めます。ベイズ最適化や転移学習は、少ないデータからでも効率的に最適な材料探索を支援します。強化学習は、AI 自らが試行錯誤を通じ、目的の特性を持つ材料への最適な開発手順や作り方を見つける可能性を高めます。
- **説明可能な AI (XAI)**: AI が導き出した予測がいくら高精度でも、判断根拠が不明瞭なままでは活用するのは難しいでしょう。XAI は、AI の予測ロジックを人間が理解できる形で可視化して示すことができます。AI の提案を単なる「結果」としてではなく、新たな仮説や原理発見の重要な「ヒント」として使えるようになります。
- **因果発見 AI**: 原理の解明には、単なる相関関係ではなく、真の因果関係を捉えることが不可欠です。因果発見 AI は、データから統計的な因果関係を推定し、これまで経験的にしか分からなかった現象の背後にある根本的なメカニズムを明らかにする新たな道を拓きます。材料設計を経験則から真の科学的根拠へと昇華させる、重要な役割を担います。

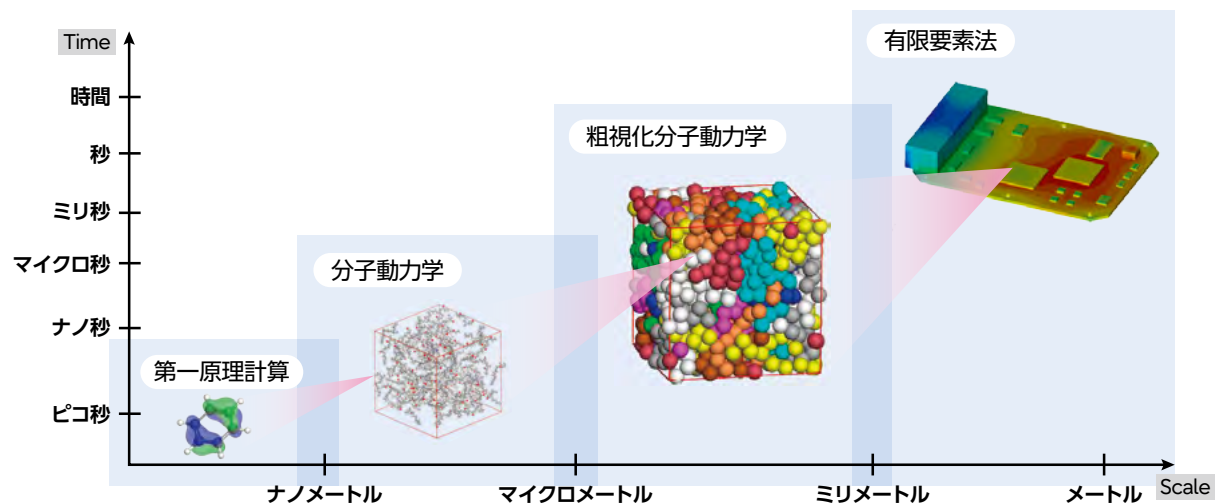
- **AIエージェント**:材料開発サイクル全体を自律的に推進する可能性を秘めています。AIが自ら仮説を立て、最適な実験計画を立案。さらにロボット実験システムを制御して実験をし、結果から学習して次の実験条件を最適化するという、一連のプロセスを自律的に繰り返すことを意味します。AIによる自律的な実験は開発期間やコストの短縮だけでなく、人手不足の解消や生産性の向上、プロセス最適化を実現する「次世代のものづくりオペレーションシステム」の一端を担います。

■ HPC:スパコンによるシミュレーションはMI変革のエンジン

AIがデータから原理を発見するのに対し、HPCを駆使したシミュレーションはその原理を検証し、さらに予測するMI変革の強力なエンジンを担います。材料の物理・科学挙動は極めて複雑で難解です。HPCは、従来の実験では到達できなかった極限条件やミクロな世界の挙動をバーチャル空間で再現し、予測します。AIが提案した材料候補の特性を高精度で評価したり、AIモデルの学習に使える合成データを生成したりすることで、MIの超高速サイクルを実現します。

