

# AI力場モデルを用いた 無機有機複合膜の物性評価

神戸大学 科学技術イノベーション研究科  
科学技術イノベーション専攻 先端IT分野

川口・和泉研究室 cs28

氏名 神田 龍哉  
指導教員 川口 博 教授

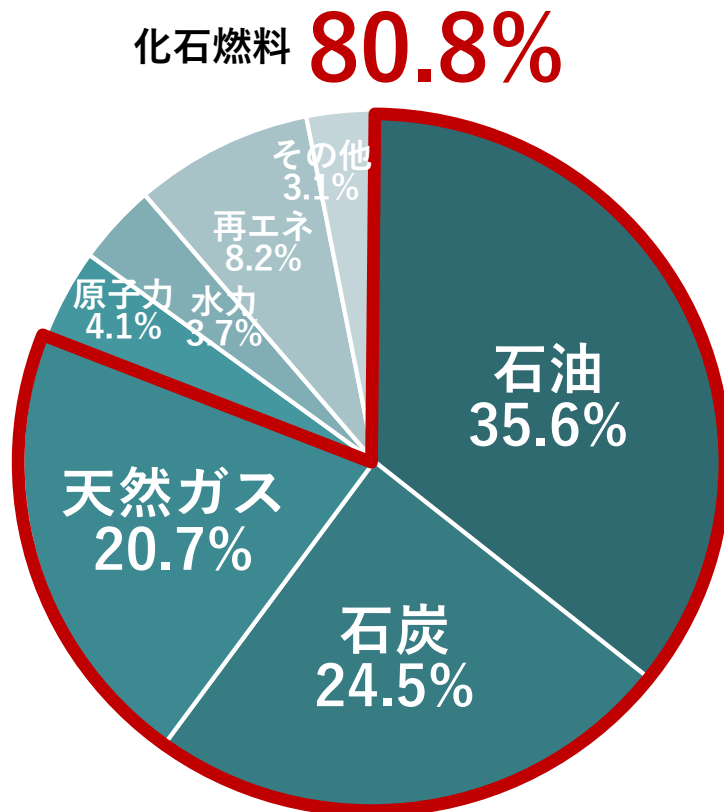
# 研究背景

## AI力場を活用したエネルギー材料開発の進展

▶ **SDGs実現へ：エネルギー材料開発の需要が拡大**

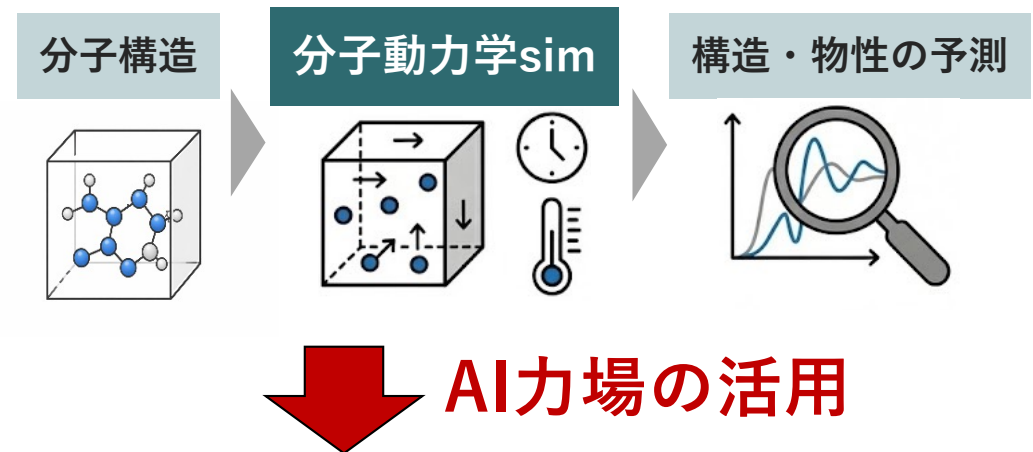
▶ **AI・シミュレーション技術の活用が発展**

日本の1次エネルギー供給割合（令和5年）

