【nano tech 特別シンポジウム】MIはナノ材料開発をどう変化させたのか - 現状の課題と今後の展望-

# 汎用原子レベルシミュレータMatlantis
# 計算材料科学のMI活用と課題

Preferred Computational Chemistry
シニアマネージャー　名児耶 彰洋

・2024 2/1（木）15:00-15:40
・メインシアター (東4ホール)

# 自己紹介

Preferred Computational Chemistry (PFCC)
技術営業部 シニアマネージャー
名児耶彰洋 / Akihiro Nagoya

**プロフィール**

- 大阪大学大学院 基礎工学研究科 修士課程 修了 (2007)
- 株式会社豊田中央研究所 (2007)
  - 第一原理計算：太陽電池材料、半導体材料、燃料電池触媒、グラフェン材料
  - 高分子の古典MD、MI
- ENEOS株式会社 (2022)
  - Matlantis関連業務
- Preferred Computational Chemistry (2023)

**興味・趣味**

- 材料に関わる現象、散歩、ランニング、子供と遊ぶこと

# アジェンダ

- PFCCのご紹介
- 汎用原子レベルシミュレータ「Matlantis」のご紹介
- Matlantis活用事例の紹介
  - Matlantisによる複雑現象解明と材料スクリーニング (ENEOS 小野寺様)
- 課題と展望
  1. 使いやすさ
  2. 海外展開
  3. 実験とのスケールの違い
- まとめ

# Preferred Computational Chemistry（PFCC） のご紹介

# 会社紹介

## 会社名

Preferred Computational Chemistry

## 設立背景

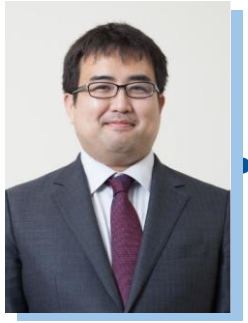
Preferred Networks

*Japan’s AI technology leader.*

ENEOS

*The largest petroleum company.*

## 基本情報



代表取締役社長　岡野原 大輔

(CEO)

**2023年7月 IDTechEX で9.4/10点の高評価*

- **ミッション**

*“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”*

- **サービス：Matlantis™**

汎用原子レベルシミュレーションのクラウドサービス

# 汎用原子レベルシミュレータ「Matlantis」のご紹介

# 材料科学におけるチャレンジ

1

**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

2

材料の研究開発対象となる未知の分子の数：$10^{60}$ 種類

- **実験** 合成・解析のハードルが高く網羅的な検討が困難
- **シミュレーション** 計算に時間がかかりすぎて非実用的
- **マテリアルズ・インフォマティクス** データ駆動型アプローチとして有望、”普遍性” に課題

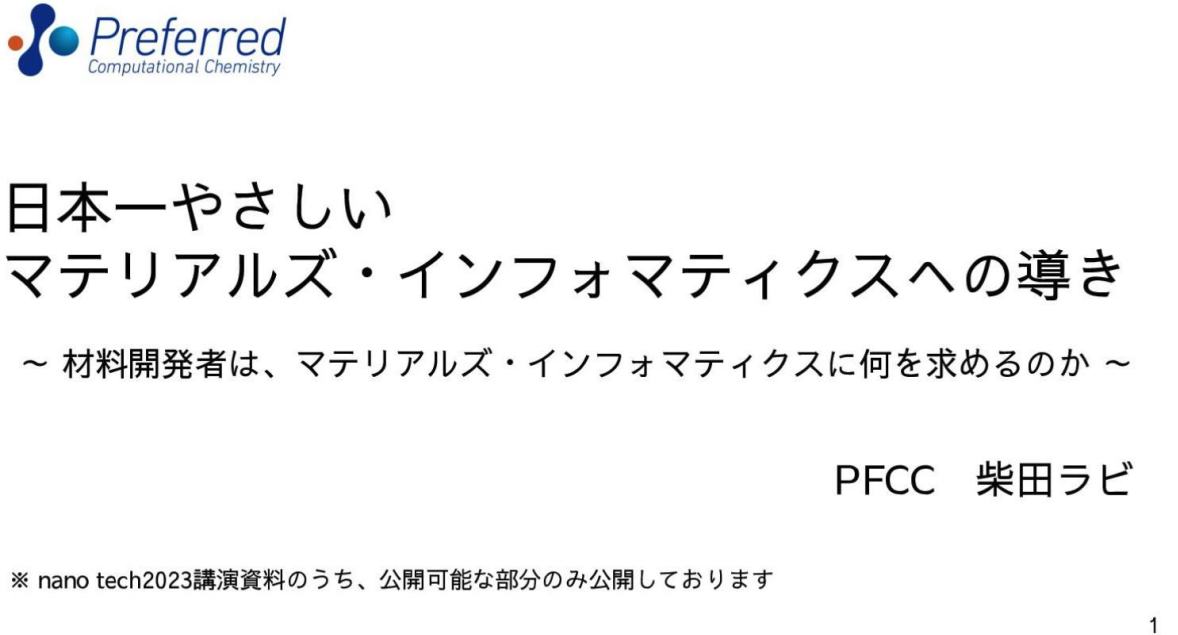
3

**シミュレーション × 深層学習**

MATLANTIS

# マテリアルズ・インフォマティクス

NanoTech 2023にて弊社 柴田が講演しました。Speaker Deckにて公開。




https://speakerdeck.com/matlantis/ri-ben-yasasii-materiaruzuinhuomateikusuhenodao-ki-chai-tian-nanotech2023

