

科学技術計算分科会 2024年度会合

HPCとAIを活用した材料 探索・シミュレーション 技術の開発

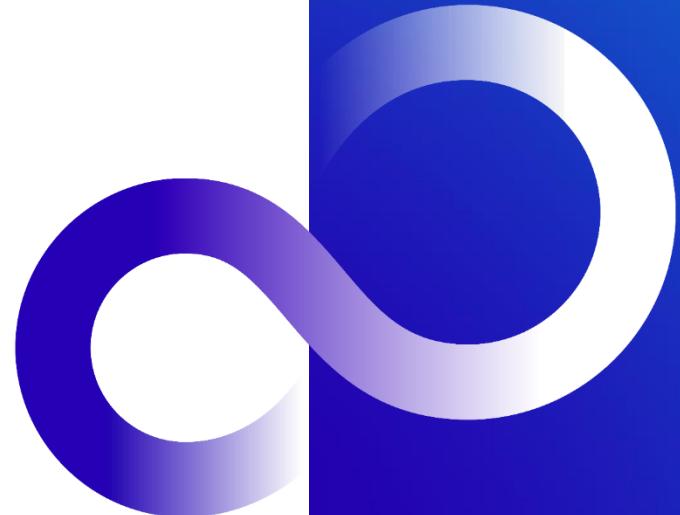
富士通株式会社

富士通研究所 コンピューティング研究所

イノベーティブコンピューティングCPJ

吉本 勇太

2024年10月28日（月）



- 近年、HPCとAIを駆使した材料探索技術やシミュレーション技術が注目されており、これにより材料開発のサイクルを大幅に短縮することが期待されています。
- 弊社では、材料開発を支援する統合プラットフォームとして、HPCとAIを活用した**材料探索プラットフォーム**を開発しています。
- 本発表では、材料探索プラットフォームのコンポーネントの中から、以下の3つについてご紹介します。
 1. 材料のハイスループットスクリーニング用
ニューラルネットワークポテンシャル（NNP）生成ツール
 2. 分子動力学（MD）シミュレーション用NNP生成ツール
 3. 因果発見技術

材料探索における課題

脱炭素化社会の実現に向けて、新たな触媒材料や燃料電池材料の開発が求められています。これまでの実験ベースの試行錯誤的な材料開発では、多大なコストと時間がかかります。

脱炭素化社会に向けて
キーとなる技術



発電所



太陽光パネル



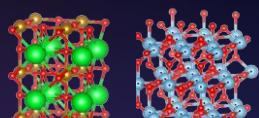
燃料電池

HPCとAIを連携させることで、高速かつ大量の計算が可能となり、
材料開発期間の短縮が可能になります。

~の特性をもつ
材料を開発し
たい



材料構造



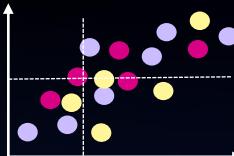
高速シミュレーション

HPC



AI

有望な材料候補



材料探索プラットフォーム

FUJITSU

- 材料探索を支援する4つのツールを提供します

分析結果を次の探索ステップに活用

1 構造データ作成

チャットベース構造
データ作成ツール



公開データ (Materials Project) と
生成AI活用により
構造データの作成・編集を容易に

生成AIを活用

2 物性値を計算

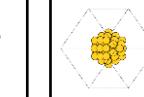
大量の材料候補



ハイスループット
スクリーニング
(HTS: High Throughput Screening)

スクリーニング用
NNP生成ツール

少量の材料候補



MD用
NNP生成ツール

分子動力学(MD)

有望材料

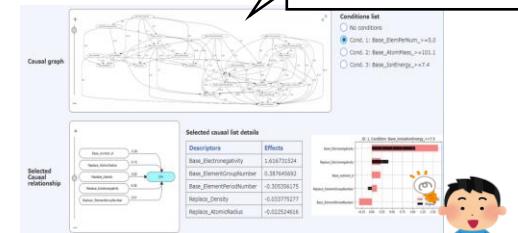
大量データのスクリーニング (HTS) や
単一材料の動的物性を解析するMDに向けた
AI作成ツールを提供



顧客向けAIを簡単に作成

3 結果を分析

因果による
結果分析ツール



計算結果の背景にある、
大量の原因と結果の関係を
解析し因果関係を可視化



富士通独自技術

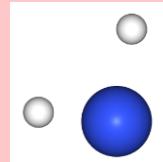
1. スクリーニング用ニューラル ネットワークポテンシャル (NNP) 生成ツール

スクリーニング用NNP生成ツールの機能

FUJITSU

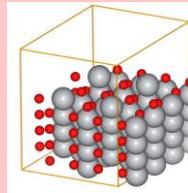
1. 構造データの編集

1. 吸着物の作成



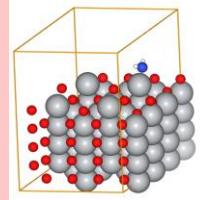
- ・ベース構造をASEライブラリから読み込み
- ・指定した原子の削除

2. 触媒表面の作成



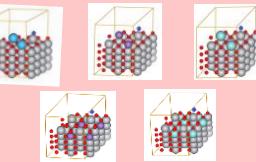
- ・結晶面(ミラー指数)の設定
- ・構造データの拡張
- ・真空層(vacuum)の設定

