

【蓄電池・エネルギーシステム分野】

仮訳

野心的な未来像に向けてバッテリー研究を AI で強化（米国）

大規模言語モデルの莫大な可能性を活用

著者: Michael Matz

2026 年 6 月 2 日

アルゴンヌ国立研究所の研究者らが、バッテリー研究における大規模言語モデル活用に向けた包括的な技術ロードマップを策定

米国のエネルギーシステムの安全性と費用対効果を向上させる上で、[バッテリー](#)が中心的な役割を果たすと科学者らは考えている。しかし、その実現には、高性能なバッテリー材料の設計や、その劣化メカニズムの解明等の数多くの技術的課題を解決する必要がある。これは容易なことではない。

[人工知能\(AI\)](#)は、こうした課題の克服に役立つのだろうか？ 米国エネルギー省(DOE)傘下のアルゴンヌ国立研究所(ANL)の研究チームは、[大規模言語モデル\(LLMs\)](#)と呼ばれる AI ツールの活用を通じてバッテリー技術の飛躍的進展を加速させるための、野心的な技術ロードマップを策定した。

ANL では、AI の力で米国の科学とイノベーションを変革し、国家の技術的リーダーシップと国際競争力を強化しようとする歴史的な国家プロジェクトである **Genesis Mission** の一環として、研究活動における AI の推進を実施している。

「ANL には、バッテリー研究の第一人者とデータサイエンティストが同じ屋根の下で活動するという、たぐいまれな環境があります」と、ANL の特別荣誉研究員であり、バッテリー技術開発グループを率いる Khalil Amine 氏は言う。「彼らは、協力してバッテリー分野における LLM の新たな活用事例に関する包括的な[レビュー](#)を実施しました。そこでは、バッテリー研究に革命をもたらす LLMs の大きな可能性を活かすための、短期・長期的な目標が提示されています」。

“近い将来、多くのバッテリー科学者らが AI の専門家も兼ねるようになり、LLMs が彼らの賢い研究アシスタントとして機能するようになるでしょう。科学者らが論文を読んだり、データを精査したり、実験を行ったりする時間は大幅に短縮されるはずです。そうすると、多くの時間をアイデアの創出や戦略的な研究計画の策定に割けるようになるでしょう”
— Wenhua Zuo ANL 博士研究員

LLM エージェントと自律型実験室

LLMs は、大規模かつ多様なデータセットで学習させることで幅広いタスクを実行することができる、驚くほど多用途な機械学習ツールである。例えば、人間からのプロンプトに応じて、質問への回答、記事の執筆や要約、言語の翻訳等を行うことができる。OpenAI の ChatGPT や Google の Gemini といった LLMs は、産業界のあり方を既に大きく変えている。

学术界、産業界や研究機関での LLMs 利用は拡大しているが、バッテリー研究ではそのポテンシャルがまだ十分に活用されていない。ANL によるレビューでは、LLM 活用のポテンシャルについて論じ、その利用拡大や有効性向上の方法を探っている。

具体的な活用例をいくつか挙げると、LLMs は数百から数百万件に及ぶバッテリー研究論文をテキストマイニングし、重要な知見の抽出、知識の未解明領域の特定、そして新たな研究の方向性の提案を実行することができる。また、バッテリー性能のデータセットを分析して、故障メカニズムやその対策を特定することも可能である。さらには、現場でのバッテリー稼働状況の監視・最適化や、若手バッテリー研究者への個別化されたトレーニングの提供といった役割も担うことも可能である。

ANL のレビューでは、複数の LLM 「エージェント」間の活動を連携させるという展望も示されている。これらの高度な AI システムは、LLMs を活用した情報の分析、意思決定とツールの利用を実行する。バッテリー研究の各専門分野に特化したエージェントが共通の目標達成に向けて連携しながら、多岐にわたる研究タスクを遂行する。

「LLMs は、シミュレーションソフトウェアや材料物性データベースといった既存のバッテリー研究ツールとの統合が可能です」と、本レビューの責任著者であり、ANL の化学者でもある Guiliang Xu 氏は言う。「これにより、科学者らは AI 主導の自律型実験室を構築し、自動化を通じて研究プロセスを加速させることができます」。

自律型実験室は、新しいバッテリー材料の発見に大きな影響を与える可能性がある。従来、この種の研究は試行錯誤によって行われてきた。科学者らは、材料や合成パラメータを一つずつ手作業で試験していたのである。