# Matlantis 開発の背景

## マテリアルズ・インフォマティクス（MI）

特徴 ① 材料開発にAIを用いて 膨大な候補物質から
有望材料を見出す技術。

特徴 ② 研究者の経験や勘に頼る 従来の手法を加速できる。

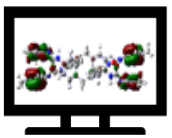
**従来** 開発に時間がかかる

**実験**

～10回/月

**シミュレータ**

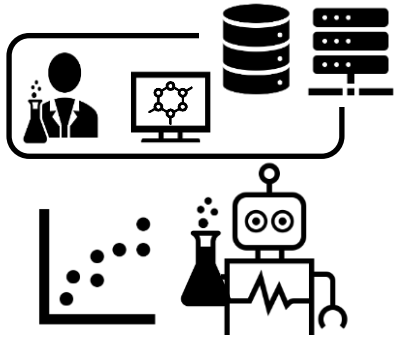
～10回/月



**MI活用**

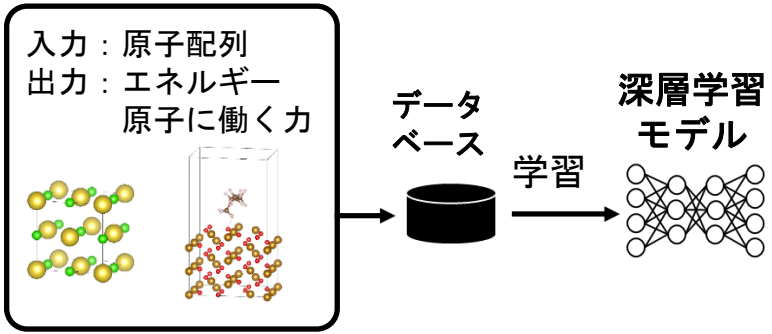
**実験・計算 → バーチャル実験**

数千回/月



**Matlantis**

**計算 → バーチャル実験 → 実験**



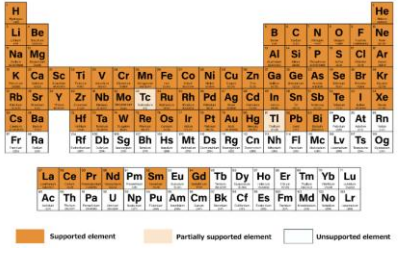

**原子配置から材料特性を予測する汎用シミュレータ**

# 製品の特長

## 2,000 years

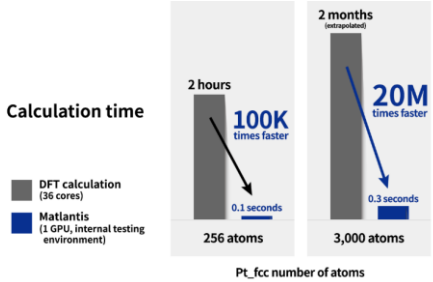
**1台のGPUで2,000 年分** のデータを学習
(2000万個のシミュレーションデータ)

## 72 elements

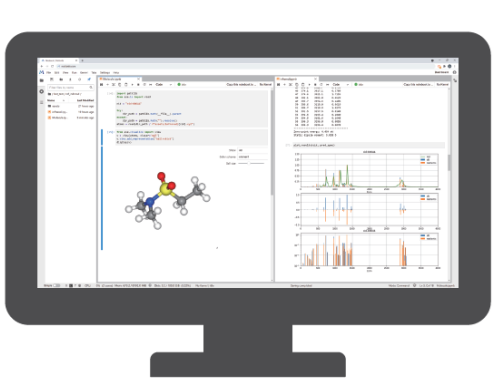



**72元素 (実用上ほぼ全ての元素)** に対応

## 20M times



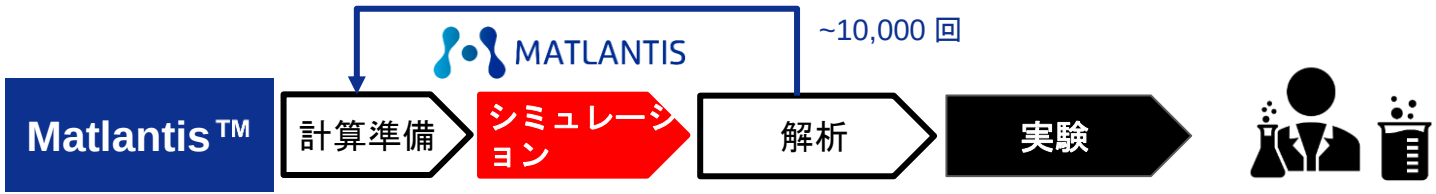

従来手法よりも**2000万倍の高速性**



学習済みのAIを提供：学習データの準備やAIの知識は不要
メンテナンスフリー：システム/ハードの専門家は不要

# Why Matlantis™?

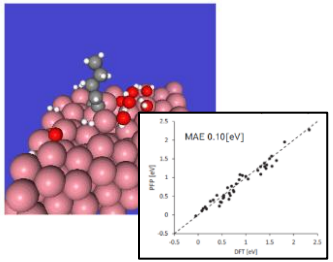
・計算時間が膨大
・計算負荷を下げるために計算内容を単純化
・計算結果が出るのは実験終了後




・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

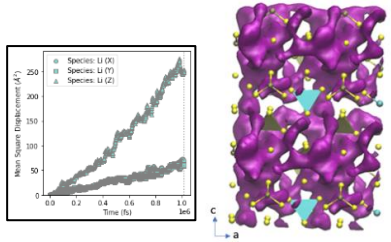
# Applications

## 触媒



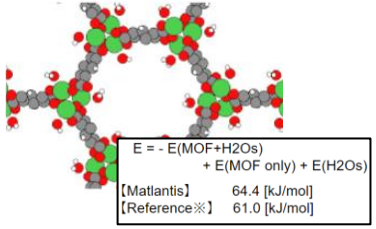

触媒組成の
大規模スクリーニング

## 電池



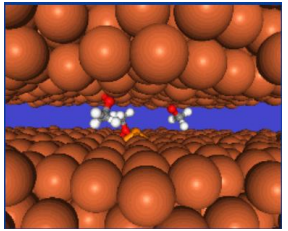
固体電解質中のLi拡散

## 吸着剤



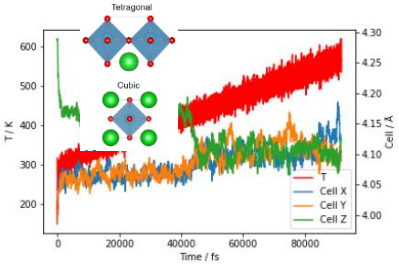

MOF中の分子吸着

## 潤滑剤



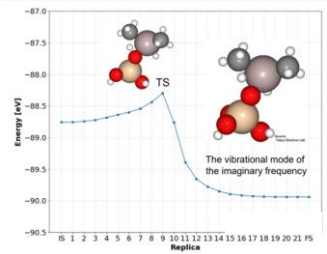
摩擦における化学反応

## セラミックス




BaTiO3の相変態

## 半導体




トリメチルアルミニウム
の反応解析

## 磁性材料

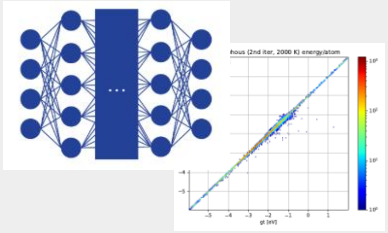
## 分離膜

## 金属・合金

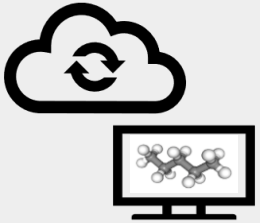
⋮

# Matlantisが提供するサービス

## コア技術：汎用性、高速性



汎用機械学習ポテンシャル
(汎用シミュレーションエンジン)



