

2024年9月17日

株式会社Preferred Networks

ENEOS株式会社

汎用原子レベルシミュレータMatlantisのコア技術 PFPの最新版v7をリリース

自然界に存在するすべての元素に対応

株式会社Preferred Networks（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：西川徹、プリファードネットワークス、以下、PFN）とENEOS株式会社（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：山口敦治、以下、ENEOS）は、両社が共同開発した汎用原子レベルシミュレータ [Matlantis™](#) を支えるコア技術 PFP（Preferred Potential^{*1}）の最新版であるバージョン7（以下、PFP v7）の提供を開始しました。Matlantisはこれまで72元素の組み合わせのシミュレーションに対応していましたが、本バージョンでは自然界に存在するすべての元素を含む96元素^{*2}に対応可能となりました。

材料探索を高速化する汎用原子レベルシミュレーター

MATLANTIS

数字で見るMatlantis™

シミュレーション速度

20M 倍

3,000原子で従来のDFT計算と比較した場合

最大対応原子数

44k 原子

Professional PlanでPt bulkの場合

対応元素数

96 元素

自然界に存在するすべての元素を含む

1 GPU換算の計算量

2,264 年

5,900万以上の構造からなる訓練データの生成にかかった計算量を1台のGPUで処理した場合の年数

クライアント数

90+

企業および学術機関などの団体

累計原子数

30T 原子

2023年1月～2024年6月にシミュレーションした原子の総数

Matlantis™は持続可能な世界を実現する革新的な材料の創出に貢献します。

触媒

電池

半導体

合金

潤滑剤

セラミック

吸着剤

分離膜

*1 PFP v7 2024年8月現在
Matlantisのニューラルネットワークポテンシャル「PFP」は、PFNのスーパーコンピュータおよび国立研究開発法人産業技術総合研究所のAI標準クラウド（ABCI）を用いて開発されました。
© Preferred Computational Chemistry, Inc.

Matlantisは、未発見のものを含む多様な物質への汎用性を特長の1つとして開発が進められてきました。対応元素数を増やすほどその組み合わせの数は膨大になり、シミュレーションの速度と精度を維持する事は困難になりますが、今般提供を開始する最新版PFP v7では、速度と精度を維持したまま96元素に対応しています。これにより、Matlantisユーザーは元素に制約されることなく、合成燃料・排ガス向けなどの触媒、次世代電池、半導体、CO₂吸着剤など広範な新材料に対して、コンピュータ上で原子レベルのシミュレーションを行うことが可能となります。新たに対応した元素には耐熱性の高い磁石や医療用レーザー、光通信等に利用されるレアアースや、除去や採集などの対象となる放射性元素も含まれ、Matlantisの用途拡大が期待されます。

PFPP v7の訓練データセットは、v1開発時^{*4}の5.9倍にあたる5,900万の分子や結晶などの構造からなり、このデータセットの開発に使用した計算力はGPU^{*3} 1台に換算すると2,264年分に達します。PFPP v7には、ENEOSの化学技術に関するドメイン知識に加え、Matlantisの販売を行う株式会社Preferred Computational Chemistry^{*5}（以下、PFCC）に寄せられたMatlantisユーザーのフィードバックも多数反映されています。また、PFPP v7は、PFNのスーパーコンピュータおよび国立研究開発法人産業技術総合研究所のAI橋渡しクラウド（ABCI）を用いて開発されました。

PFNとENEOSおよびPFCCは、今後もMatlantisとそのコア技術であるPFPPの開発を進め、持続可能な世界を実現するための革新的な材料・素材の創出に貢献していきます。

汎用原子レベルシミュレータMatlantisについて <https://matlantis.com/ja/>

Matlantisは、原子スケールで材料の挙動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です。従来の物理シミュレータに深層学習モデルを組み込むことで、計算スピードを従来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への適用を可能にしました。

PFN、ENEOS、三菱商事の共同出資会社であり、Matlantisの販売を行うPFCCが、2021年7月にクラウドサービスとして提供を開始してから、2024年8月時点で、90以上の企業・団体に導入され、触媒、電池材料、半導体、合金、潤滑油、セラミック材料、化学材料など、幅広い開発に用いられています。

*1：PFNとENEOSが共同開発した、材料探索のための汎用的な原子シミュレーションを実現する深層学習技術であるNeural Network Potential (NNP)の名前。NNPとは、ニューラルネットワークを用いて分子動力学ポテンシャルを表現するもの。

[S. Takamoto, et al. Nat Commun 13, 2991 \(2022\). doi: 10.1038/s41467-022-30687-9](https://doi.org/10.1038/s41467-022-30687-9)

*2：CRC Handbook of Chemistry and Physics, 86th edition (2006)によれば、テクネチウムとプロメチウムを除く原子番号92番のウランまでのすべての元素と、プルトニウム244の91種類の元素が自然界に存在するとされる。PFPPはこれらにテクネチウム、プロメチウムを加え、さらに超ウラン元素としてネプツニウム、アメリシウム、キュリウムを加えた96元素に対応する。

*3：Graphics Processing Unit：画像処理に特化した演算装置。近年は深層学習やシミュレータで必要とされる大量の演算を高速に実行する事にも利用されている。

*4：2021年7月6日公表

[PFCC、新物質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Matlantisをクラウドサービスとして提供開始](#)

*5：Matlantisの販売およびコンサルティングを目的とするPFN、ENEOS、三菱商事株式会社の共同出資会社

本件に関するお問い合わせ先

株式会社Preferred Networks： 広報担当/坂口・秋山 pfn-pr@preferred.jp
ENEOS株式会社： 広報部メディアリレーションGr pr@eneos.com