- **大規模計算能力**:複雑な量子化学計算、数百万を超える原子の挙動を追跡する分子動力学(MD)シミュレーション、製品レベルの応答を予測する連続体解析まで、あらゆるスケールの計算を高速で実行します。圧倒的な計算能力によって材料設計のアイデアを広げ、人間だけでは見出せない「ありたい未来」への具体的な道筋を、バーチャルな世界で効率的に探ることができます。
- **マルチスケールシミュレーション**:材料の機能は原子・分子レベルの挙動から、結晶構造、ミクロ組織、最終製品のマクロな物性まで多様な空間的、時間的スケールで現れます。HPCは第一原理計算(電子の状態やふるまい)、分子動力学(原子・分子の運動)、粗視化分子動力学(原子・分子の集合体の挙動や自己組織化)、有限要素法(構造物全体の変形)など、各スケールに対応した計算手法を連携し、統合する「マルチスケールシミュレーション」を可能にします。材料の特性を原子レベルから製品レベルまで、一貫した物理法則に基づいて予測し、原理への深い理解へと導きます(図表4)。

図表4:異なるスケールの計算手法を統合するマルチスケールシミュレーション



■ 量子コンピュータ:現状の限界を超える、MI変革の次世代のエンジン

既存のテクノロジーでは越えられない計算の壁を打ち破り、未来の材料科学を再定義する可能性を秘めています。量子コンピュータはいまだ開発段階ですが、決して遠い未来のテクノロジーではありません。近い未来のMI変革のエンジンとして、材料設計の世界にブレークスルーをもたらすでしょう。今のうちから量子技術への研究開発に関わり、実際に自社で使うことを想定した量子アプリケーションによるユースケース開発に取り組むことが、競争優位性をぐっと引き寄せることにつながります。

Section 4

マテリアルズ・インフォマティクスを実践する 富士通の包括的アプローチ

マテリアルズ・インフォマティクス(MI)変革には、データ基盤やAI技術、HPCによるシミュレーション、そして近い将来には量子コンピューティングを最適に組み合わせることが重要です。本章では、富士通が実践知として積み重ねてきたこれらのテクノロジーをどのようにMI変革に活かそうとしているのか、詳述します。

■本質的な課題は「逆解析」の実現

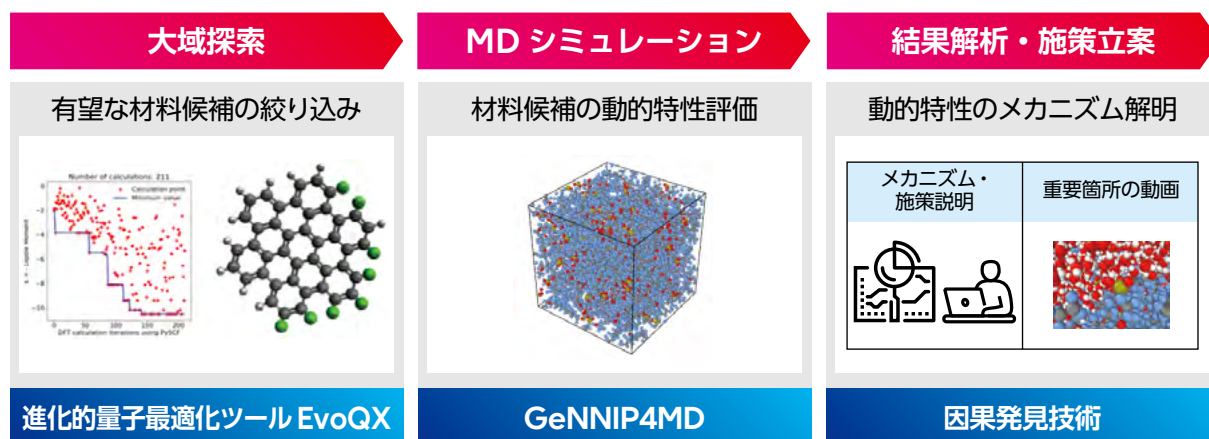
「MIの本質的な課題は、新材料に求められる目的を達成する条件の『逆解析』の実現だ」。富士通のグローバルソリューションビジネスグループの溝渕 真名武氏はこう語ります。