クラウド計算資源

## 運用サポート：使いやすさ

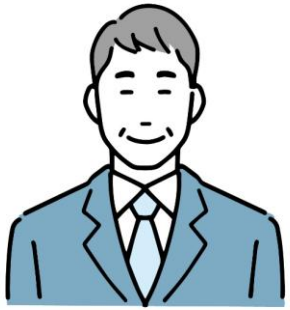
Jupyter Lab環境

ドキュメント
サンプルプログラム

カスタマーサポート

# Matlantis™ ユーザーの声：トヨタ自動車様

3ヶ月かかっていた計算が
**1 週間**に短縮



**年間１千万個**
の計算ができる

Pythonをベースとした
仕様は拡張性があり
**実験担当者も利用**

● 実際の動画
https://www.youtube.com/watch?v=vMwllr9v1x4

**−Paradigm shift−**
in materials development

**Breakthroughs**
**+** in new materials

MATLANTIS

# Research Transformation by Matlantis™

https://www.slideshare.net/Matlantis/matlantis30-rula05ce05o175xpfcc20221215

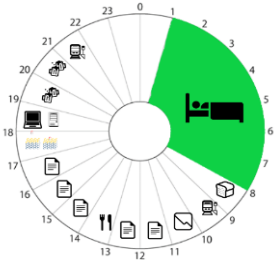
古山教授 (信州大)

*“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。”*

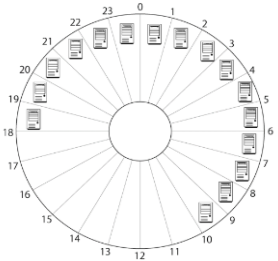
プレスリリースより抜粋

https://pc.watch.impress.co.jp/docs/news/1336421.html

研究者の時間



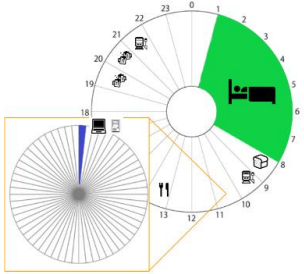
計算機の時間



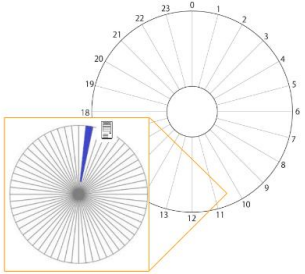
- 実験科学者から勘所を学ぶ
- じっくり論文を読む
- 空いた時間で計算機のメンテなども

Matlantis
導入

研究者の時間



計算機の時間

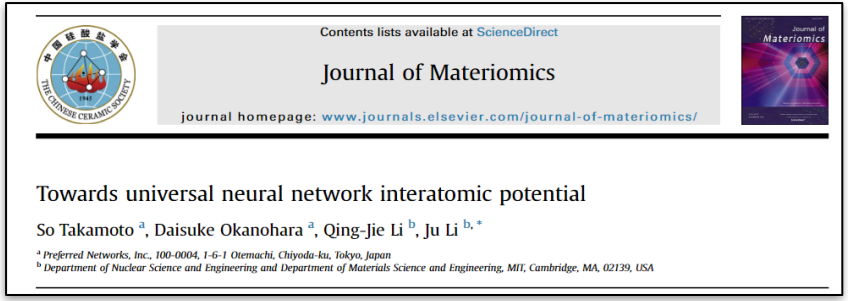


- とりあえず計算を回して実験科学者に見せる
- じっくり論文を読むために、
  - 1日分/1週間分の構造モデル作成～ジョブ投入を自動化
  - 1日分/1週間分の計算結果を自動解析
- 計算機のメンテは不要

MATLANTIS

# Scientific Papers

https://matlantis.com/cases



Contents lists available at ScienceDirect

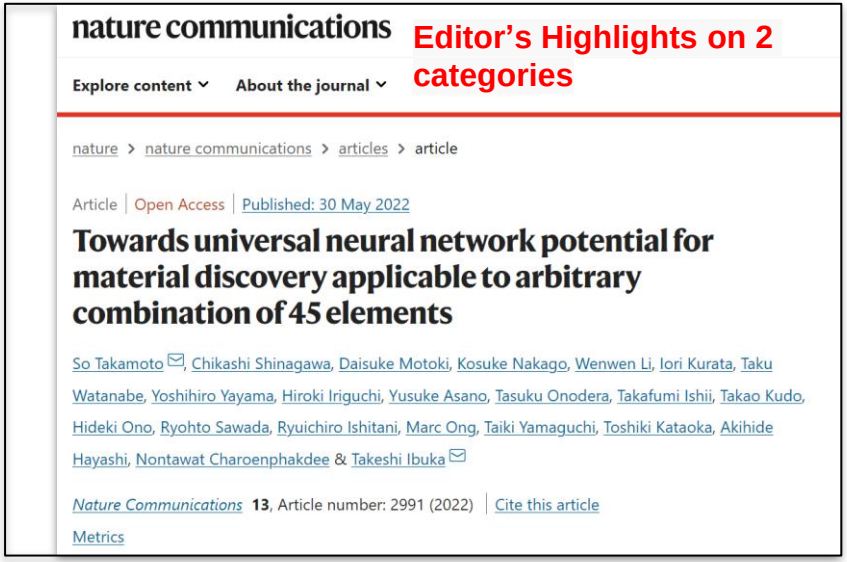
Journal of Materiomics

journal homepage: www.journals.elsevier.com/journal-of-materiomics/

Towards universal neural network interatomic potential

So Takamoto [a], Daisuke Okanohara [a], Qing-Jie Li [b], Ju Li [b, *]

[a] Preferred Networks, Inc., 100-0004, 1-6-1 Otemachi, Chiyoda-ku, Tokyo, Japan
[b] Department of Nuclear Science and Engineering and Department of Materials Science and Engineering, MIT, Cambridge, MA, 02139, USA



nature communications

**Editor's Highlights on 2 categories**

Explore content ⌄ About the journal ⌄

nature › nature communications › articles › article

Article | Open Access | Published: 30 May 2022

**Towards universal neural network potential for material discovery applicable to arbitrary combination of 45 elements**

So Takamoto ✉, Chikashi Shinagawa, Daisuke Motoki, Kosuke Nakago, Wenwen Li, Iori Kurata, Taku Watanabe, Yoshihiro Yayama, Hiroki Iriguchi, Yusuke Asano, Tasuku Onodera, Takafumi Ishii, Takao Kudo, Hideki Ono, Ryohto Sawada, Ryuichiro Ishitani, Marc Ong, Taiki Yamaguchi, Toshiki Kataoka, Akihide Hayashi, Nontawat Charoenphakdee & Takeshi Ibuka ✉

