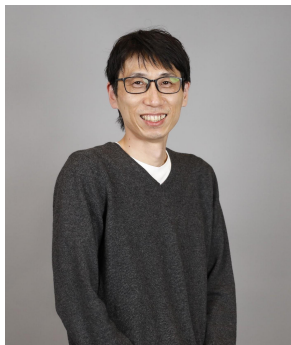


# 汎用原子レベルシミュレータ『Matlantis™』が もたらす素材・材料開発の未来

- AI駆動超高速計算が材料開発の世界を変える



- 登壇者紹介及び会社紹介
- 汎用原子レベルシミュレータ：Matlantis™
- 石油化学産業における計算事例
- ユーザーの導入事例と材料研究の変化
- 材料開発の未来と世界への普及
- まとめ



## 川口 順央（かわぐち まさてる）

プロダクトマネージャー

### 職歴

製造業でソフトウェアエンジニアとして10年以上プロダクト開発に従事

2014年 スタートアップにて開発責任者としてプロダクト開発をリード

2018年7月 Preferred Networksに入社

2020年5月 Matlantisの開発に従事。その後、Matlantisのプロダクトマネージャーを務める

2023年12月よりPreferred Computational Chemistryに出向

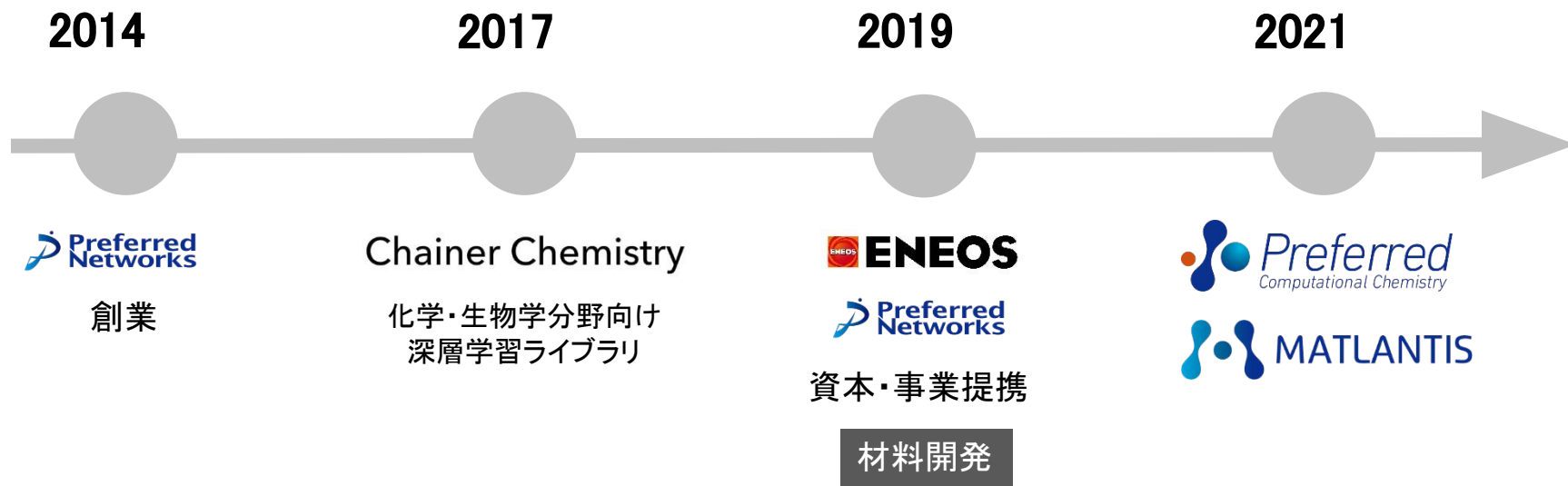


会社名	株式会社Preferred Computational Chemistry (PFCC)
設立	2021年6月1日
所在地	東京都千代田区大手町1-6-1大手町ビル
代表者	代表取締役社長 岡野原 大輔
事業内容	汎用原子レベルシミュレーションクラウドサービス “Matlantis”の販売、サポート