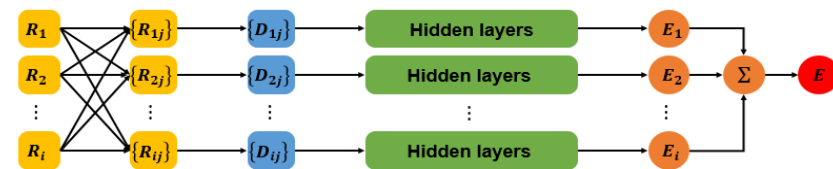


（出典）資源エネルギー庁「総合エネルギー統計」の2023年速報値

### 近年の材料開発



### NNP-MD



😊 高精度・高速なシミュレーション

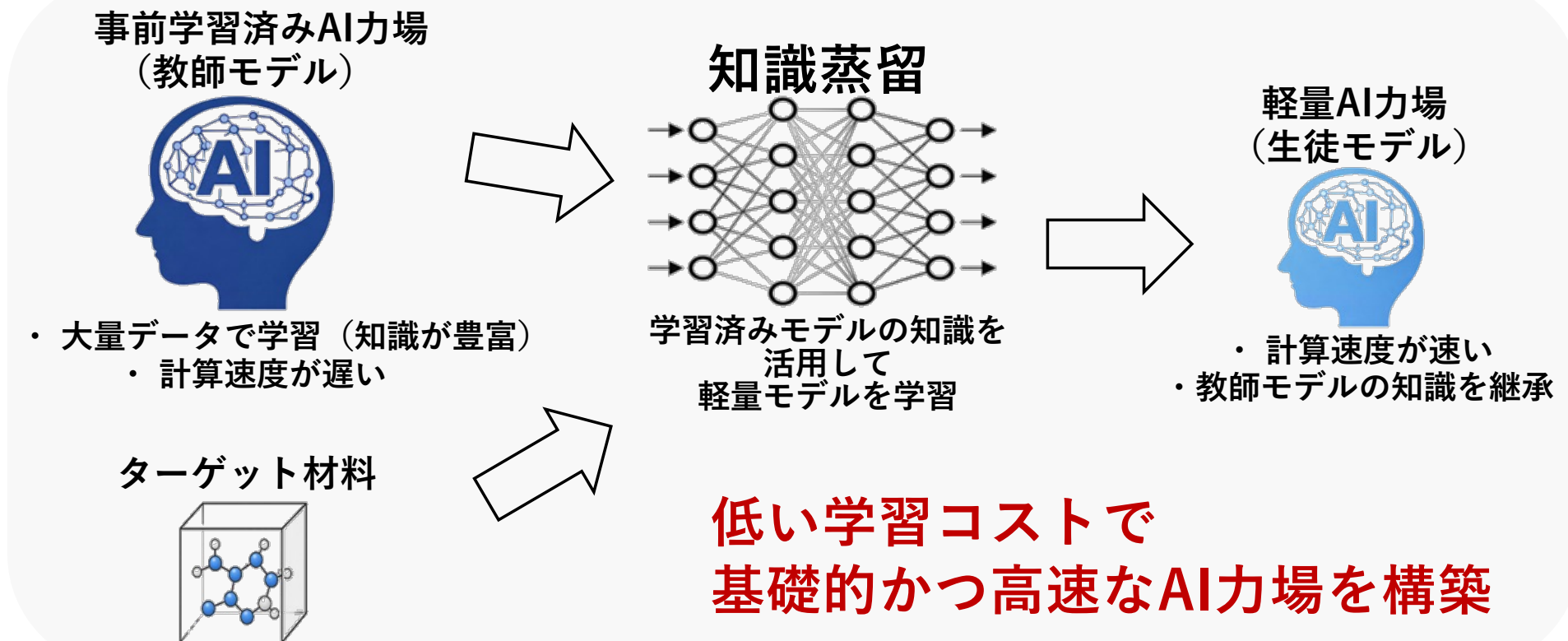
😞 学習データセットの生成コスト高

# 研究目的

## 知識蒸留フレームワークによるAI力場学習法の提案

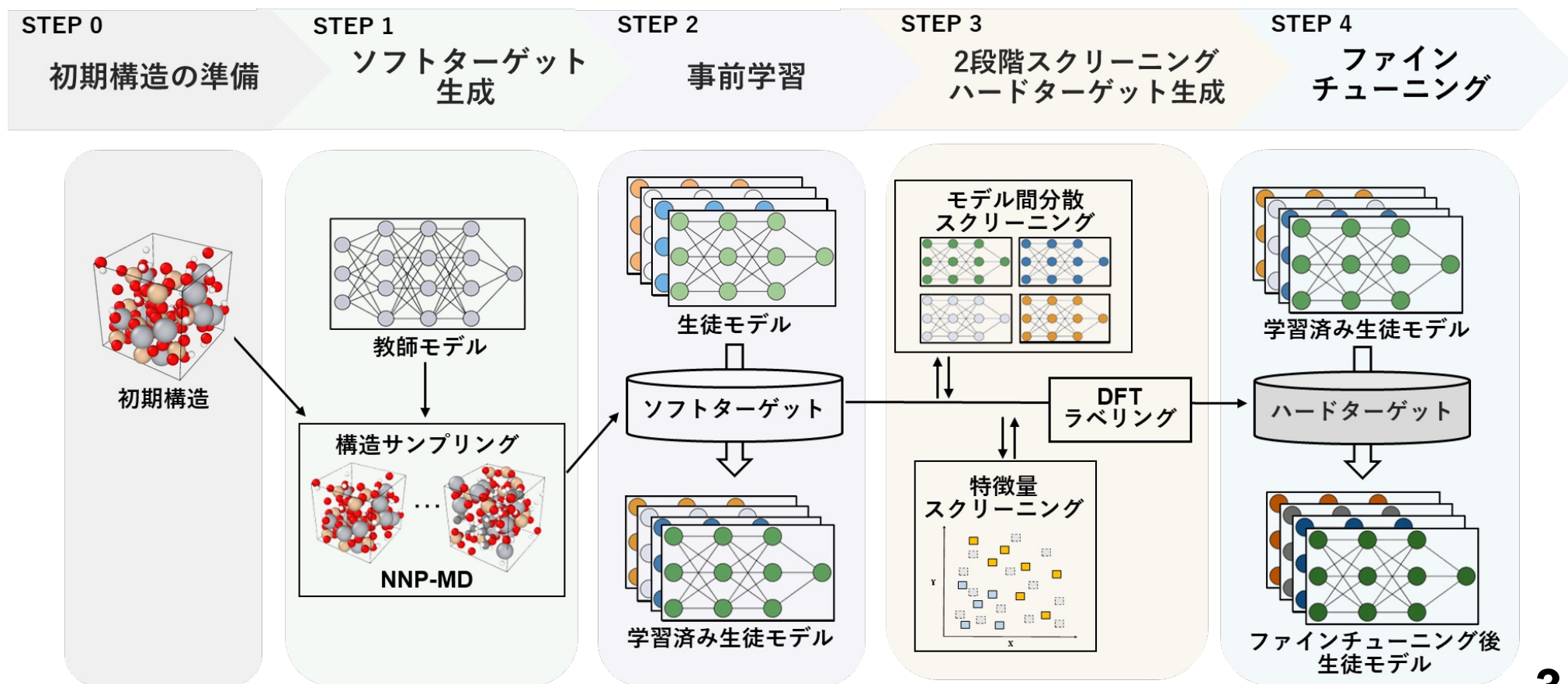
- ▶ AI力場の学習コストを削減しつつ、高精度・高速なシミュレーションを実現
- ▶ エネルギー材料開発における効率的な材料設計への応用