*Nature Communications* **13**, Article number: 2991 (2022) | Cite this article

Metrics

## Other publications (as of July 2023) :

| | | |
|---|---|---|
| Lieven Bekaert, et al. | 2023 | ChemSusChem2023, e202300676 |
| Ayako TAMURA, et al. | 2023 | J. Comput. Chem. Jpn., 21, 129-133 |
| Kan Hatakeyama, et al. | 2023 | 10.26434/chemrxiv-2023-f9lxl |
| Tien Quang Nguyen, et al. | 2023 | J. Comput. Chem. Jpn., 21, 111–117 |
| Lieven Bekaert,et al. | 2023 | J. Phys. Chem. C, 18, 8503–8514 |
| Hiroshi Sampei,et al. | 2023 | JACS Au, 3, 991–996 |
| Yuji Shitara,et al. | 2023 | Tribologist, 68, 280-291 |
| Yuji Shitara and Shigeyuki Mori | 2022 | Tribologist, 67, 662-671 |
| Tasuku Onodera | 2022 | Tribologist, 67, 821-829 |
| Kaoru Hisama,et al. | 2022 | Comp. Mat. Sci., 218, 111955 |
| So Takamoto, et al. | 2022 | Nature Comm.,13, 2991 |

\+ **37 conference presentations**

# お客様の計算事例

# 他社事例：Matlantisによる複雑現象解明と材料スクリーニング

第 3 回 Matlantis User Conference
ENEOS 小野寺様ご提供の資料より抜粋

ENEOS

第3回 Matlantis User Conference

2023/07/21

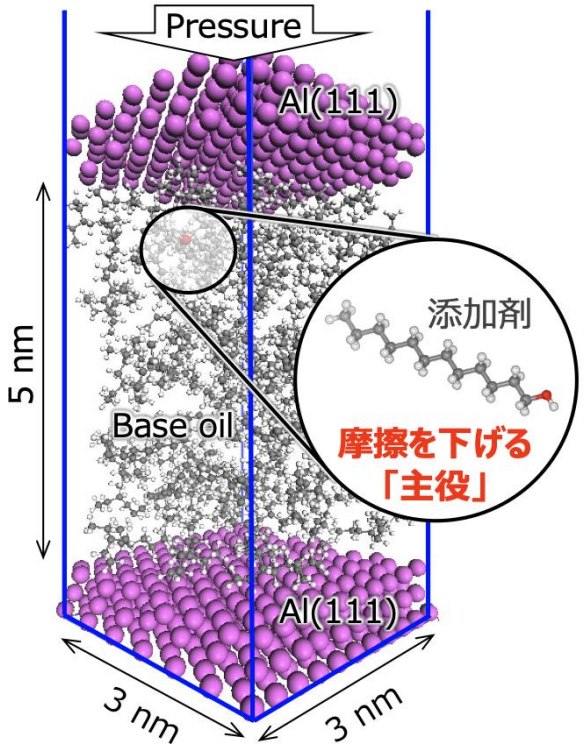
## Matlantisによる複雑現象解明と材料スクリーニング
## ～潤滑油設計への応用～

小野寺 拓

ENEOS株式会社 中央技術研究所 デジタル研究所 MI技術グループ

ENEOS Corporation
[E-ne-ohs]

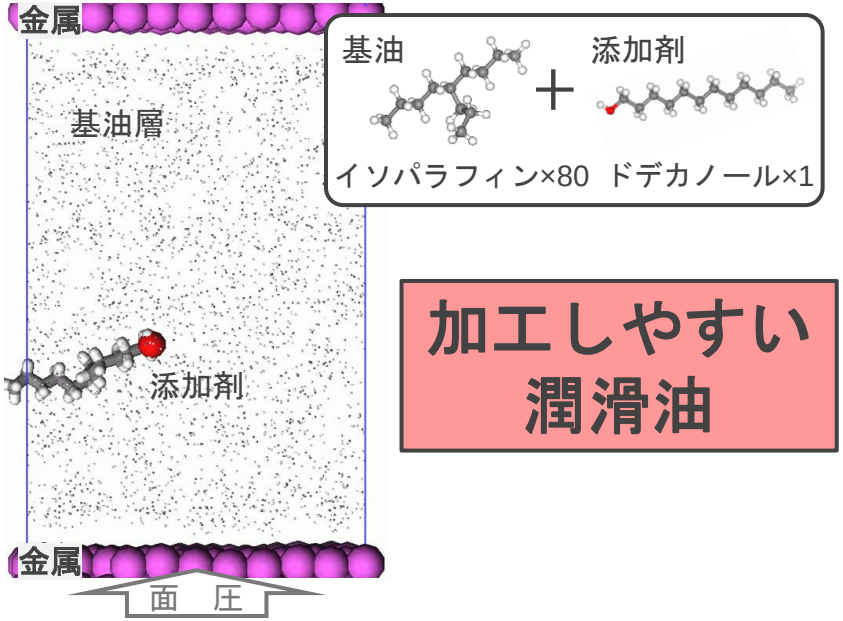
ENEOS Group Japan's Premier Energy and Materials Corporate Group

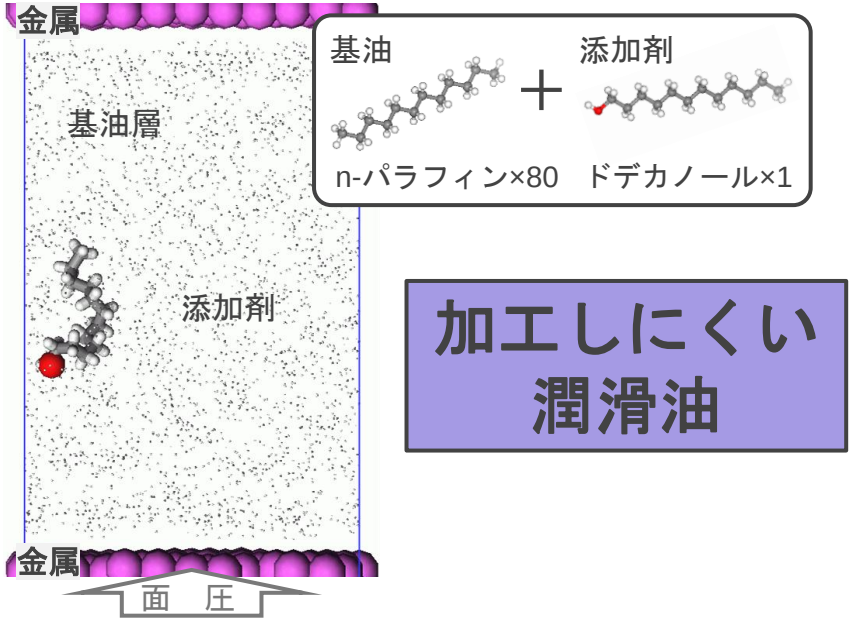



MATLANTIS

# 現象解明のためのモデリング

**実験結果：基油の種類によって加工しやすさが変化**
⇒ 2種の異なる基油中における添加剤の拡散・吸着ダイナミクスを追跡




【引用】　小野寺、トライボロジスト、67 (2022) 821／山岸ほか、トライボロジー会議2022春・東京、D25／柴田ほか、トライボロジー会議2022秋・福井、A23


Copyright © ENEOS Corporation All Rights Reserved.