# PFNとENEOSの共創により生まれた



# PFCCの成り立ち





新素材開発や材料探索を高速化する汎用原子レベルシミュレータ

革新的なマテリアルの創出に貢献し、  
持続可能な世界を実現する

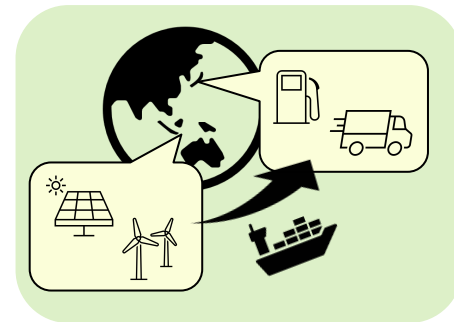


# 汎用原子レベルシミュレータ 「Matlantis」

# 新材料の発見が持続可能な社会の実現のカギ

材料探索は持続可能な社会の実現に向けた一つの鍵となっている

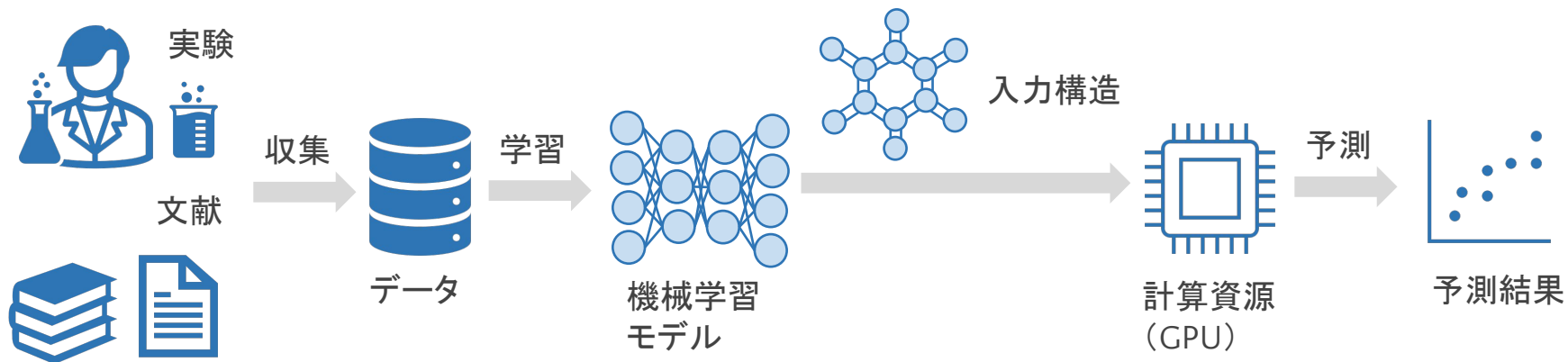
- 再生可能エネルギーを水素等で貯蔵する際の効率的な触媒開発
- 既存バッテリーの改良、新規バッテリーの開発
- 環境負荷の大きい材料の置き換え
- 希少な資源(レアアースなど)の置き換え
- リサイクル可能な材料への置き換え
- 製造プロセスの省エネルギー化
- 製造時の温室効果ガスの排出を抑える(CO2キャプチャー)
- 新エネルギー(核融合など)実現するための材料(超電導など)



# 材料開発には時間とコストがかかる

- ひとつひとつの実験に時間とコストがかかる
- 候補は無限といってもいいほど多い
  - 複数材料の組み合わせ、材料の組成、合成・反応条件
  - 熟練の実験科学者の経験と勘に頼りっぱなし
- シミュレーションの用途は事後の現象解明など限定的
  - 精度が低い、モデルの条件設定が難しい
  - 計算時間がかかり、適用できる対象が限られる

# 広がるMI(マテリアルズ・インフォマティクス)の取り組み



米国

2011年 Materials Genome Initiative (MGI) 立上げ  
低コスト・高速の材料開発を目指す

世界のMI取り組みの動き

中国

2015年 中国科学院・中国工学院が  
連携して中国版 MGIIに着手

欧州

2015年 Novel Material Discovery Laboratory (NOMAD) 設立

日本

2014年ごろから国家プロジェクト増加  
(内閣府、文科省、経産省)

# データをもとに予測するMIの課題

- 十分な量のデータが得られない
  - 自社の実験結果だけでは足りない
  - データ形式がバラバラで統一的に扱えるものが少ない
  - 紙ベースなどで保存されていて活用できない
- 学習データに含まれない材料について予測するのが難しい
  - そもそも外挿が難しい
  - 外挿に強いモデルを作るには何らかのドメイン知識をモデルを作る必要があるが、機械学習や深層学習でどうやるのかわからない
- データサイエンスの知識・人材が不足している
  - 性能の良いモデルを作れない
  - 分野違いだし、教育するにも時間かかる

