

## ブラックボックスな AI を"説明可能"に：アニオン交換膜の分子設計指針を抽出 ～説明可能 AI・ChatGPT・専門家の協働により、材料開発の試行錯誤を削減～

### ポイント

- ① 燃料電池や水電解装置(※1)の中核部材であるアニオン交換膜(※2) (AEM) は、水素社会の実現に向けて重要な材料であるが、その分子設計は依然として経験則に大きく依存していた。
- ② 機械学習 (ML)、特に人工ニューラルネットワーク (ANN) (※3)は高分子材料の物性を高精度に予測できるが、その判断根拠が分かりにくい「ブラックボックス」であり、実験研究者が予測結果を分子設計へ活用することは容易ではなかった。さらに、説明可能 AI (XAI) (※4)手法も、高次元の分子記述子(※5)を扱う ANN モデルでは計算コストが大きく、実材料系への適用が難しかった。
- ③ 本研究では、346 種のアニオン交換膜 (AEM) ポリマーに基づく独自の実験データベースを用いて、説明可能 AI、ChatGPT、および専門家の知識を組み合わせた Human-in-the-loop(※6) のフレームワークを構築した。独自の次元削減戦略により高次元 ANN への説明可能 AI 適用を実現し、ブラックボックス AI の予測結果から、ビフェニル骨格の有効性や側鎖長 8 結合距離の重要性など、実験研究者が活用できる定量的な分子設計指針の抽出に成功した。
- ④ 本フレームワークにより、AI の予測根拠を研究者が理解し材料設計に反映できるようになるため、材料開発における試行錯誤の削減と候補材料の効率的な絞り込みが期待される。さらに、データベースおよびソースコードは GitHub で公開しており、AEM 以外の機能性高分子材料にも展開可能であることから、幅広い材料系の研究開発加速への貢献が期待される。

### 概要

水素社会の実現に向けて、燃料電池や水電解装置の中核部材であるアニオン交換膜 (AEM) 材料の開発が急がれています。近年、人工知能 (AI) を活用した材料設計が注目されていますが、高精度な予測を可能にする人工ニューラルネットワーク (ANN) はその判断根拠が分かりにくい「ブラックボックス」であるため、実験研究者が予測結果を理解し、分子設計に活用することは容易ではありませんでした。さらに、AI の判断根拠を可視化する説明可能 AI (XAI) 手法も、高次元の分子記述子を扱う ANN モデルでは計算コストが大きく、実用的な適用が難しいという課題がありました。

九州大学大学院工学研究院の加藤幸一郎教授、藤ヶ谷剛彦教授および同大学大学院工学府博士課程 3 年の Phua Yin Kan 氏らの研究グループは、燃料電池や水電解装置の中核部材を担うアニオン交換膜 (AEM) 材料を対象に、説明可能 AI、ChatGPT、および専門家の知識を組み合わせた Human-in-the-loop のフレームワークを構築しました。本手法により、従来は経験則に大きく依存していた設計指針に対して、分子記述子レベルで構造と物性の関係を定量的に結び付けることに成功し、ビフェニル骨格の有効性や側鎖長が 8 結合距離である重要性など、実験研究者が活用可能な定量的設計指針を抽出しました。

本成果により、AI が「予測する」だけでなく、「なぜそう予測したのか」を研究者が理解し、材料設計に反映できるようになることで、材料開発における試行錯誤の削減と候補材料の効率的な絞り込みが期待されます。さらに、データベースおよびソースコードは GitHub で公開しており、アニオン交換膜以外の機能性高分子材料にも展開可能であることから、幅広い材料系の研究開発加速への貢献が期待されます。

本成果は、2026 年 4 月 14 日に英国王立化学会が発行する国際学術誌「Journal of Materials Chemistry A」に掲載されました。