# もっと加工しやすい潤滑油はないか？

Matlantisによる現象解明の結果・・・

**加工しやすくする（摩擦を下げる）ためには、**
**添加剤の吸着を妨げない、疎な油膜をつくる基油を用いるべし**

これは立派な「設計指針」になる！

**Matlantisの速さを活かして油膜疎密のデータ生成**
**機械学習によるスクリーニングを検討**

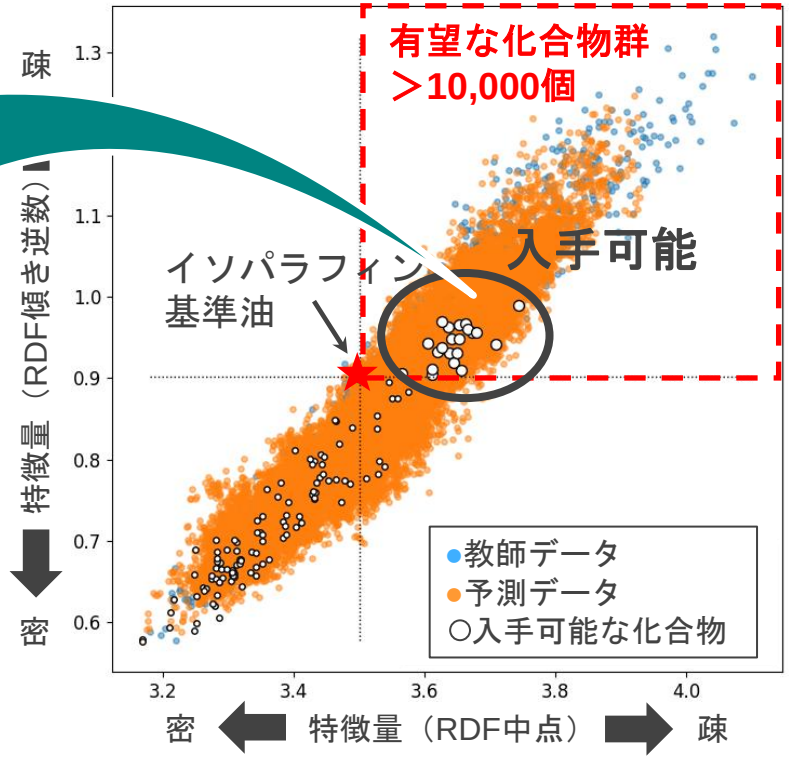

Copyright © ENEOS Corporation All Rights Reserved.

# 加工しやすい基油の提案

**実際に入手可能な化合物を3つ提案。当社内にて、実験実証フェーズに突入！**

化合物群のうち、入手可能な化合物

| RDF特徴量 | 加工油の基油候補 | | | 基準油 |
|---|---|---|---|---|
| | A | B | C | |
| 中点 | **3.74** | **3.70** | **3.68** | 3.50 |
| 傾き逆数 | **0.99** | **0.94** | **0.96** | 0.90 |




**基油として用いれば、**
**金属加工を容易にできる可能性**
（疎な油膜を形成、添加剤吸着を妨害せず）



Copyright © ENEOS Corporation All Rights Reserved.

# 課題と展望

# 課題１：使いやすさ

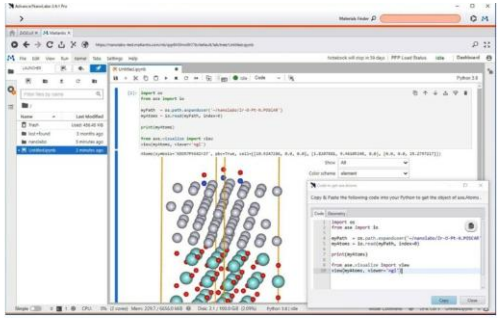
ブラウザ経由のクラウドサービスだと自動化がしにくい。

Pythonプログラミングが難しい。直感的なGUIが欲しい。

電話ですぐにサポートしてほしい。

自分にはできないから計算してほしい。

**【機能連携に関するご案内】**
**アドバンスソフト社の「Advance/NanoLabo」と**
**Preferred Computational Chemistry社の「Matlantis」**



（Advance/NanoLabo に搭載された Matlantis 連携画面）

**【講座ご案内】**
**Matlantisユーザー向けにスキルアップNeXt社との**
**材料開発分野の人材育成プログラムを提供**
**～材料化学と情報科学の知識を持った人材の育成を支援～**

# 学習教材とカスタマーサポート

## Atomistic Simulation Tutorial

必要な知識を実践的に学べるチュートリアル

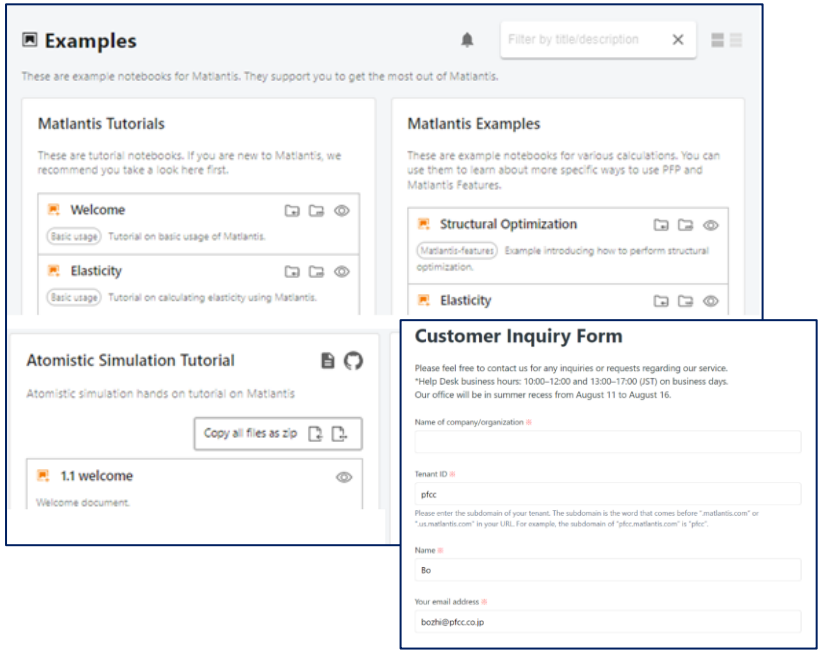
- Document: https://docs.matlantis.com/atomistic-simulation-tutorial/
- Code: https://github.com/matlantis-pfcc/atomistic-simulation-tutorial

コンテンツ

- 1章: Introduction (導入)
- 2章: Opt (構造最適化)
- 3章: Energy
- 4章: Vibration, phonon, 各種自由エネルギー
- 5章: 反応経路探索
- 6章: MD (分子動力学法)
- 7章: おわりに