今すぐ使える、あらゆる材料の物性を  
予測できるAIはないのか？



# MATLANTIS

革新的なマテリアルの創出に貢献し、持続可能な世界を実現するために「Matlantis™」は生まれました。

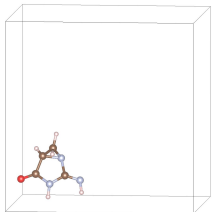


# MatlantisのAI “PFP”

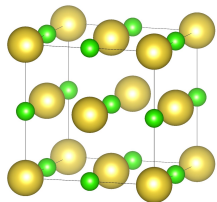


様々な分子・結晶構造の第一原理計算した結果を学習したニューラルネットワーク

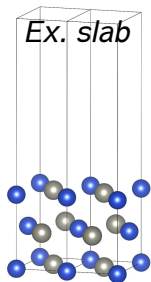
*Ex. molecule*



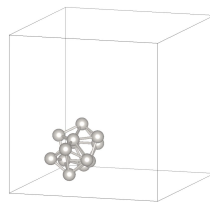
*Ex. crystal*



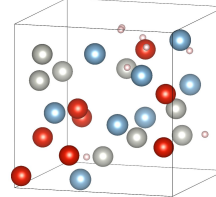
*Ex. slab*



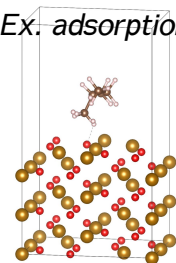
*Ex. cluster*



*Ex. disordered*

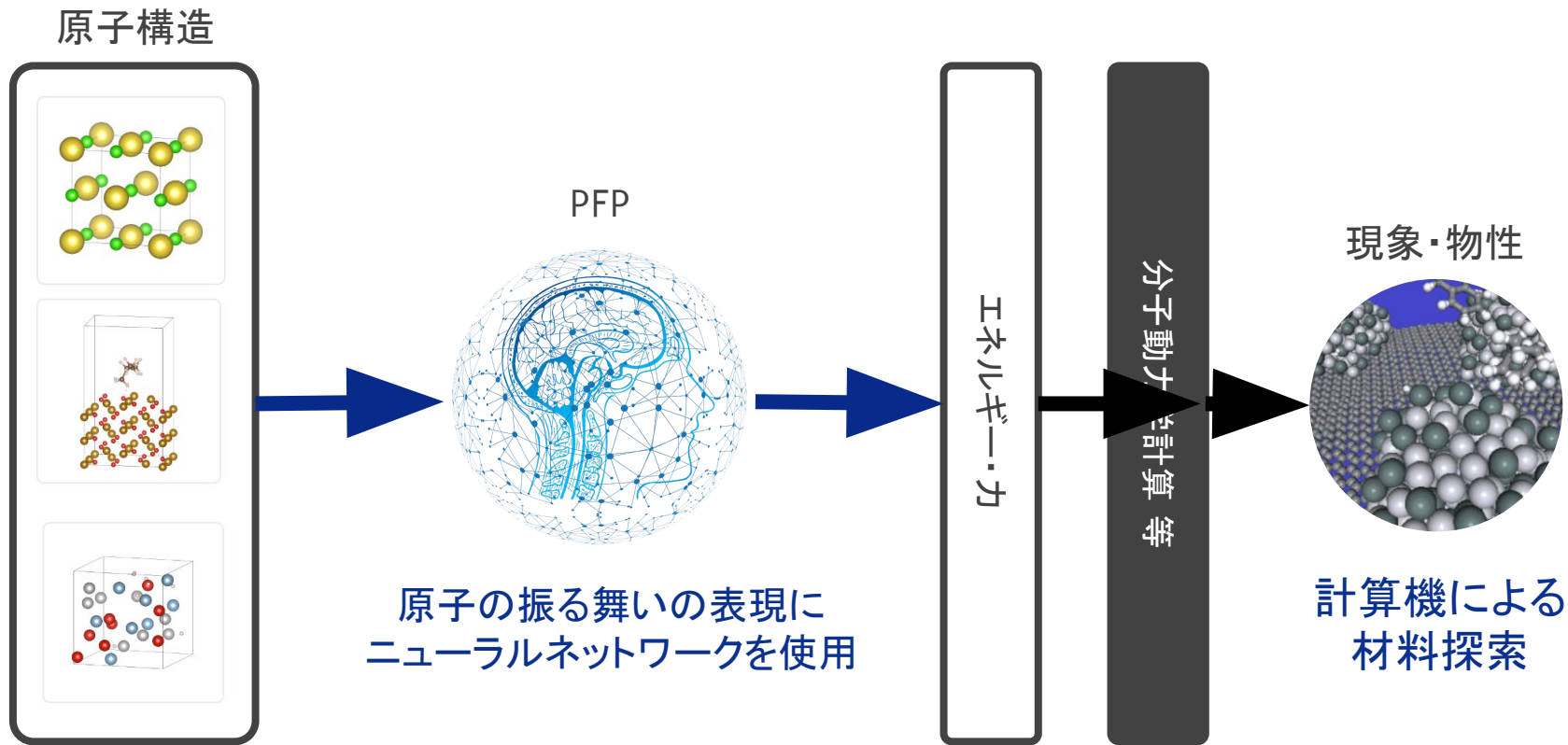


*Ex. adsorption*





# エネルギー・力から物性を計算する



# あらゆる材料へ適用可能な汎用性

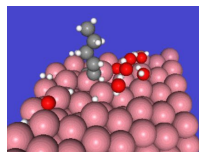
1 H Hydrogen (1.008)																	2 He Helium (4.0026)									
3 Li Lithium (6.94)	4 Be Beryllium (9.0122)											5 B Boron (10.81)	6 C Carbon (12.01)	7 N Nitrogen (14.01)	8 O Oxygen (16.00)	9 F Fluorine (18.998)	10 Ne Neon (20.18)									
11 Na Sodium (22.99)	12 Mg Magnesium (24.31)											13 Al Aluminum (26.98)	14 Si Silicon (28.09)	15 P Phosphorus (30.97)	16 S Sulfur (32.06)	17 Cl Chlorine (35.45)	18 Ar Argon (39.95)									
19 K Potassium (39.10)	20 Ca Calcium (40.08)	21 Sc Scandium (44.96)	22 Ti Titanium (47.88)	23 V Vanadium (50.94)	24 Cr Chromium (52.00)	25 Mn Manganese (54.94)	26 Fe Iron (55.85)	27 Co Cobalt (58.93)	28 Ni Nickel (58.69)	29 Cu Copper (63.55)	30 Zn Zinc (65.38)	31 Ga Gallium (69.72)	32 Ge Germanium (72.64)	33 As Arsenic (74.92)	34 Se Selenium (78.96)	35 Br Bromine (79.90)	36 Kr Krypton (83.80)									
37 Rb Rubidium (85.47)	38 Sr Strontium (87.62)	39 Y Yttrium (88.91)	40 Zr Zirconium (91.22)	41 Nb Niobium (92.91)	42 Mo Molybdenum (95.94)	43 Tc Technetium (98.91)	44 Ru Ruthenium (101.07)	45 Rh Rhodium (102.91)	46 Pd Palladium (106.37)	47 Ag Silver (107.87)	48 Cd Cadmium (112.41)	49 In Indium (114.82)	50 Sn Tin (118.71)	51 Sb Antimony (121.76)	52 Te Tellurium (127.60)	53 I Iodine (126.91)	54 Xe Xenon (131.29)									
55 Cs Cesium (132.91)	56 Ba Barium (137.33)											72 Hf Hafnium (178.49)	73 Ta Tantalum (180.95)	74 W Tungsten (183.85)	75 Re Rhenium (186.21)	76 Os Osmium (190.23)	77 Ir Iridium (192.22)	78 Pt Platinum (195.08)	79 Au Gold (196.97)	80 Hg Mercury (200.59)	81 Tl Thallium (204.38)	82 Pb Lead (207.2)	83 Bi Bismuth (208.98)	84 Po Polonium (209)	85 At Astatine (210)	86 Rn Radon (222)
87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)											104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 Ds Darmstadtium (267)	111 Rg Roentgenium (268)	112 Cn Copernicium (269)	113 Nh Nihonium (270)	114 Fl Flerovium (271)	115 Mc Moscovium (272)	116 Lv Livermorium (273)	117 Ts Tennessine (274)	118 Og Oganesson (284)

