

PRESS RELEASE (2026/04/15)

## 工学研究院化学工学部門 井上研究室が NEDO「GENIAC-Prize」にて地域賞を受賞

～AIを活用した電池シミュレーションの自動化で、研究開発期間を20分の1に短縮～

### ポイント

- ① マルチスケールの各種電池シミュレーターの独自技術と生成AIを連携
- ② 産業界の各種ニーズに即時対応できるAIエージェントシステムを構築
- ③ 高性能な次世代電池開発やDX技術を基盤としたデバイス開発に貢献

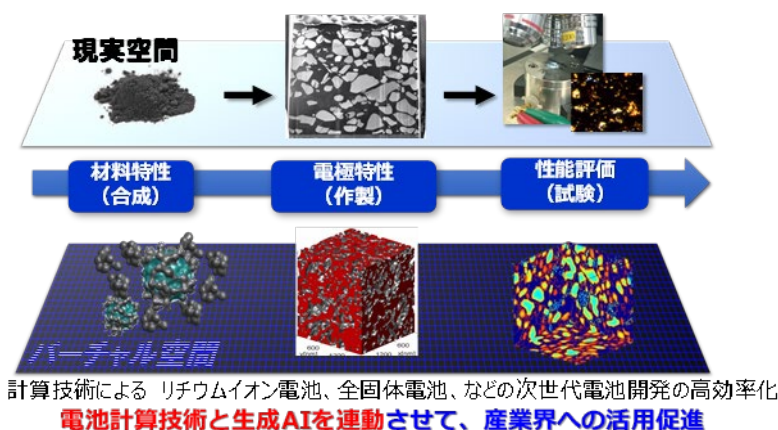
### 概要

国立大学法人九州大学大学院工学研究院の井上 元 教授は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）が主催する生成AIの利活用に関するビジネスコンテスト「GENIAC-Prize」において、この度「地域賞」を受賞いたしました。これまで専門家が手作業で行っていた高度な「電池丸ごとシミュレーション」の条件設定をAIにより自動化する技術を提案し、その革新性と高い社会実装の可能性が評価されました。

九州大学 井上研究室では、二次電池をマルチスケールでシミュレーションする独自の技術を有しており、これまで多数のプロジェクトや、自動車・電池材料分野の企業との共同研究・受託研究に取り組んでまいりました。しかし、各種材料を用いた精緻な電池シミュレーションを行うためには、その前提の確認や目的を共有する必要があるため、そのために多くの技術論議や意見交換を行う必要がありました。そしてその後も、研究室にてその複雑な条件設定を行う必要があり、対応できる人材が限られていることが大きな課題となっていました。

今回の「GENIAC-Prize」では、この課題を解決するため、株式会社ONIXIONの協力を得て、生成AI等を活用してシミュレーションの条件設定を自動化するシステムを提案しました。これにより、従来要していた条件設定の期間を「20分の1」に大幅に短縮することが可能となります。

今後は起業を視野に入れ、材料選定や設計開発の最適化を推進していきます。また、本技術で得られた「先進的ゆえに使いこなせない計算科学」をAIで支援する知見は、電池リサイクルや再生医療など、複雑な現象を扱う他の分野にも広く応用可能であり、極めて高い公益性を持っています。



### 研究者からひとこと：

これまで独自開発してきました各種電池のシミュレーション技術を、より産業界にて活用いただくために、生成AIと組み合わせた仕組みを開発しました。本仕組みが開発の加速に貢献できると考えています。今後の展開にもどうぞご期待ください。

## 【研究の背景と経緯】

持続可能な脱炭素化カーボンニュートラル社会の実現には、多様なエネルギーキャリアや再生エネルギー利用など多くの要素技術の革新が求められ、特にその中心となる電池について、より一層の容量・出力・コスト・信頼性の向上と利用資源の課題解決が急務です。電池は、「材料」だけで実現されるものではなく、複数の素材を組み合わせて化学反応や輸送現象といった機能を発揮する「デバイス・システム」であり、有望な材料を迅速に製品化まで繋げられる、新たな研究開発の方法論の確立が必要です。日本は、構造材料・電子材料・磁性材料・有機材料等のマテリアル産業において、60%以上の高い世界シェアを占める一方、液系リチウムイオン電池のようなデバイスのシェアは近年著しく低下しています。潤沢な研究開発費と研究人材を擁する海外諸国に対抗していくためには、従来からの大量の試作・評価を前提とした研究開発方法を見直していく必要があります。

新たな研究開発方法として、対象システムをモデル化し、シミュレーションで検証しながら設計開発を進めるモデルベース開発（MBD）手法が注目されています。本手法が有効に機能すれば、設計工程での検証が可能となり、さらに手戻りが少なくなることで開発工数の大幅な短縮と高品質化が実現します。また、検証工程における影響評価や現象理解を通して、素材開発へのフィードバックも可能となります。これまで当研究室では多くの電池内部現象を明らかにするシミュレーターの開発を行ってきました（例えば、シリコンを負極に用いる全固体電池のモデル化とシミュレーター開発については、2025年3月にプレスリリース発表 [https://www.kyushu-u.ac.jp/f/60879/25\\_0311\\_01.pdf](https://www.kyushu-u.ac.jp/f/60879/25_0311_01.pdf) を実施）。