通常材料開発では「フォワード解析」と呼ぶアプローチが取られてきました。まず材料の構造や組成、プロセス条件を決め、その結果としてどのような特性を得られるかを予測するものです。一方、逆解析はこのアプローチを逆向きに進めるものです。まず求める特性を決め、そこに至るまでの諸条件を紐解きます。これにより、目的の特性を持つ材料を効率的に探索でき、開発期間やコストを減らせるほか、材料設計の精緻化を実現できる可能性も高まります。逆解析に対応する「コンピューティング技術とAIの組み合わせによる材料創出フローを自前で実現できるのが富士通の強み」(溝渕氏)です。

■MI技術の全体像

富士通のMI関連技術の全体像を簡易的に示します(図表5)。大域探索、分子動力学(MD)シミュレーション、結果解析・施策立案の組み合わせで材料開発のプロセスを加速させます。一連のプロセスにAIやコンピューティング技術、データ基盤を最適に融合し、クライアントの課題に応じた解決策を見出します。

図表5:様々なテクノロジーを駆使して材料開発プロセスを高度化する



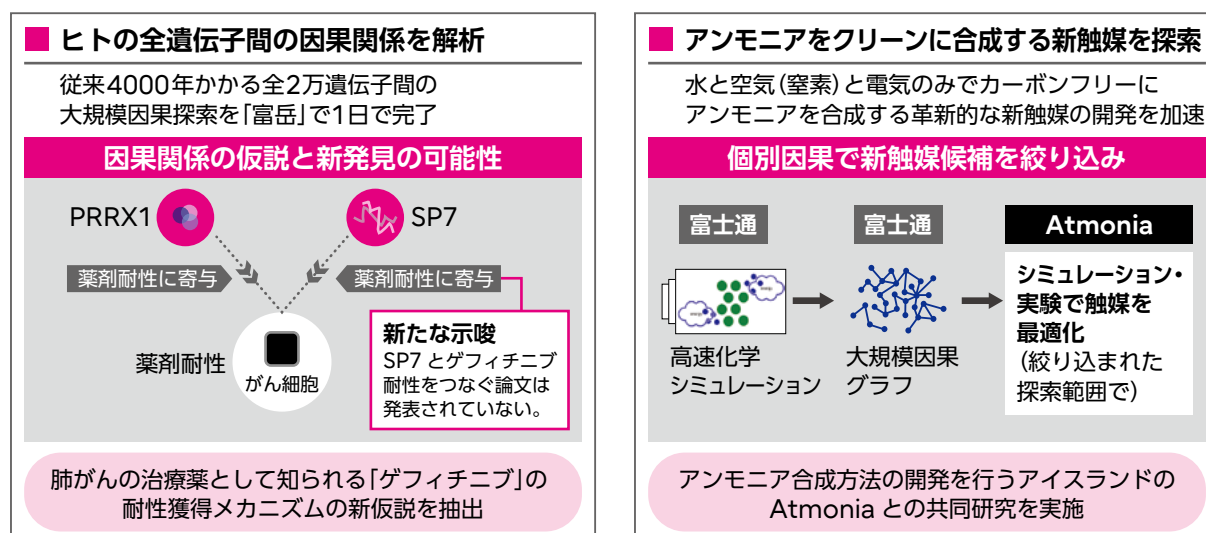
EvoQXはデータ学習とデジタルアニーラなどの量子インスパイアード技術、遺伝的アルゴリズムを組み合わせ、効率的に「最適解」を見つけ出す技術です。データ学習はデータやシミュレーションから「良い答え」がどんな特徴を持つ傾向があるかを学習します。量子インスパイアード技術は量子コンピュータが持つ「並列性」や「重ね合わせ」といった概念を取り入れたものです。膨大な探索空間から複数の候補解を同時に探索したり、従来では見つけにくかった良い答えを発見したりできます。遺伝的アルゴリズムは複数の候補解を生成し、それらを評価してより良い答えを残すことで、徐々に答えの品質を高めます。