## 専門家によるカスタマーサポート

- Webフォームからの問い合わせ対応
- 定期打ち合わせ
- サンプルプログラムの提供



# ChatGPT先生

## 反応のしやすさを調べるシミュレーションの方法を教えて

反応のしやすさを調べるシミュレーションとしては、化学反応の遷移状態理論（Transition State Theory）や反応速度論を用いた計算化学の手法が一般的です。ここでは、化学反応のしやすさを計算するための基本的な手順を紹介します。

1. **量子化学計算**:
   まず、反応に関与する分子の電子構造を量子化学計算により求めます。これには密度汎関数理論（Density Functional Theory, DFT）やハートリー・フォック法（Hartree-Fock method）などが用いられます。
2. **最適化と遷移状態の探索**:
   反応物と生成物のエネルギー最小構造を最適化します。次に、反応物から生成物に変化する過程でのエネルギーが最高点になる遷移状態（活性化エネルギーのピーク）を探索します。これには、saddle pointの探索や、反応座標の推定に基づく方法などがあります。
3. **振動解析**:
   遷移状態および安定な反応物・生成物の振動解析を行い、エネルギーの最小かつ二次の極大点（遷移状態）を確認します。遷移状態では一つの虚数振動モードが存在します。
4. **エネルギーバリアの決定**:
   反応物から遷移状態へのエネルギーバリアを計算し、このエネルギーバリアが反応のしやすさを決定します。
5. **Eyring方程式やArrhenius方程式の適用**:
   手に入れたエネルギーバリアを使い、Eyring方程式やArrhenius方程式に基づく反応速度定数

## ASEを使って遷移状態を求めるpythonプログラムを書いて

ASE（Atomic Simulation Environment）は、Pythonで書かれたパッケージであり、様々な原子スケールのシミュレーションタスクを行うことができます。遷移状態を求めるには、エネルギー最適化と遷移状態を探索するアルゴリズム（いわゆるsaddle pointを見つけるアルゴリズム）が必要です。

以下は、ASEを使用して遷移状態を探索する基本的なPythonプログラムの概要です。ここでは、ASEでサポートされている計算エンジン（以下の例では`calc`として表される）を使用しており、実際の計算には適切なエンジンを選択し、設定する必要があります。

python　　Copy code

```python
from ase import Atoms
from ase.optimize import BFGS
from ase.calculators.emt import EMT
from ase.constraints import FixAtoms
from ase.neb import NEB
from ase.io import read, write

# 例としての反応物と生成物の構造を定義
reactant = read('reactant.traj')
product = read('product.traj')

# 遷移状態探索のためにNEB(nudged elastic band)オブジェクトを作成
number_of_intermediate_states = 5
```

MATLANTIS

# 課題２：海外展開

## 【無料ウェビナー】 Ju Li MIT教授: 機械学習による汎用原子間ポテンシャルの発明とその応用法について

**日本: 2023年5月30日 (火) 8:00 – 9:30 (日本時間)**
**米国: 2023年5月29日 (月) 19:00 – 20:30 (東海岸時間) | 16:00 – 17:30 (西海岸時間)**
**Zoom ウェビナー (英語)**
**講師: Ju Li マサチューセッツ工科大学（MIT）教授**

Zoomで登録

※登録にはプライバシーポリシーへの同意が必要です

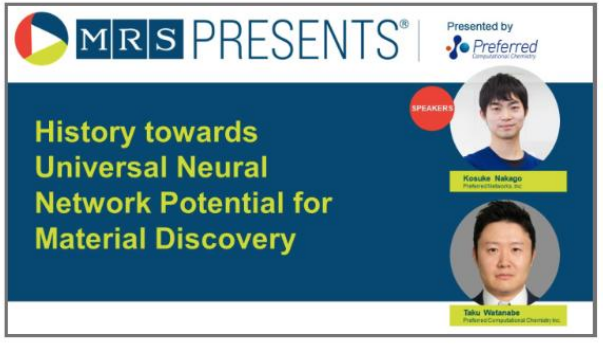
Matlantis™ では、MITのJu Li 教授を招待し、ウェビナーを開催します。講演は英語となります。

- **講師**：Ju Li, a professor at the Department of Nuclear Science and Engineering and Department of Materials Science and Engineering at Massachusetts Institute of Technology (MIT)
- **タイトル**：*The Invention and Applications of Universal Machine Learning Interatomic Potential.*
- **日時**：2023年5月30日 (火) 8:00 – 9:30（Zoom ウェビナー）

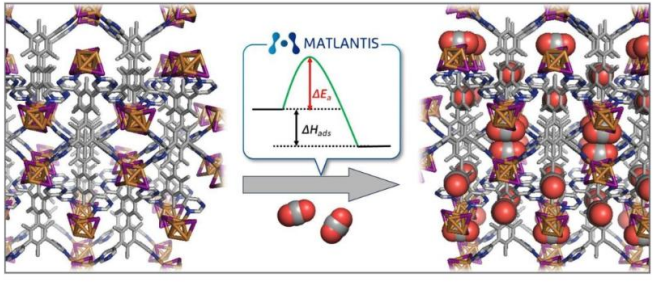
登録 は無料です。計算科学の最前線にご関心のある皆さまのご参加をお待ちしております。