このシミュレーション技術について、産業界からの共同・受託研究の依頼も多い状況です。この研究シーズの産業利用を加速するため、スタートアップ・起業により、パッケージ化による事業化を検討してきましたが、モデルの選定や計算条件の設定などを適切に行い、その結果を適切に解釈する、シミュレーションを使いこなす人材が不足している課題を特定しました。このようなシミュレーションを使いこなす人材の不足は、モデルベース開発や設計フロントローディングなど、R&Dにおけるデジタル技術の活用や産業DXのアクレス腱とも言える重要な課題です。また、日本には計算科学分野の研究者が3万人以上いると推計しており、それに近い数の研究成果が同じ課題により産業活用されずに埋もれている可能性があります。

そこで、シミュレーションを使いこなす人材をAIエージェントにより補完・代替することを目的として、シミュレーション・モデルの選定と計算条件の設定という、従来人手に依存していた工程を自動化することを進めました。これは従来「様々なリテラシーのユーザーの要望から、不足情報を特定し、論理的に推論することで、適切なモデルと条件を引き出す。」「最新の研究成果や暗黙知を継続的に学習し、その推論が科学的に正確である」という要件がありました。

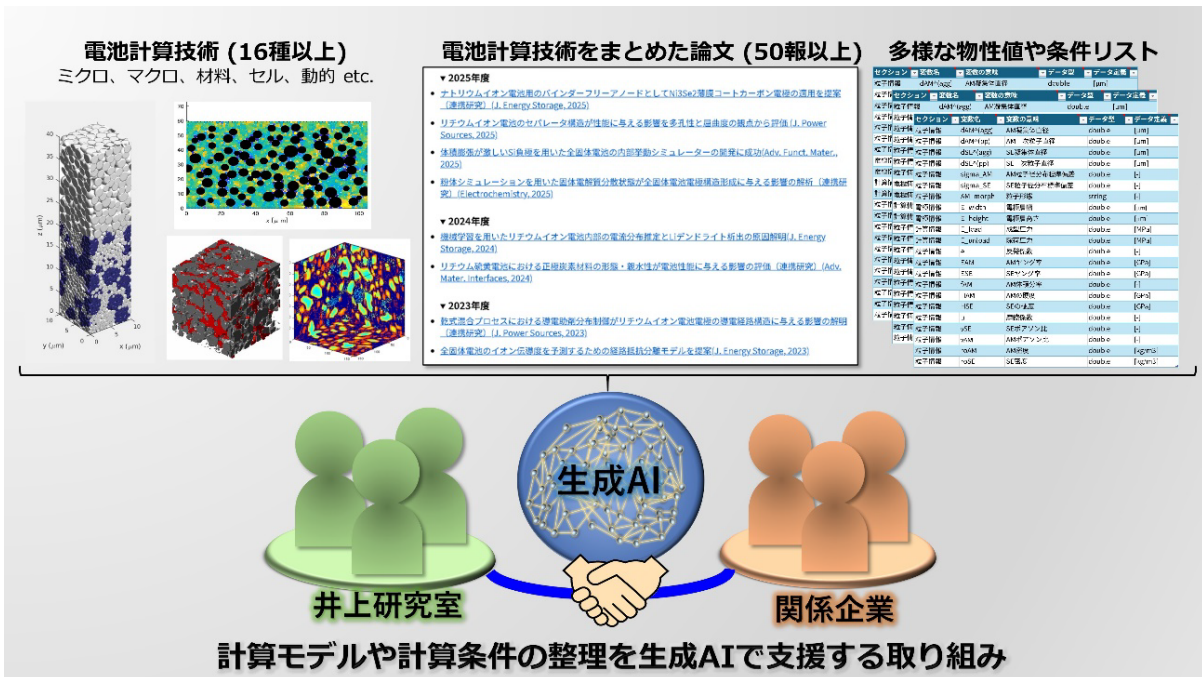
## 【開発内容と成果】

ユーザーアプリと管理者アプリから構成されるシステムを構築しました。今後も最新の研究成果が出続け、それによって産業界からの質問内容も変わっていくことを見込み、生成AIも「進化し続けること」を念頭に開発しました。ユーザーアプリでは、チャット形式でヒアリングをして、シミュレーションに必要なモデルや計算条件を特定します。このように、計算目的や用いるデータを確認していき、最後にニーズに最も近い手法を選択し、計算実行につなげます。これまで科学計算を行うにしても、どうやって行うのか？何ができるのか？という導入や理解の障壁、データの取り扱いなどの要求障壁がありましたが、これらの様々な都合を加味した対応が可能となります。管理者アプリでは、最新の計算技術や論文、対応可能な変数、データなどを適宜追加できるようにし、「進化し続ける生成AI」を実現しました。

## 【今後の展開】

将来はマルチエージェント化を進めます。計算条件の設定だけでなく、計算の実行、結果の解釈の生成AIを開発し、これらを連動させます。さらに、実際の材料や電池のデータを取り込み、その組み合わせの相性をシミュレーションで予測するマッチング・サービスを実現します。我々は、スタートアップを立ち上げ、生成AI×シミュレーションにより各々の性能を最大化する候補先のマッチングをサポートすることで、電池産業の競争力強化に貢献します。また、今回開発した生成AIは、オープンキャンパスに来た生徒や研究室に入りたての学生の理解度を高めることができ、このフレームワークが計算科学分野の研究の社会・産業的価値を高める一助となることを期待します。

## 【参考図】



【関連リンク】

- NEDO GENIAC-Prize 公式サイト: <https://geniac-prize.nedo.go.jp/>



- 九州大学大学院工学研究院 化学工学部門 井上研究室（プロセスシステム工学研究室）：  
<https://altair.chem-eng.kyushu-u.ac.jp/>



- 株式会社 ONIXION : <https://onixion.com/>