72 元素の組み合わせに対応

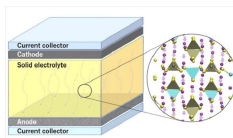
幅広い適用分野

57 La Lanthanum (138.91)	58 Ce Cerium (140.12)	59 Pr Praseodymium (140.91)	60 Nd Neodymium (144.24)	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium (150.36)	63 Eu Europium (151.96)	64 Gd Gadolinium (157.25)	65 Tb Terbium (158.93)	66 Dy Dysprosium (162.50)	67 Ho Holmium (164.93)	68 Er Erbium (167.26)	69 Tm Thulium (168.93)	70 Yb Ytterbium (173.05)	71 Lu Lutetium (174.97)
89 Ac Actinium (227)	90 Th Thorium (232.04)	91 Pa Protactinium (231.04)	92 U Uranium (238.03)	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Californium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (260)

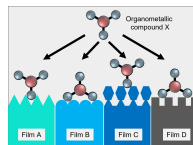
Supported element      Partially supported element      Unsupported element



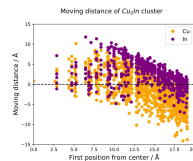
触媒



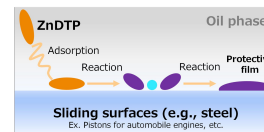
電池



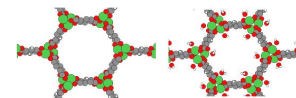
半導体



合金



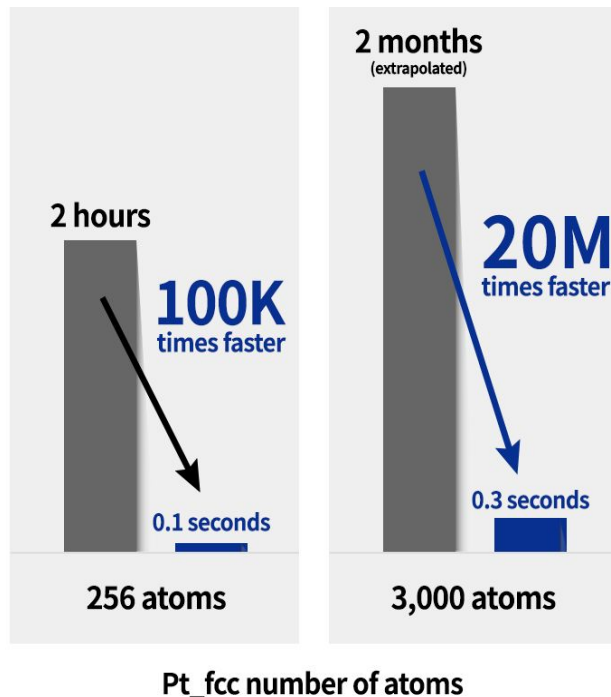
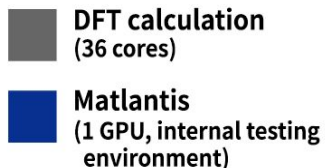
潤滑油