### ▶ 知識蒸留原理



## 知識蒸留フレームワークによる効率的なAI力場学習

教師モデルの知識を活用して基礎力場を構築し、スクリーニングにより選択した重要構造に対してのみ高精度DFTラベリングを行う



# 研究の成果 / 事業化の可能性に関する考察

## ▶ 評価結果 (対象: $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ 無機膜)

| 学習法         | 学習コスト (DFT回数) |
|-------------|---------------|
| 能動学習 (従来手法) | 10120         |
| 知識蒸留 (提案手法) | 4553          |

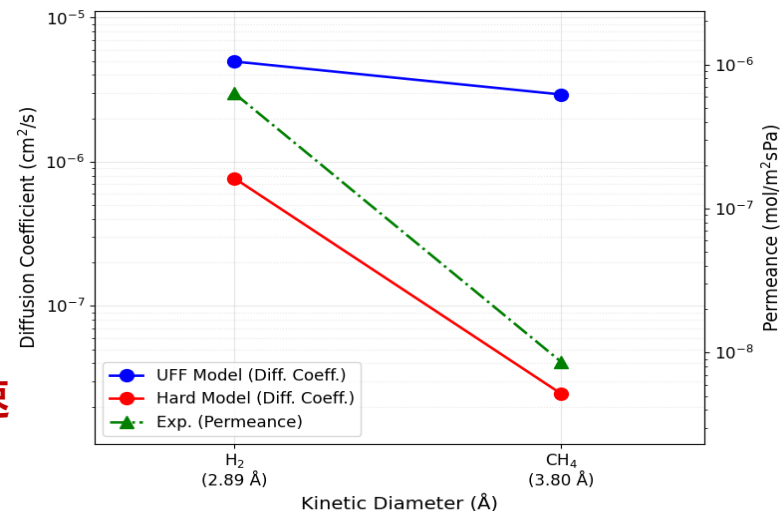
約55%削減

| モデル         | 速度 (timesteps/s) |
|-------------|------------------|
| DFT         | 0.0037           |
| UFF         | 1906.577         |
| AI力場 (提案手法) | 53.607           |

約14,558倍高速

分子サイズに対する拡散・透過特性

→ 提案手法は実験の傾向と一致 (高精度)



## ▶ 事業化考察

FACT

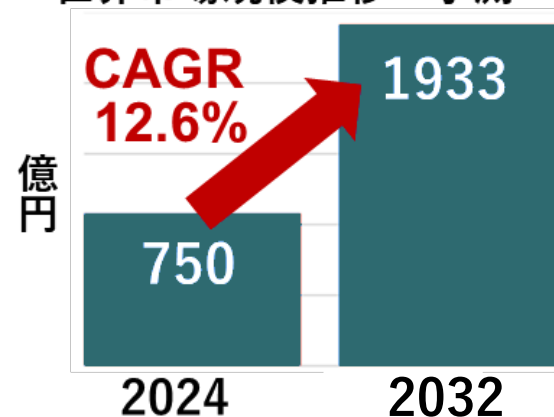
- ・ 環境 / エネルギー分野への関心 (SDGs)
- ・ 高機能分離膜市場の拡大

→ エネルギー材料開発需要の拡大

NEED

- ・  $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-ACA}$  無機有機複合膜系におけるサンプリング手法の改善による精度向上
- ・ 他材料系への適用可能性の検証

高機能分離膜の  
世界市場規模推移・予測



矢野経済研究所「高機能分離膜市場に関する調査 (2025年)」