ENEOS における低炭素技術への挑戦

～汎用原子レベルシミュレータ Matlantis™の共同開発者そしてユーザーの視点から～

（ENEOS 株式会社） ○井深 丈

The challenges to low-carbon technology at ENEOS.Perspectives from co-developer and user of MatlantisTM,a high-speed atomic-scale simulator

(*ENEOS Corporation*) ○Takeshi Ibuka

To accelerate the research and development of innovative materials that realize a low-carbon society, Preferred Networks, Inc. and our company have developed Matlantis™, a high-speed versatile atomic-scale simulator, using proprietary AI technology. Our product is provided as SaaS from Preferred Computational Chemistry, Inc. (PFCC), a joint venture co-found by both companies. We are taking on the challenge of R&D innovation by utilizing this new technology. In this presentation, the development process, application examples, and prospects of Matlantis will be reported.

Keywords : Neural Network Potential; Materials Informatics; digital transformation

低炭素社会を実現する革新的材料の研究開発を加速するため、Preferred Networks 社と当社は独自 AI 技術を用いた汎用原子レベルシミュレータ Matlantis™を開発し、2021 年 7 月より両社で設立した PFCC 社より SaaS として提供を開始した [1]。

Matlantis のコア技術は Neural Network Potential（NNP）をベースとした独自の深層学習モデルである。幅広い元素の組み合わせに対応し、分子・結晶・アモルファスなどを含む任意の構造を記述できる [2]。さらに、密度汎関数法を用いたエネルギー計算と比較して、飛躍的な高速化を達成している [3]。

DX の活用による研究開発の改革が求められるなか、本技術は、新規素材の開発や研究開発の加速に貢献するものである。当社においても Matlantis を用いた研究開発の革新を進めており、特に再エネ合成燃料、Direct MCH®、高性能潤滑油など低炭素社会実現に向けた研究への適用に注力している。発表ではこれら活用事例および Matlantis の開発経緯ならびに今後の展望を報告する。

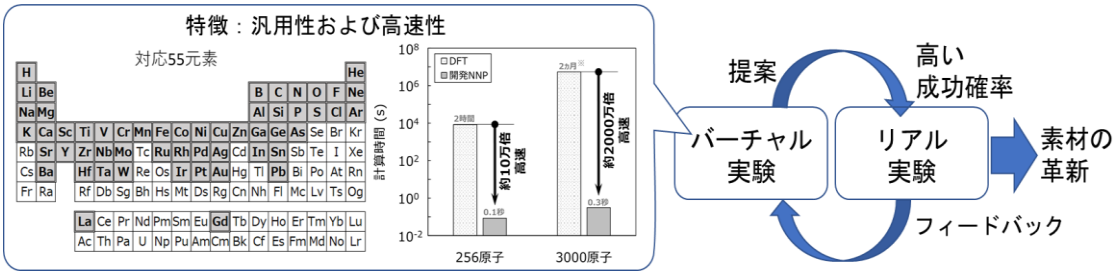

図 1 デジタル技術を活用した素材探索・開発の革新スキーム

1) https://matlantis.com/ja/
2) S. Takamoto,ほか arXiv: 2106.14583 (2021)
3) 小野寺ほか，フロンティア，3 (2021) 161

© The Chemical Society of Japan