自律型実験室は、実験の反復サイクルを継続的に実行することで、このプロセスの高速化を可能にする。科学文献の調査や材料物性データベースのスクリーニングを行い、新たに有望なバッテリー化学組成を提案できる。それからロボット装置に指示を出して材料の作製と特性評価を実行させる。そして得られた実験データを分析し、その結果をもとに仮説、手法および実験内容を改良して行く。

その利点は、速度や効率の向上に止まらない。研究活動の自動化は、エラーの低減や実験の再現性向上にも貢献する。

このような AI システムの効果的な導入には、バッテリー研究者らと LLM 専門家らの間での広範な連携が不可欠となる。

「バッテリー研究者らは LLM 専門家らに対して最も重要な研究課題を打ち上げ、一方で LLM 専門家らは、それらの課題に取り組むために最適なモデルや手法についてバッテリー研究者らに助言することができるのです」と Xu 氏は説明する。

知識ベース、データ共有と適応性

ANL のレビューでは、LLMs のポテンシャルを最大限に引き出すために解決すべき技術的課題についても指摘している。既存の LLMs を選定する場合であれ、新たに LLMs を開発する場合であれ、計算効率と特定のバッテリー研究タスクへの適応性を慎重に検討する必要がある。バッテリーの故障予測のような重要なアプリケーションでは、結論に至るまでの推論プロセスを段階的に説明できる LLMs を使用することが重要である。LLM エージェント間の効果的な連携に向けた、プロトコルの策定が必須となる。

LLMs の学習には、高品質な知識ベースが必要となる。これは、既存の公開済み文献や、多様なバッテリー関連のデータセットから構築されることになる。データセット形式の標準化には多大な作業が必要となり、産業界と研究コミュニティの間でのデータセット共有のためのコンソーシアムの設立が求められる。

「従来、研究者らは成功した結果のデータのみを公表していました」と、本レビューの著者の一人であり、DOE 科学局(SC)のユーザー施設である [Argonne Leadership Computing Facility \(ALCF\)](#) の計算機科学者、Huihuo Zheng 氏は言う。「LLMs が最適に機能するためには、実験成績が振るわなかったバッテリー材料等の失敗データでも学習する必要があります。産業界と学术界は、こうしたデータに容易にアクセスできる新しい仕組みを導入する必要があります」。

バッテリー科学者らやデータ科学者らは、LLMs の機能、遂行能力と使いやすさを定期的に評価し、必要に応じて改善を行う必要がある。これには、LLMs のデータ解釈能力の試験や、新たに公開された文献を用いた再学習といった作業が含まれるだろう。

こうした課題が対処された場合、将来のバッテリー研究はどのような姿になっているのだろうか？

「近い将来、多くのバッテリー科学者らが AI の専門家も兼ねるようになり、LLMs が彼らの賢い研究アシスタントとして機能するようになるでしょう」と、本レビューの著者の一人であり、ANL の博士研究員である Wenhua Zuo 氏は言う。「科学者らが論文を読んだり、データを精査したり、実験を行ったりする時間は大幅に短縮されるはずです。そうすると、多くの時間をアイデアの創出や戦略的な研究計画の策定に割けるようになるでしょう」。

本[レビュー](#)は、2025 年 8 月 20 日発行の Joule に掲載されている。

本レビューの作成には、ANL の Tanjin He 氏、Venkatram Vishwanath 氏、Maria Chan 氏、Rick Stevens 氏も貢献した。

本レビューは、Low-cost Earth-abundant Na-ion Storage Consortium を含む Advanced Battery Materials Research Program を通じ、DOE の Transportation Technologies Office が支援した。本レビューには ALCF のリソースが活用され、DOE 科学局(SC)の Advanced Scientific Computing Research Program の支援を受けた研究をベースとしている。

本レビューの作成には、DOE SC の基礎エネルギー科学(BES)が資金を提供する Energy Innovation Hub の Energy Storage Research Alliance が一部資金を提供した。DOE SC のユーザー施設である Center for Nanoscale Materials にて実施された作業についても、BES の支援を受けている。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、アルゴンヌ国立研究所の記事“Turbo-charging battery research with AI: An ambitious vision” (<https://www.anl.gov/article/turbocharging-battery-research-with-ai-an-ambitious-vision>) を翻訳したものである。