MATLANTIS

## 【オンデマンド版配信中】材料探索のための汎用ニューラルネットワークポテンシャルができるまで

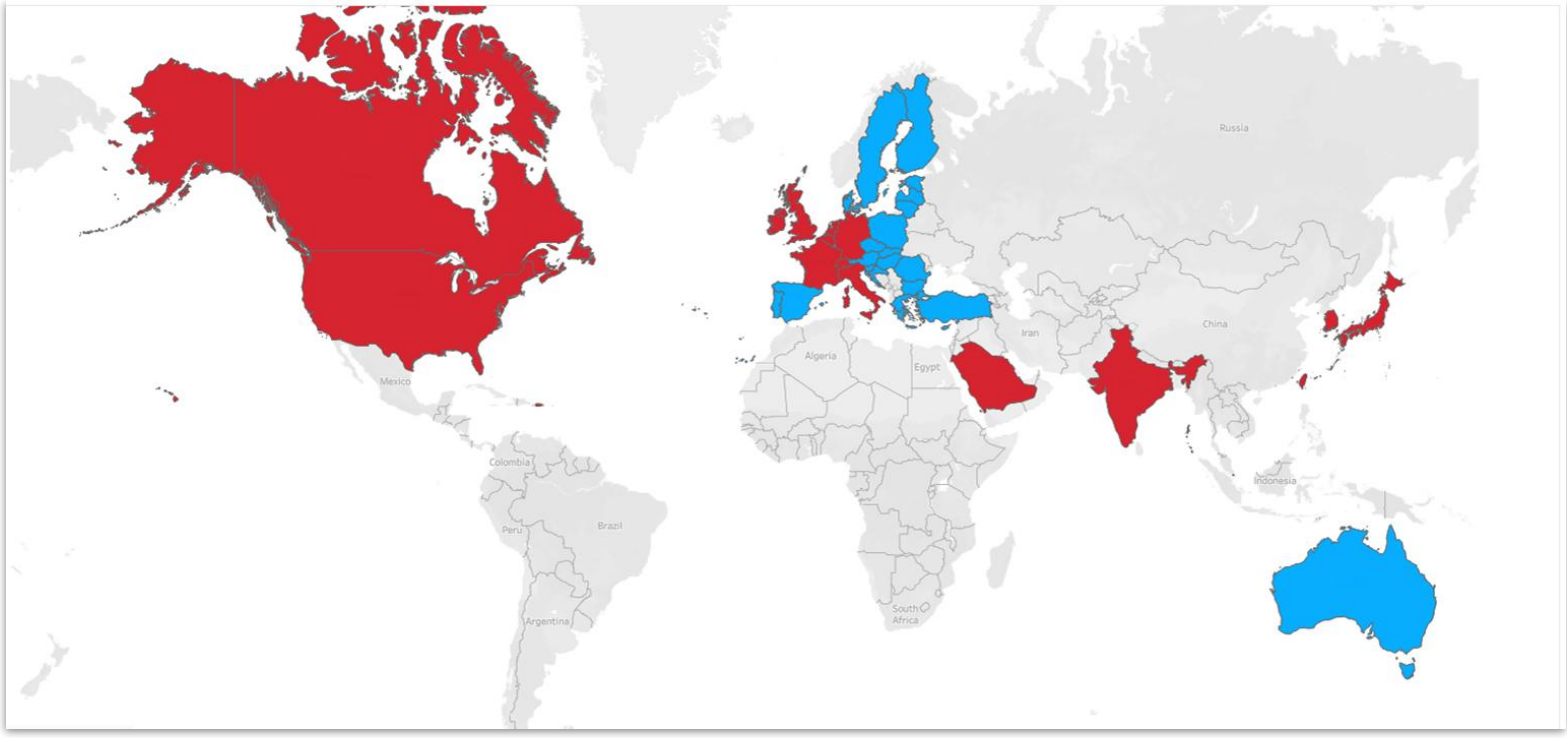



## 【RSCウェビナー登壇】$CO_2$ storage, magic doors and machine learning

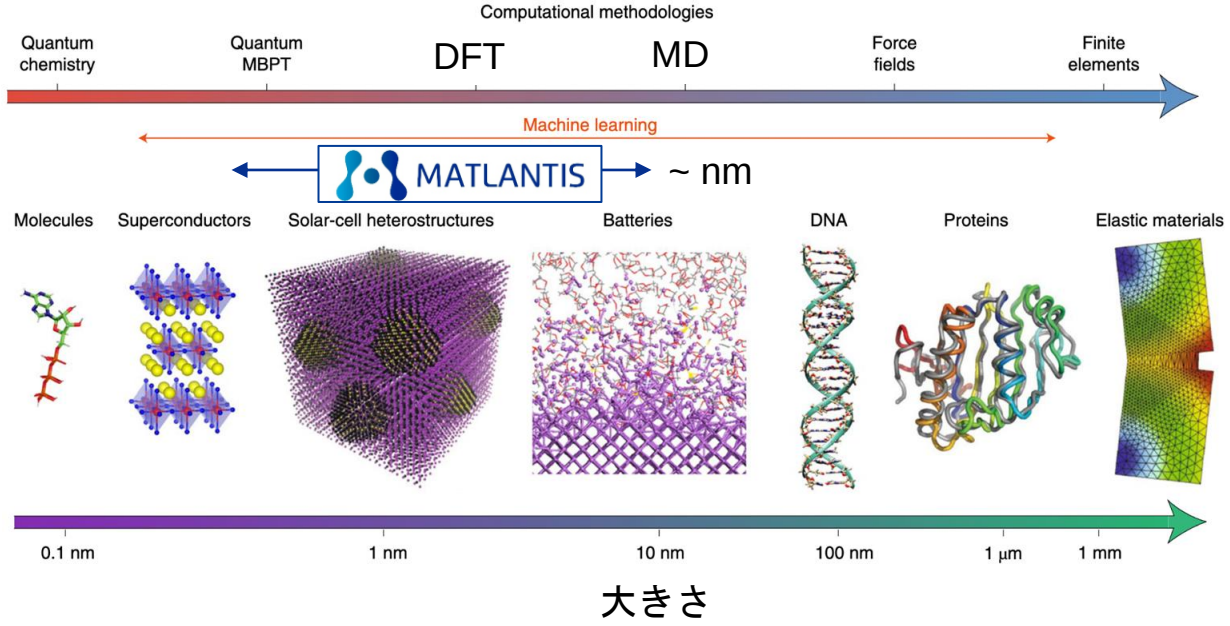


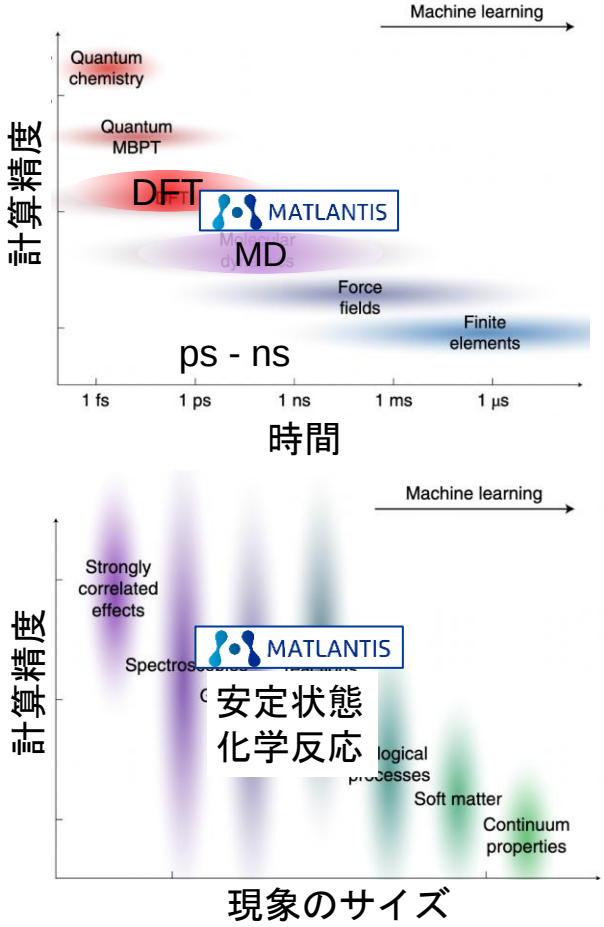
# 世界への普及状況

- 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。



# 課題３：実験との比較



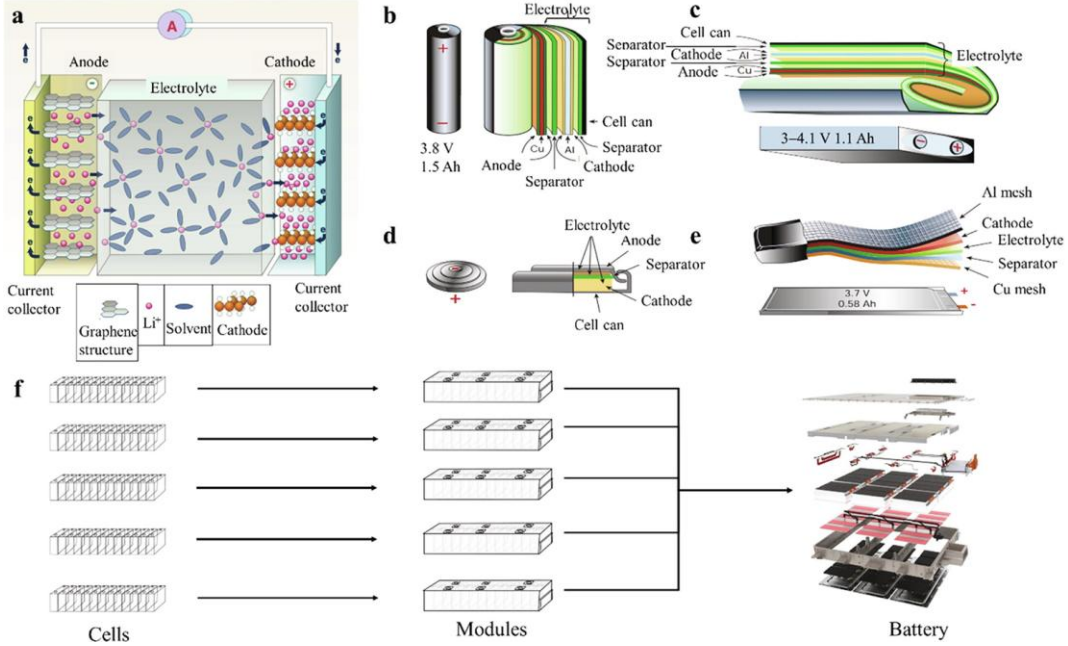




S. G. Louie, Nature Materials, 20, 728 (2021)

MATLANTIS

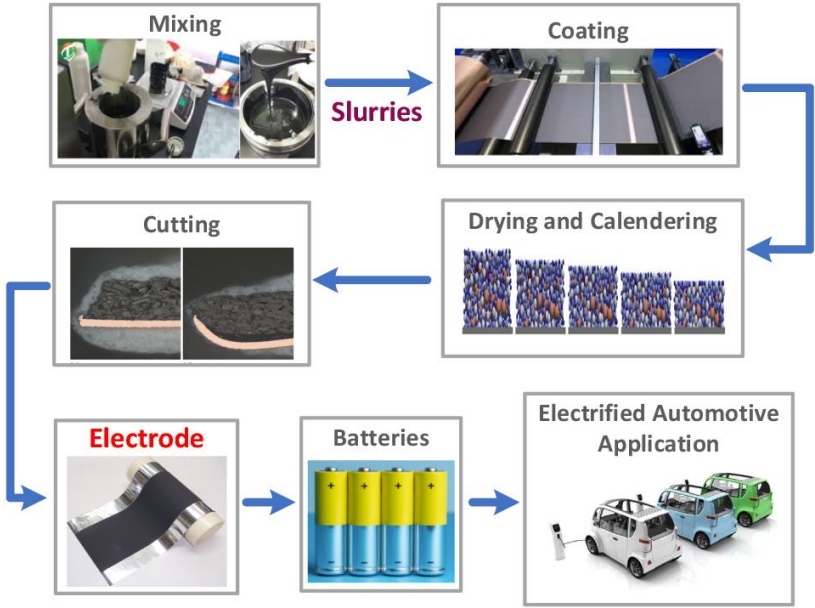