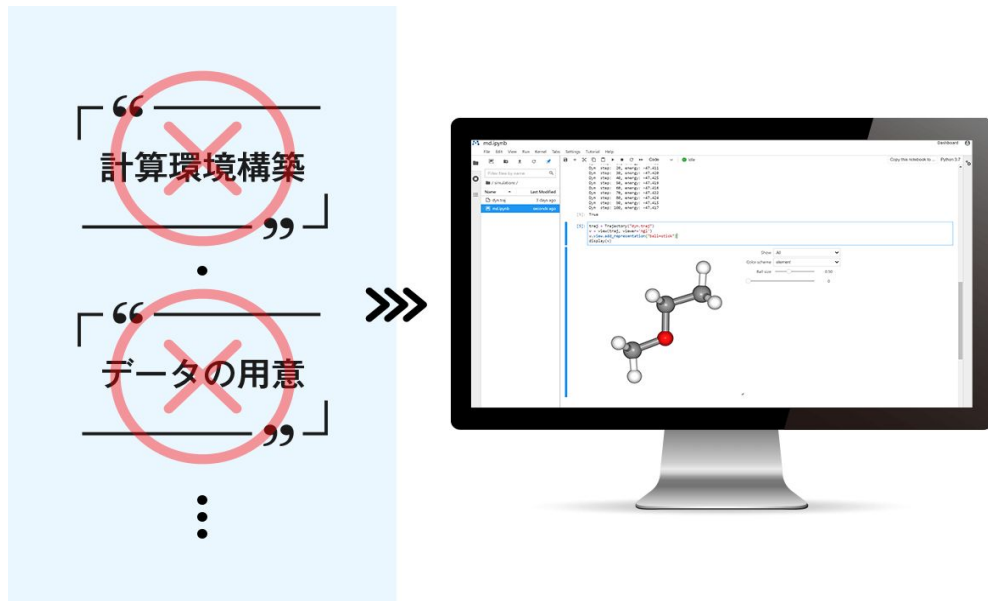
吸着材

# 圧倒的に高速

## Calculation time



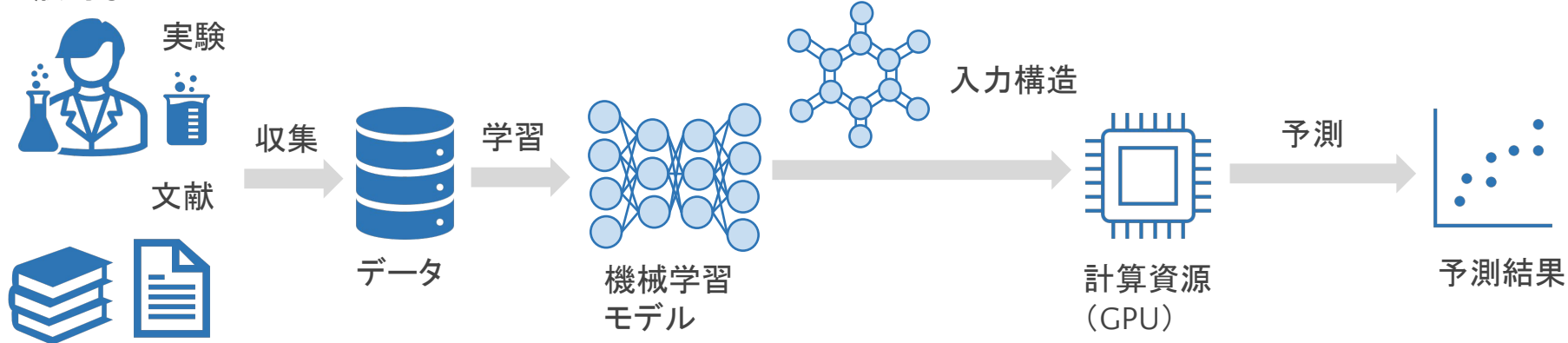
DFT (Density Functional Theory: 密度汎関数法) では、高性能なコンピュータを用いて数時間～数カ月かかった原子レベルの物理シミュレーションを、数秒単位で行うことができます。



サービス申し込み後、すぐにシミュレーションが可能です  
データ収集・学習・計算資源の準備、すべて不要です

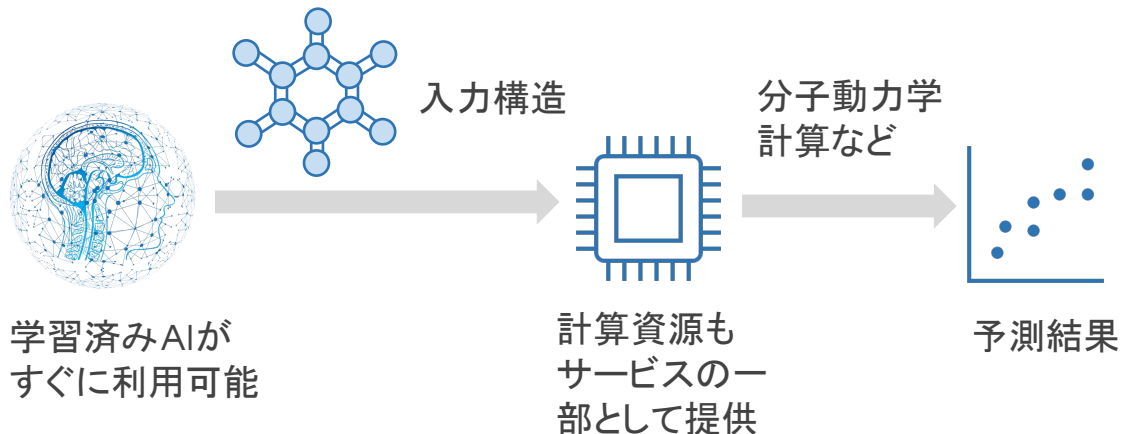
# 一般的なMIとMatlantisの違い

## 一般的なMI



## Matlantis

- データ収集・学習が不要
- 計算資源も準備不要
- すぐに利用可能



# Matlantisの特長まとめ

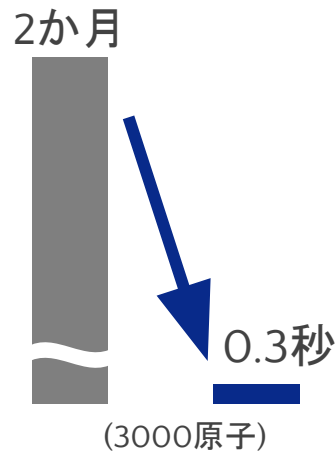
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Supported element   Partially supported element   Unsupported element