**(左図) 本フレームワーク概要**  
 AEM 化学構造を分子記述子に変換し、ANN で物性を予測。SHAP で重要記述子を特定、ChatGPT と専門家の協働により ANN 予測論理を解析。

### 【研究の背景と経緯】

地球温暖化対策として持続可能社会・水素社会の実現が急務となる中、水素社会の鍵となる燃料電池や水電解装置の中核部品を担うアニオン交換膜 (AEM) 材料の早期実用化が望まれています。AEM ポリマーの分子設計では、高いイオン伝導性と長期アルカリ安定性の両立が求められますが、これらは互いに競合する要求であり、設計は依然として経験則に大きく依存しています。近年、機械学習 (ML) や人工知能 (AI) を活用して材料開発の効率化を図るマテリアルズインフォマティクス (MI) (※7) が注目を集めています。本研究グループは、これまでにアニオン交換膜 (AEM) ポリマー 346 種の化学構造と物性を体系的に収録した独自のデータベースを構築し、教師なし機械学習による材料マップを作成することで構造と性能の関係性を俯瞰的に可視化してきました。しかし、材料マップからは個別の構造特徴と物性との関係を定量的に抽出し、実験研究者が合成戦略に活用できる設計指針として提示することは困難でした。このような課題に対して、構造と物性との関係をより精度高く予測する手法として、人工ニューラルネットワーク (ANN) が注目されています。ANN は複雑な構造と物性との関係を捉える高い予測精度を持ち、AEM ポリマーを含む幅広い材料系で活用されています。しかし、ANN はその判断根拠が分かりにくい「ブラックボックス」であるため、予測精度が高くても「なぜその予測になるのか」を実験研究者が理解することは難しく、予測結果を分子設計に直接活用することは容易ではありませんでした。こうした課題に対して、AI モデルの判断根拠を可視化する説明可能 AI (XAI) 手法が注目されていますが、本研究で扱うような数千次元の分子記述子を扱う ANN モデルでは計算コストが急増するため、実用的な適用が難しいという技術的障壁がありました。加えて、XAI によって重要と特定された分子記述子は数学的に抽象的であり、実験研究者がそれを直感的に理解し、「どのような構造を合成すべきか」という具体的な設計指針へ変換することも容易ではありませんでした。近年急速に普及している ChatGPT 等の大規模言語モデル (LLM) (※8) は、このような分子記述子の定義や数理的特徴を自然言語として解釈する補助ツールとして有望です。しかし、化学分野での信頼性には限界があり、専門家の監督なしでは誤解や過剰な一般化を招く可能性が指摘されています。そのため、AI の予測結果を、専門家が理解し活用できる設計指針へ変換するために、説明可能 AI、LLM、専門家による検証を統合した方法論の確立が求められていました。

### 【研究の内容と成果】

本研究では、アニオン交換膜 (AEM) ポリマー 346 種の実験データを収録した独自のデータベースを用いて、ブラックボックスである人工ニューラルネットワーク (ANN) モデルから、実験研究者が活用できる定量的な分子設計指針を抽出するフレームワークを構築しました (上図)。まず、統計的手法と説明可能 AI に基づく独自の 2 段階次元削減戦略により、数千次元の分子記述子空間を 67 次元に圧縮しました。この次元削減により、従来は計算コストの壁から困難であった高次元 ANN モデルへの説明可能 AI (SHAP) 解析の適用を実現するとともに、ANN の予測精度の向上にもつながりました。次に、SHAP 解析で特定された重要記述子の解釈に ChatGPT を活用しました。ChatGPT に記述子のソースコードと公式定義を与え、数学的に抽象的な記述子を化学的に直感的な言語へ変換する補助を行いました。その際、ChatGPT の出力には解釈の偏りや限界が見られたため、専門家による検証と修正のプロセスを組み

込むことで、解釈の信頼性を確保しました。この一連の流れにより、ビフェニル骨格の有効性、主鎖から陽イオン部位までの側鎖長が 8 結合であることの重要性、および 4 炭素ごとのヘテロ原子導入の重要性など、定量的な分子設計指針の抽出に成功しました(図 1)。これらの指針は、最新の実験的知見と独立に整合しており、従来は経験則として語られてきた設計知見に対して、記述子レベルの定量的根拠を与えるものです。さらに、抽出された設計指針に基づき提案した 4 つの概念的 AEM ポリマーのうち 2 つが、80°Cにおいて 0.1 S cm<sup>-1</sup>以上のアニオン伝導率を示すと予測されました。学習データベース中で同条件を満たすポリマーは 14.4%にとどまることから、本フレームワークが有望候補の効率的な絞り込みに有効であることが示唆されました。