# スケールの難しさ：Li-ion電池のデバイス構造

材料、セル、モジュール




Y. Chen, Journal of Energy Chemistry 59, 2021, 83-99

実験からの目線




K. Liu, Automotive Innovation, 5, 2022,121

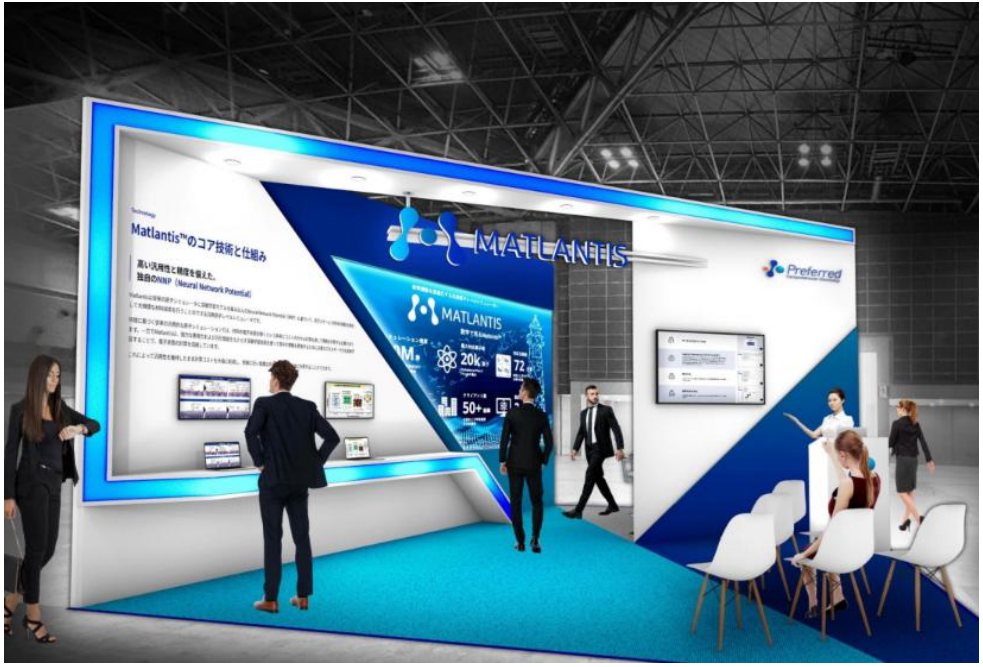
MATLANTIS

# まとめ

- **Matlantis™** は新素材探索や現象解明の高速化に貢献します
- **Matlantis駆動型アプローチ** により材料計算科学の役割が大きく変わります
  - ○ シミュレーションによる大規模スクリーニング実験
  - ○ 様々な現象についてシミュレーションによる解析
- **Matlantis™** 貴組織の研究開発部門のデジタル化の推進、変革に貢献します

# PFCCブースのご案内

## 東4ホール　4T-15（分析・計測・評価：ナノアナリティクスゾーン）



Preferred
Computational Chemistry