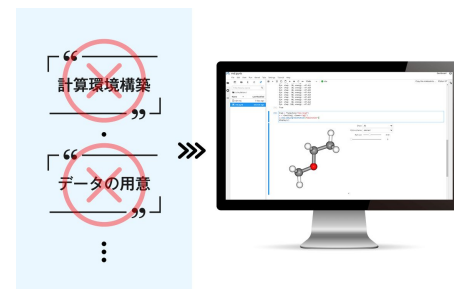
72元素の  
組み合わせに  
対応



触媒、電池、潤滑油な  
ど多様な開発に  
利用可能



従来と同程度の精度で  
10万～2,000万倍  
の計算速度



ブラウザ上で  
すぐに利用可能

# 石油化学産業における計算事例

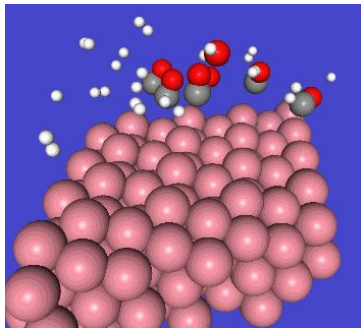
# 触媒の事例：再エネ合成燃料触媒探索

第一原理計算で20年かかる計算実験を、Matlantisでは1週間で完了

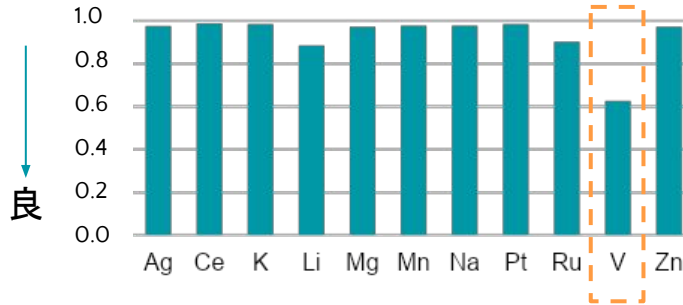
再エネ合成燃料触媒では水素( $H_2$ )と一酸化炭素(CO)から液体燃料(C5+)を生成するために炭素の連鎖成長確率の向上が必要で、これにはCO解離反応の反応障壁( $E_{act}$ )を下げるのが有効であることが知られている。

その反応障壁を下げる触媒を設計することを目的に、Co触媒をベースに様々な金属組成の触媒を設計し、その全て(300種類)についてMatlantis PFPを使って反応障壁計算を実施。

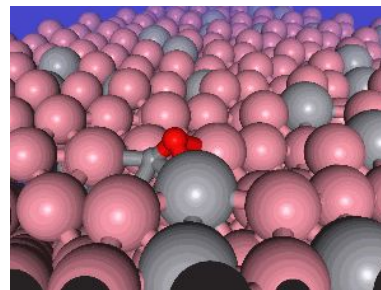
Co金属触媒上での $H_2$ とCOから液体燃料を合成する反応イメージ



Co触媒の一部元素置換による活性化エネルギー相対変化



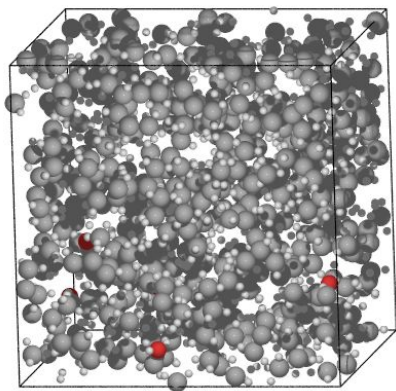
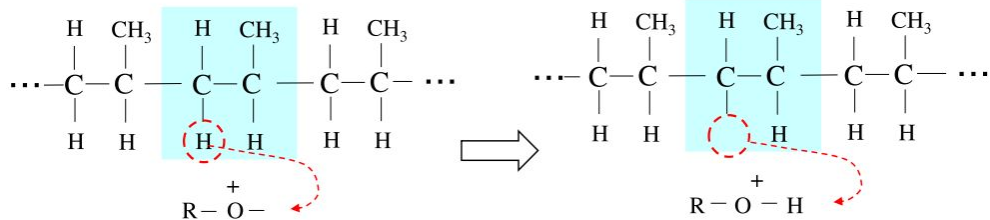
Co+V触媒上でのC-O解離反応





# 高分子の事例：ポリプロピレンの化学反応シミュレーション

従来手法の古典MDでは難しい $C_2H_5O$ によるポリプロピレンの水素引き抜き反応



## 計算条件

PP分子: 560原子のPP鎖 3本

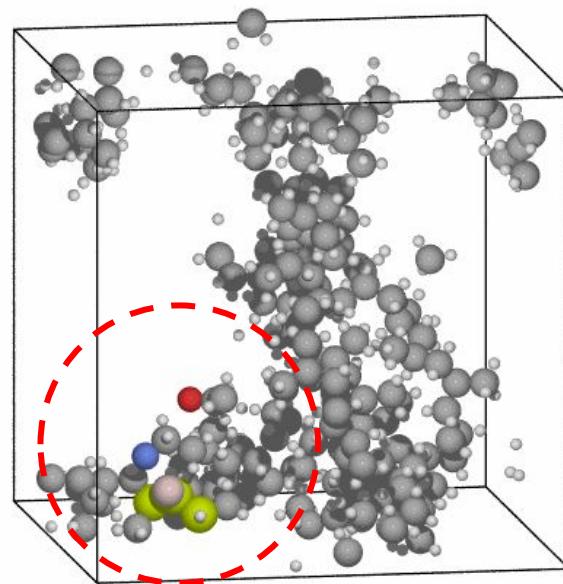
反応種:  $CH_3CH_2O$  (ラジカル) 5分子

原子数: **1720**

密度:  $0.9 \text{ g/cm}^3$

温度: 400 K

計算時間: **1.5時間**



## 水素の引き抜き反応を可視化

反応箇所を色で表示: H(桃色)、C(緑)、  
O(青, 赤)

# トライボロジーの事例：潤滑油添加剤の作用機構

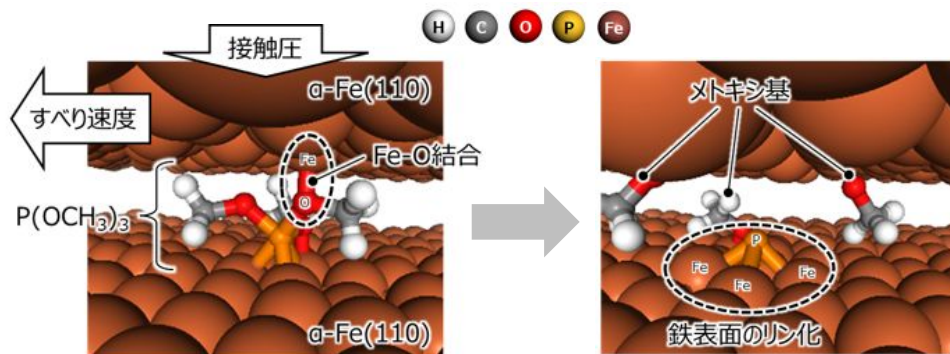
第一原理分子動力学(従来手法)で**年以上**かかる計算がMatlantisを用いて**半日**で完了

## 背景

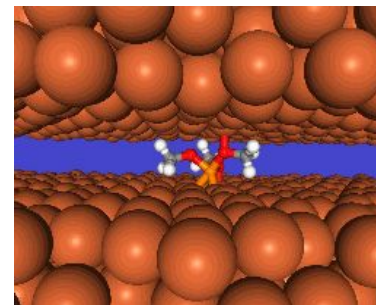
- 潤滑油は機械装置の省エネに不可欠
- 摺動部の摩擦・摩耗を抑える添加剤トリメチルフォスファイト $\text{P}(\text{OCH}_3)_3$ の作用機構解明

## 実施内容

- $\text{P}(\text{OCH}_3)_3$ 作用機構解明には、摩擦場における化学反応(トライボケミカル反応)を扱う
- 添加剤と鉄表面の反応による潤滑油膜(リン化鉄)生成を再現



鉄表面におけるトリメチルフォスファイトのトライボケミカル反応



MDシミュレーション結果

# ユーザーの導入事例と材料研究の変化

# Matlantisで変わる研究プロセス

従来手法  
(DFT)



- 計算時間が膨大
- 計算負荷を下げるために計算内容を単純化
- 計算結果が出るのは実験終了後

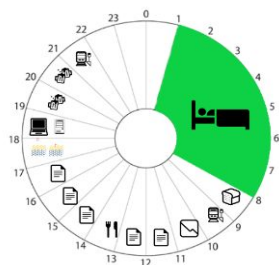
Matlantis



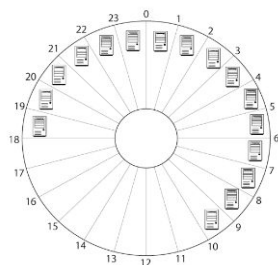
- 圧倒的な速さ
- 実験と同様の条件のもとで計算
- Matlantis駆動型アプローチによる材料開発の加速

# 研究者の時間の使い方も変わる

研究者の時間



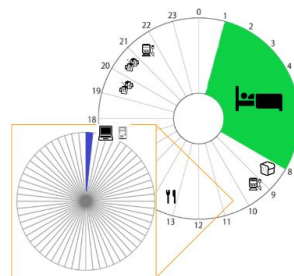
計算機の時間



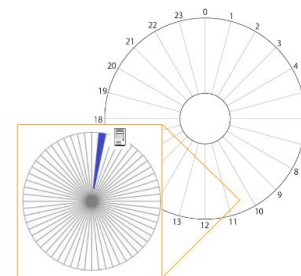
Matlantis  
導入後



研究者の時間



計算機の時間



一回の計算が長いので、失敗しないように

- 実験科学者から勘所を学ぶ
- じっくり論文を読む
- 空いた時間で計算機のメンテを行う

高速に計算できるので、

- とりあえず計算を回して実験科学者に結果を見せる
- 1週間分の計算を自動化して、論文を読む時間を確保
- 計算機のメンテに時間を使う必要なし



20年近く計算化学の世界にいるが、触った感じは圧倒的に汎用性が高い。  
数カ月かかっていた計算が1秒もかからないで終わる。  
わくわくする以外の要素がない

古山教授(信州大)プレスリリースより<https://pc.watch.impress.co.jp/docs/news/1336421.html>

# 材料開発の未来と世界への普及

# Matlantisが計算の利用を広げていく

- 計算を圧倒的に高速化したことで、材料開発においてシミュレーションの利用が広がるだろう
- 高い汎用性をもつMatlantisを使えば、あらゆる材料のエネルギーを調べることができる

Matlantisは材料という広大な世界の地図  
地図をもって材料探索の冒険に出かけよう



さて、どこに向かおうか？





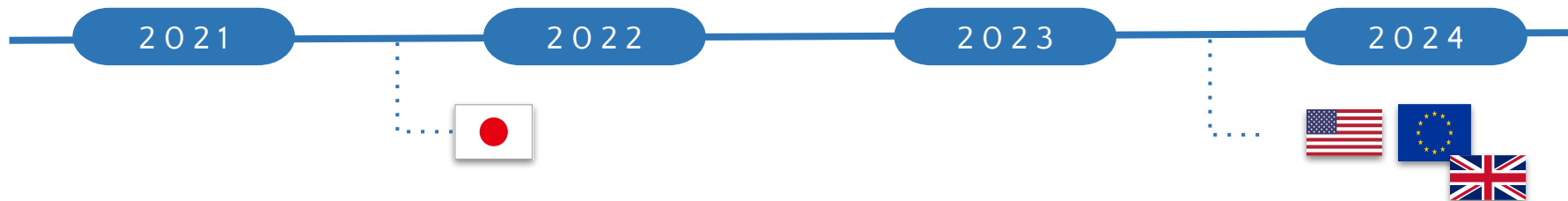
# Matlantisの普及状況

## 普及状況 (2024年1月時点)

- 国内外で80以上の大学・企業が利用
- ユーザーライセンス数 500
- 産業: アカデミア, 化学, 電気電子, 鉱業, ゴム, セラミックス, 自動車, 非鉄金属, 石油