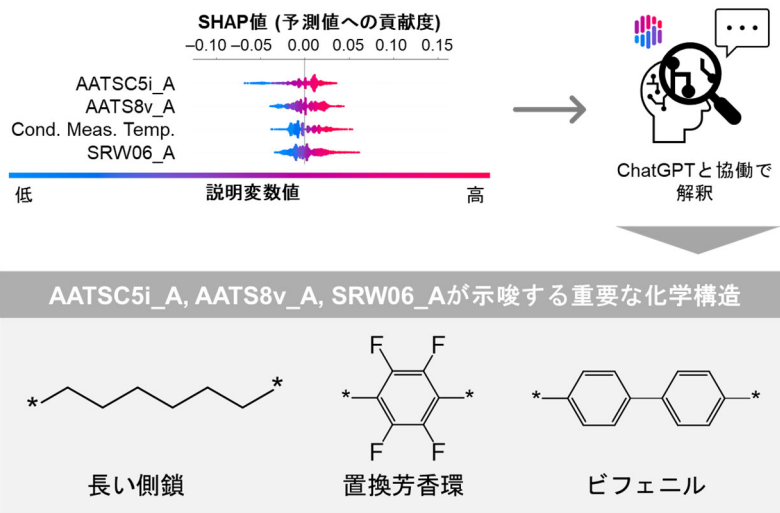


図 1 ChatGPT と専門家の協働によって導き出したアニオン交換膜のアニオン伝導率に寄与する可能性が高い設計指針

### 【今後の展開】

本研究ではアニオン交換膜材料を対象としましたが、本フレームワークは分子記述子を用いる材料系全般に適用可能です。つまり、様々な機能性高分子材料において、ブラックボックス AI の予測結果から実験研究者が理解し活用できる設計指針を抽出することを可能とし、材料開発における試行錯誤の削減に貢献することが期待されます。これは、有望な候補材料を実験に先立って効率的に絞り込むことを意味し、合成・評価に要する時間やコストの軽減につながります。今後は、共著者である東京都立大学・田中学准教授との連携のもと、本フレームワークで提案された概念的ポリマー構造の実験的合成・評価を進め、予測精度および設計指針の妥当性を実験的に検証する予定です。さらに、データベースおよびソースコードは GitHub で公開しており、他研究グループによる他材料への展開・検証も期待されます。本フレームワークをベースに、今後、他の機能性高分子材料をはじめ幅広い材料系への適用を進め、AI と研究者の協働による材料設計の新しい枠組みの確立を目指していきます。

### 【用語解説】

#### (※1) 水電解装置

説明 電気エネルギーにより水を水素と酸素に分離する装置。再生可能エネルギーによるグリーン水素の製造手段として注目されている。

#### (※2) アニオン交換膜

説明 イオンを選択的に透過させるイオン交換膜の一種であり、陰イオン（アニオン）を通す膜。燃料電池や水電解装置において、電極間でイオンを輸送する中核部材として用いられる。

#### (※3) 人工ニューラルネットワーク (ANN)

説明 人間の脳の神経回路を模した機械学習モデルの一種。複雑なデータの中から規則性を学習し、高精度な予測を可能にする一方で、判断の根拠が分かりにくい「ブラックボックス」になりやすい。

#### (※4) 説明可能 AI (XAI)

説明 AI モデルがどのような根拠に基づいて予測を行ったかを、人間が理解できるようにする技術の総称。本研究では、予測に影響した要素を可視化するために活用した。

#### (※5) 分子記述子

説明 分子の構造や性質を数値で表現したもの。原子の種類や結合の仕方、分子の大きさ、電子的性質などを数値化することで、コンピュータによる材料の分析や予測が可能となる。

(※6) Human-in-the-loop

説明 AI の出力を人間の専門家が検証・修正するプロセスを明示的に組み込んだ枠組み。AI の有用性を活かしつつ、誤りや偏りを専門家が補正して信頼性を高める考え方。

(※7) マテリアルズインフォマティクス (MI)

説明 機械学習やデータ科学の手法を材料研究に応用し、新材料の探索や開発を効率化する研究分野。従来の試行錯誤的な実験に対して、データに基づく合理的な材料設計を可能にすることが期待されている。

(※8) 大規模言語モデル (LLM)

説明 大量の文章データを学習し、人間のように文章を生成したり質問に答えたりできる AI モデル。ChatGPT はその代表例であり、本研究では抽象的な分子記述子を分かりやすい言葉に変換する補助に活用した。

【謝辞】

本研究は JST ACT-X (JPMJAX22AF)、JST 科学技術イノベーション創出に向けた大学フェローシップ創設事業 (JPMJFS2132)、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム (JPMJSP2136)、九州大学工学研究院工学研究新分野開拓助成、JSPS 科研費 (JP23H02027)、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (JPMXP1122714694)、東京都立大学若手研究者等選抜型研究支援、九州大学ロバート・ファン／アントレプレナーシップ・センター (QREC) アカデミックチャレンジ 2021 の助成を受けたものです。

【論文情報】

掲載誌：Journal of Materials Chemistry A

タイトル：Orchestrating Explainable AI, ChatGPT, and Human Expertise: A Framework for Extracting Polymer Design Guidelines

著者名：Phua, Yin Kan; Terasoba, Nana; Tanaka, Manabu; Fujigaya, Tsuyohiko; Kato, Koichiro

DOI：10.1039/D5TA06120B

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学 大学院工学研究院応用化学部門 教授 加藤 幸一郎 (カトウ コウイチロウ)

TEL：092-802-2816 FAX：092-802-2842

Mail：kato.koichiro.957@m.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp