

2021年4月27日

各位

株式会社 Preferred Networks
ENEOS 株式会社

新物質開発や材料探索を加速する 汎用原子レベルシミュレータを提供する合弁会社の設立に合意

株式会社 Preferred Networks（最高経営責任者：西川 徹、以下「PFN」）および ENEOS 株式会社（社長：大田 勝幸、以下「ENEOS」）は、新物質開発・材料探索を加速する高速の汎用原子レベルシミュレータを提供する合弁会社の設立について合意しましたので、お知らせいたします。

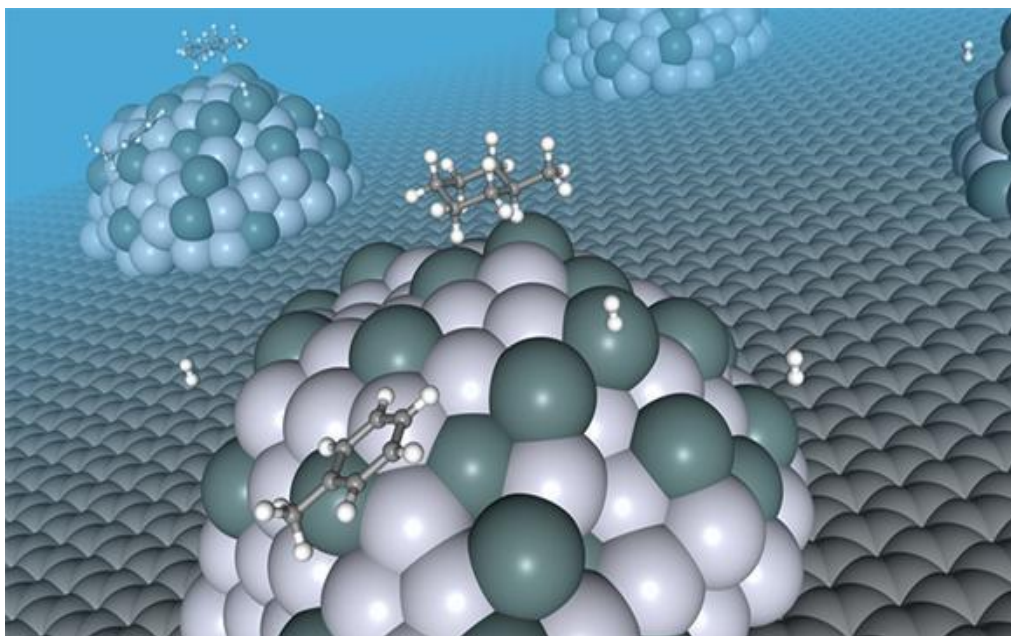


図. 汎用原子レベルシミュレータで計算された触媒表面の例

PFNとENEOSは2019年度より戦略的な協業体制の構築に合意しており、AI技術を活用したマテリアルズインフォマティクス分野での革新的事業創出を検討してまいりました。新会社では、2021年夏を目途に、両社の知見をもとに開発した高速の汎用原子レベルシミュレータをクラウドサービスとして提供いたします。

今般、材料探索技術の高速化と汎用性向上を実現するため、従来の物理シミュレータに深層学習モデルを組み込み、原子レベルで材料を再現して大規模な材料探索を行うことのできる汎用原子レベルシミュレータを開発しました。深層学習モデルの訓練には、スーパーコンピュータを使って物理シミュレーションした膨大な量の原子構造データを使用しています。これにより、計算スピードを従来の物理シミュレータの数万倍に高速化するとともに、領域を限定しない様々な物質に適用可能な汎用性を実現しました。

本協業では、マテリアルズインフォマティクスのコア技術となる汎用原子レベルシミュレータを提供することにより、様々な材料開発分野において革新的な素材の開発を加速させ、イノベーション創出・実現に貢献していきます。

両社は、新たな素材開発を加速するマテリアルズインフォマティクス技術を活用した革新的なサービスの提供をすることにより、持続可能な開発目標（SDGs：Sustainable Development Goals）の目標9「産業と技術革新の基盤をつくろう」のゴールである「強靱なインフラ構築、包摂的かつ持続可能な産業化の促進及びイノベーションの推進を図る」ことをはじめとした目標の達成に貢献してまいります。

以 上

<合併会社の概要>

会社名	未定
所在地	東京都千代田区大手町1丁目6-1大手町ビル
設立年月	2021年6月1日（予定）
代表者	岡野原 大輔
出資比率	PFN 51%、ENEOS 49%
事業概要	汎用原子レベルシミュレーションクラウドサービスの販売およびコンサルティング

<本件に関するお問い合わせ先>

株式会社 Preferred Networks
ENEOS株式会社

広報担当：坂口・秋山 pfn-pr@preferred.jp
広報部広報グループ pr@eneos.com

03-6257-7150