GeNNIP4MD (Generator of Neural Network Interatomic Potential for Molecular Dynamics、研究開発中)はニューラルネットワーク力場(NNP)生成ツールです。NNPはMDシミュレーションの精度と計算効率を大きく高める技術として注目を集めています。ただ、NNPを構築するには高度な専門知識と時間がかかるほか、長時間のシミュレーションにおける安定性や精度も課題です。

GeNNIP4MDは不安定な構造を積極的にサンプリングし、NNPの訓練データに組み込むことで長時間のシミュレーションの安定性を大きく高められる特徴を持ちます。富士通の富士通研究所、コンピューティング研究所の坂井 靖文氏は「燃料電池の高分子電解質膜に適用したところ、2万原子系で30ナノ秒以上のMDを8日間で実現した。これはほかの既存の技術より100~200倍速い」と指摘します。

因果発見技術は材料開発のブラックボックスを解消します。富士通はクラウドベースのAIプラットフォーム「Fujitsu Kozuchi」の研究開発版を通じ、AIによって因果関係を発見したり、説明したりする技術を公開しています。AIとスーパーコンピュータ「富岳」を組み合わせ、肺癌治療薬に関する研究では、従来4,000年かかる全2万遺伝子間の大規模因果探索をわずか1日で完了させました。また、アイスランドのAtmoniaと共同で、アンモニアをクリーンに合成する新触媒の開発にも取り組んでいます(図表6)。

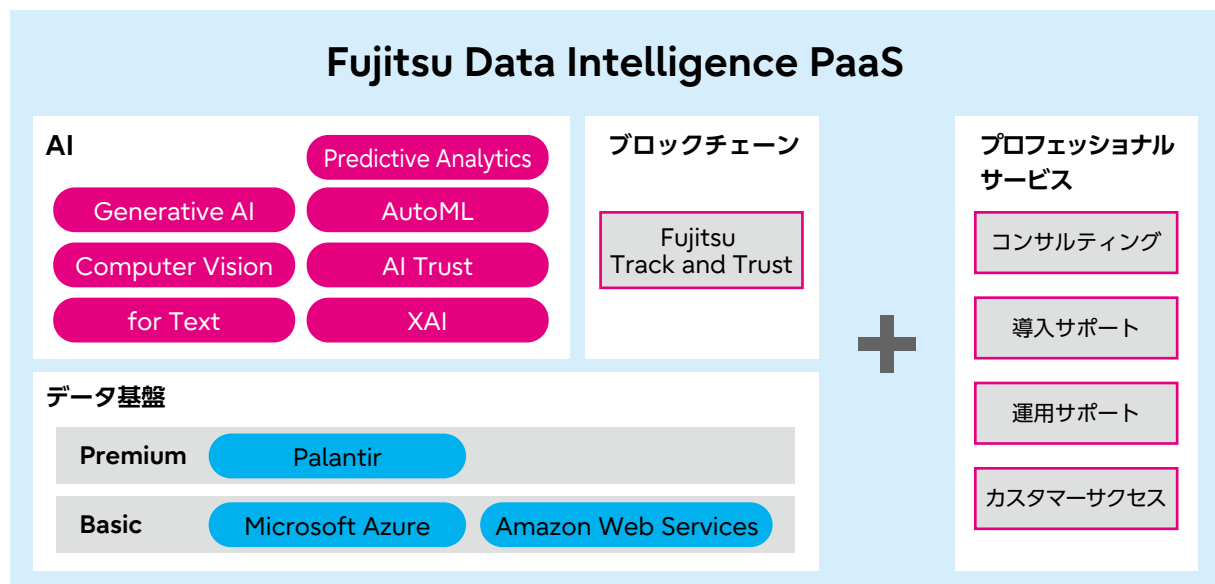
図表6: 膨大なデータから個々の条件において現れる重要な因果関係を発見する



■ データ基盤にAIやブロックチェーン技術を統合

データ基盤では、組織内外に散在する膨大なデータを意味の理解できる形に統合し、意思決定を支援するクラウドベースのオールインワン・オペレーション・プラットフォーム「Fujitsu Data Intelligence PaaS(DI PaaS)」を活用できます(図表7)。実験データや論文、特許データなど研究開発情報に加え、コストや設計・生産といった製品・生産情報などあらゆるデータをDI PaaSを通じて統合し、データの検索や解析、シミュレーションに効率よく活用できるように可視化することで意思決定を支援します。