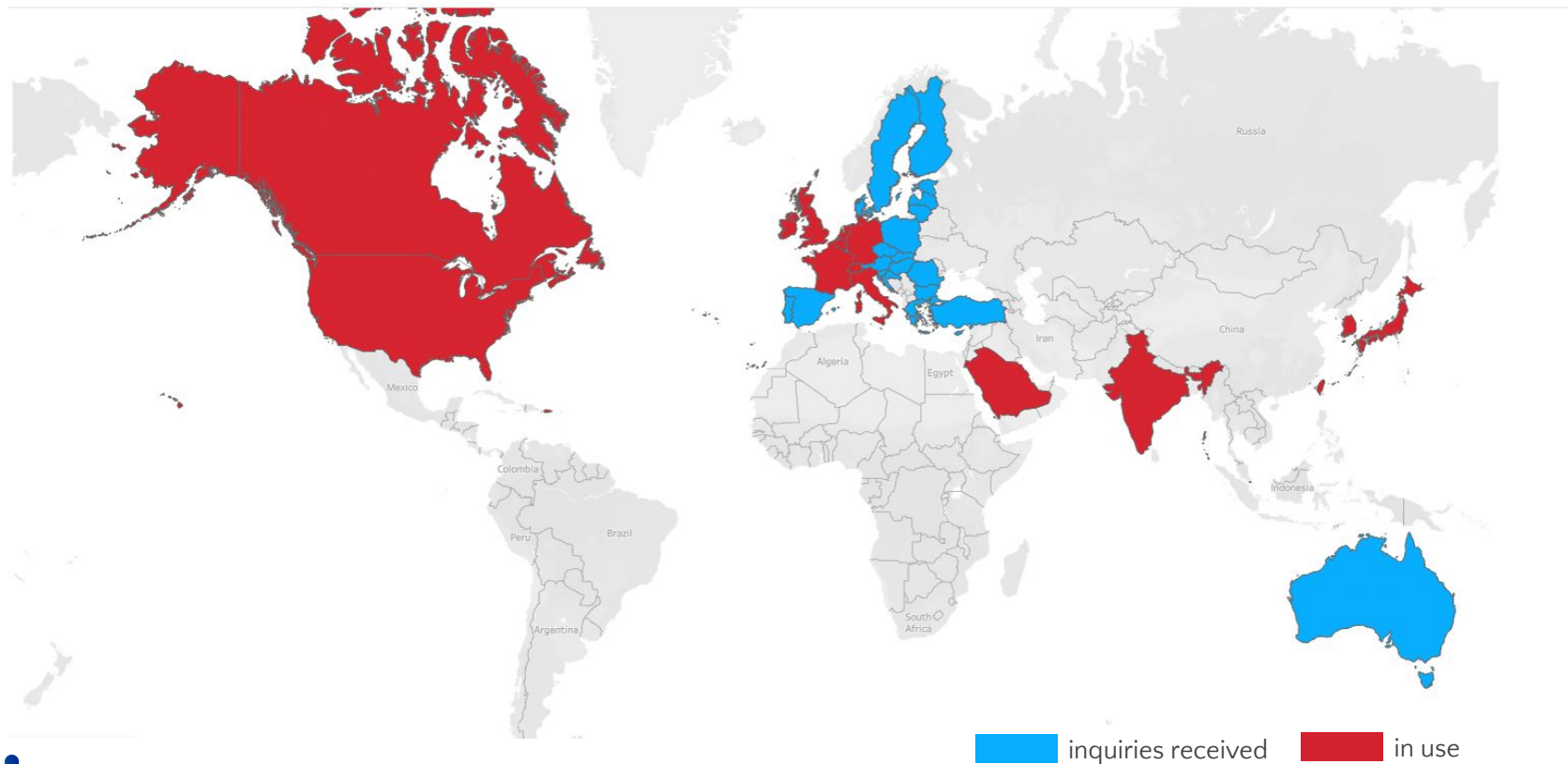
## 海外展開

- 2023年5月より米国サーバを設置、サービス展開
- 2023年12月より欧州にサーバを設置、サービス展開



# 世界への普及状況

Matalantisについて世界中から問合せを受けており、世界各地で利用され始めています。



# まとめ

# まとめ

- Matlantisは新素材開発や材料探索を高速化する汎用原子レベルシミュレータ
- 広い汎用性と高精度を両立しており、石油化学産業をはじめ幅広くお使いいただけます
- 導入済みのお客様の研究活動にすでに変化を引き起こしています
- 今後も革新を起こす技術開発に挑戦していきます。より創造的な材料研究の未来をいっしょに作っていきましょう



“革新的なマテリアルの創出に貢献し、持続可能な世界を実現する”



Official website

<https://matlantis.com/ja>



YouTube channel

<https://www.youtube.com/c/Matlantis>



X (Twitter) account

[https://twitter.com/matlantis\\_pfcc](https://twitter.com/matlantis_pfcc)

