

## 進化計算と大規模言語モデルを用いた樹脂複合材料逆設計手法の開発

### Inverse Design of Plastics via Evolutionary Algorithm and Large Language Model

(産総研) 室賀 駿, 松本 尚之, フタバドン, 畠 賢治

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

E-mail: muroga-sh@aist.go.jp

素材と製造プロセスにおける多様なニーズの変化へ対応するために、データ科学・AI、自律自動実験、ロボティクスなどあらゆるものを駆使したマテリアル分野の変革が行われてきた。米国では2011年のMaterials Genome Initiativeを皮切りに、2021年に制定されたStrategic Planを元に2024年にはMGI Challenge 2024が始動<sup>[1]</sup>、カナダやイギリスでも巨大な投資が行われ研究活動が活発になるなどまさに今現在時代の節目にある<sup>[2,3]</sup>。我々はこれまでに、人間の脳のように複数の情報を束ねて材料物性を予測するマルチモーダルAI<sup>[4]</sup>、人間の手を介さず自律的に駆動するClosed-Loop成形加工プロセス<sup>[5]</sup>などの開発に取り組んできた。そうした中でさらに求めるニーズに応じてものづくりを加速するための新たな仕組みとして、人間のニーズドリブンで状況に応じて迅速に解を見出す材料・プロセス条件の逆設計手法が重要であると考えてきた。

我々は本研究で人間のニーズから逆設計を行う仕組みとして進化計算と大規模言語モデルを組み合わせた手法について検討を行った。ここでは軽量でリサイクル性に優れ、用途に応じて異なる部素材の作り分けが求められる、ポリプロピレンに代表されるプラスチックをモデル系に組成や成形条件に関する逆設計に取り組んだ。逆設計においては人間のニーズを起点としたRISE(Request, Issue, Solution, Explanation)サイクルがあると考え、それぞれのステップを繋ぐモデルを構築した。第1ステップの要望からタスクへの変換では大規模言語モデルをメッセンジャーとして、第2ステップのタスクからソリューションへは学習済物性予測モデルと多目的最適化を担う進化計算アルゴリズムを、第3ステップのソリューションから説明性の付与には複数のパレート解を元にした大規模言語モデルを用いて、一連の流れを実行可能にした。これによりプラスチックの事例では、バンパー、フィルム、外装品などの用途や欲しい条件を言語として与えて、候補条件の提案に加えて理由の付加が可能になるため、目的に応じて自由自在に材料・プロセス条件を選択することが可能になった。こうした構築した手法はプラスチックに限らず、要望から候補解を迅速に見出し、人間を介さない探索(Closed-loop型自律実験)や、人間を介在させた条件選定(Human-in-the-loop)のいずれのタイプにも組み込み研究開発を加速することが期待される。本講演では構築した手法に加えて、マテリアルDXの将来展望に向けた構想を紹介し議論する。

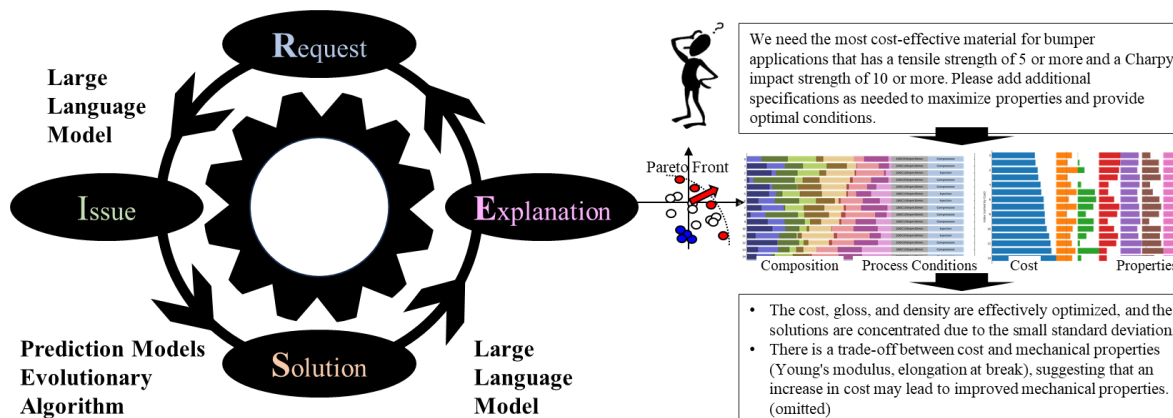


Fig. 1 Overview of our developed inverse design system as demonstrated by plastics.

謝辞：本研究の実験面でご助力いただいた産総研の根本茂幸氏、埴里美氏、廣瀬るみ子氏、吉原裕美氏にはこの場を借りて感謝申し上げます。

#### References:

- [1] An official website of the United States government, Link: <https://www.mgi.gov/2024-materials-genome-initiative-mgi-challenges> (accessed: Jan. 8, 2025).
- [2] Stach *et al.*, *Matter*, 4, 9, 2702-2726 (2021).
- [3] Tom *et al.*, *Chemical Reviews*, 124, 16, 9633-9732 (2024).
- [4] Muroga *et al.*, *Advanced Science*, 10, 24, 2302508 (2023), DOI: 10.1002/advs.202302508.
- [5] Muroga *et al.*, *Materials Horizons*, on-line published (2024), DOI: 10.1039/d4mh00051j.