図表7:DI PaaSを構成する要素



■ 「技術革新への備え」と「業務・組織・人材の変革」を実行する

MI変革は技術革新によって加速的に進みます。量子コンピュータはその典型です。変化のスピードが速まる中、大きな技術革新のブレークスルーの頻度はますます高くなるでしょう。いざというときに、最先端のテクノロジーを自社の成長に最適に使えるようにするには、今から技術革新への備えを徹底することが重要です。ありがたい未来を描き、未来から逆算して有効なテクノロジーを見定め、一歩ずつ足場を固めながら前進する。そうした歩みを、富士通はお客様と共に進めていきます。

また、MI変革はテクノロジーの導入だけで完結しない、ということも大事な視点です。テクノロジーを支える「人」と「組織」、「業務」のあり方を変えることも欠かせません。実験計画からデータ解析、製造プロセスへのフィードバックまでをデジタルで統合して効率化を進める。データのサイロ化を壊し、組織全体で知見とデータを共有する仕組みを整える。前例踏襲を止め、挑戦し続ける企業文化を醸成する。最適なテクノロジーの実装と、それらを最大活用できる全社変革。自社の課題に照らし合わせ、優先順位を付けながら着実に実行し続けることがカギとなります。

過去の成功は現在の抵抗に、日和見の慣習は改革の遅れに、半端な適応は未来の失敗に。MIを含む、全ての変革にはこうした落とし穴が付きます。変革の合間に潜む落とし穴を回避するためにも、トップマネジメントの強いリーダーシップが求められるのです。

Section 5

おわりに

世界を覆う不確実性を単なるリスクとして傍観するのではなく、変革と成長の機会として捉えることが、全ての企業に求められています。マテリアルズ・インフォマティクス(MI)変革は、まさに不確実性の時代を勝ち抜き、持続可能な成長を実現するために欠かせない戦略の一つと言えるでしょう。

私たちは今、選択を迫られています。「レシピ」という経験の束縛にとどまり続けるのか。それとも、「原理」という客観的な真実を追求するのか。ありたい未来を描き、実現に向けてテクノロジー、業務プロセス、組織、人材、企業文化を巻き込んだ全社変革へと踏み出す一歩こそ、次の世代へと続く持続可能な新たな価値を創造する礎となるのです。後手に回れば競争優位性はあっという間に失われます。進むべき道は決まっているはずです。材料開発の新地平を拓く旅に、共に挑戦しましょう。

著者紹介



鈴木 大祐(Daisuke Suzuki)

富士通株式会社 コーポレートインサイト部 部長

日本経済新聞社、PwC Japanを経て2024年3月に富士通入社。日本経済新聞では記者、デスクとして約18年間、財務省、金融庁、経済産業省など中央省庁の政策取材のほか、エネルギーやスタートアップなどの業界を担当。PwC JapanではThought Leadershipの企画立案、編集、執筆をリード。

著者は、このインサイトペーパーの作成中に洞察に満ちたレビューと貴重な助言をしてくださった坂井 靖文氏、實宝 秀幸氏、樋口 博之氏、溝渕 真名武氏に深く感謝申し上げます。また、新田 隆司氏と目黒 紘子氏の日ごろの揺るがないご支援に感謝申し上げます。

記載されている企業名・製品名などの固有名詞は、各社の商標または登録商標です。
本資料は発行日現在のものであり、富士通によって予告なく変更されることがあります。
本資料は情報提供のみを目的として提供されたものであり、富士通はその使用に関する責任を負いません。
本資料の一部または全部を許可なく複写、複製、転載することを禁じます。
富士通および富士通ロゴは、富士通株式会社の商標です。