

News Release

2021年7月6日

株式会社Preferred Computational Chemistry

株式会社Preferred Networks

ENEOS株式会社

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

株式会社Preferred Networks（代表取締役最高経営責任者：西川 徹、以下、PFN）とENEOS株式会社（代表取締役社長：大田 勝幸、以下、ENEOS）の共同出資により2021年6月1日に設立した株式会社Preferred Computational Chemistry（本社：東京都千代田区、代表取締役社長：岡野原 大輔、以下、PFCC）は、新物質開発・材料探索を高速化する汎用原子レベルシミュレータ Matlantis™（マトランティス）をクラウドサービスとして、このたび提供を開始しました。



PFCCが提供する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。深層学習モデルの訓練には、PFNの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。マテリアルズ・インフォマティクスのコアツールとなるMatlantisは、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。

汎用原子シミュレータ Matlantisの主な特長

1. 汎用性

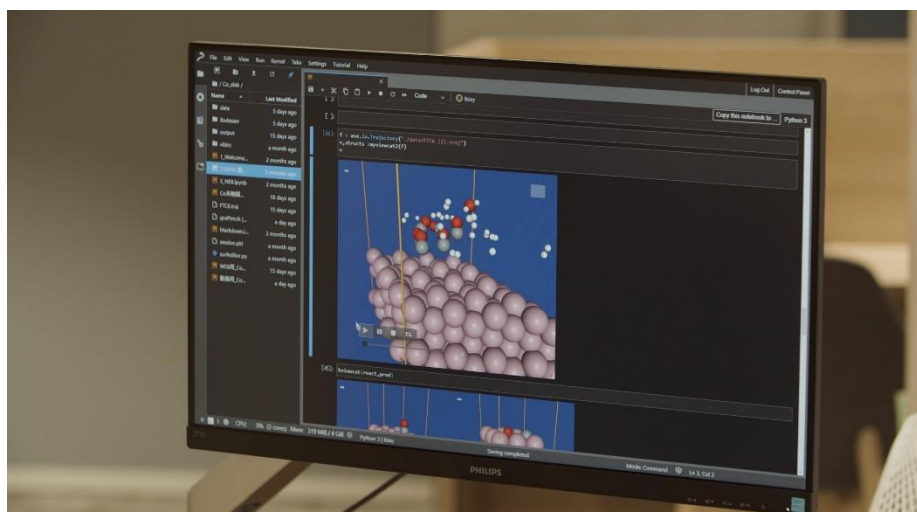
未知の材料を含む、分子や結晶などの任意の原子の組み合わせにおいてシミュレーションが可能です。現在は55の元素をサポートしており、今後さらに拡大予定です。

2. 高速性

従来の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実施できます。

3. 使いやすさ

学習済み深層学習モデル・物性計算ライブラリ・高性能な計算環境をパッケージにして提供することで、ユーザーはハードウェアの準備や環境構築をすることなく、すぐにブラウザ上でシミュレーションによる材料探索が可能です。



Matlantisの画面

Matlantisの名称の由来

「材料・素材」を表す英単語「Material」と、プラトンの著作に記述があり、世界中の冒険家たちを発見へ駆り立てた伝説上の大陸「アトランティス(ATLANTIS)」を合わせた造語です。機能性分子の候補は10の60乗個にも及ぶと言われてはいますが、これまでに人類が有用性を確認できたのは、そのほんの一握りです。Matlantisという名称には、広大な未知分子の海から、革新的な材料を見つけ出す指針を提供したいという思いが込められています。

代表取締役社長 岡野原 大輔のコメント

「PFCCは革新的な材料・素材の創出を可能にすることで、持続可能な世界を実現することをミッションに掲げています。クラウドサービスとして提供するMatlantisは、PFNの深層学習などのAI技術と計算機インフラ、ENEOSの化学領域の知識やノウハウの粋を集めて開発しました。材料開発に携わる世界中の研究者が、世界の未来を良い方向に変えることのできる革新的な材料・素材を発見できるよう、これまでにない強力なツールの提供を通して支援していきます。」

株式会社Preferred Computational Chemistry (PFCC) の概要

所在地	東京都千代田区大手町1丁目6-1大手町ビル
設立年月日	2021年6月1日
代表者	代表取締役社長 岡野原 大輔
資本金	310百万円 (出資比率 PFN51%、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Matlantisの販売およびコンサルティング
URL	https://matlantis.com

本件に関するお問い合わせ:

株式会社Preferred Computational Chemistry

株式会社Preferred Networks

ENEOS株式会社

広報窓口

広報担当

広報部

広報グループ

pr@pfcc.co.jp

pfn-pr@preferred.jp

pr@eneos.com

TEL:03-6257-7150