3. 表面に吸着物を配置



- ・吸着物を配置
- ・吸着物を回転させる
- ・吸着物を平行移動させる

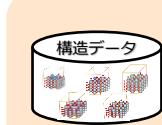
4. 構造データを増やす



- ・ベースとなる吸着物-触媒構造の保存(DFT計算時の原子固定の設定)
- ・指定した原子の元素を置換
- ・原子置換プログラムによる構造データの大量作成

初期構造

2. データ作成



DFT計算用
設定ファイルの作成



DFT計算の
実行

DFT計算結果
(全エネルギー)

DFT計算結果
をまとめる

吸着エネルギー

DFT結果から
吸着エネルギーを計算

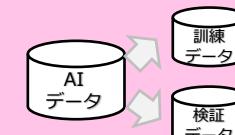
訓練方法に応じた
データを作成



教師あり
学習向けデータ
(ラベル付き)

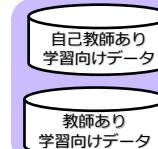
自己教師あり
学習向けデータ
(ラベル無し)

訓練データの編集



- ・データを2つに分割
- ・データをシャッフル
- ・データを1つに結合
- ・データの中身を確認

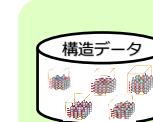
3. AIの訓練



自己教師あり
学習向けデータ

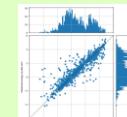
教師あり
学習向けデータ

4. AIで物性値予測



構造データ

エネルギー予測値



HPCとAI技術を活用し、カーボンフリー素材開発を促進



Atmonia社との共同研究

(アンモニア合成触媒を開発するアイスランドのベンチャー企業)

カーボンフリー物質であるアンモニアの触媒探索をHPCとAIで加速

- アンモニアはCO₂の排出が無く、水素に比べて輸送が容易なため次世代エネルギーとして注目
- しかし現在主流のアンモニア合成手法では化石燃料から原料の水素を作るためCO₂が大量に排出されてしまう課題がある
- 富士通のHPC/AI技術を活用しAtmonia社と 水と空気（窒素）と電気のみでアンモニアを取り出せる革新的な新触媒を研究中

HPC: High Performance Computing
(データの処理と複雑な計算を高速で実行する技術)



脱炭素社会に向けたHPCxAIによる材料革新

- アンモニアは次世代エネルギーとして注目されるが、主流の生成法はCO₂が大量に排出され限界
- Atmoniaと共同で、HPC/AI技術を活用し、水と空気(窒素)と電気でアンモニアを生成する革新的な新触媒材料を研究

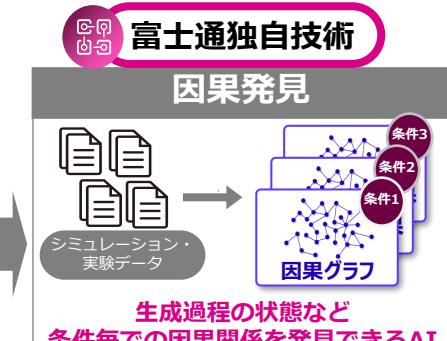
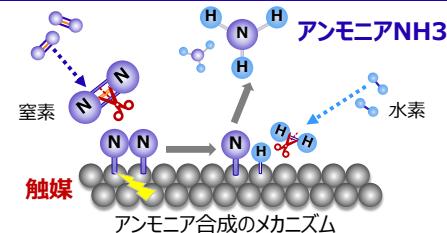
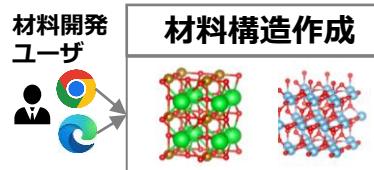
技術の強み

- 量子化学シミュレーションを3000倍以上高速化するAIシミュレーション技術
- 膨大なデータから人が気づけない因果関係を発見するAI技術

顧客・社会の価値

- アンモニア燃料などの材料開発で、これまで出来なかった膨大な範囲から早期に新材料候補を発見しゼロエミッションに貢献
- 事例：Atmoniaにて新触媒候補を発見(10月プレス)

材料探索プラットフォーム(デモ)



膨大な範囲から
欲しい材料候補を絞る

納得と新たな気づき
を獲得



AIで高速に吸着エネルギーを予測



- 構造データのエネルギーを、AIで高速に予測。DFT計算よりも約**3000倍**以上高速
- Atmoniaでの新触媒候補発見では18000回のシミュレーションが必要で、375日間**(1年)かかる計算を10分で可能**

AI予測(100構造で約1分)

The screenshot shows the Materials Discovery Platform's AI prediction configuration screen. On the left, there is a sidebar with a list of entries: test_yt, test_yt, test080v3, test080v2, test080v1, test training 0805, test inference, and XXXXXXX. Each entry has a progress bar at 0% and a 'Start' button. In the center, a modal window titled 'Config' is open. It contains fields for 'entry name' (set to 'test_yt'), 'AI model weight data' (set to '学習モデル1'), 'AI prediction data' (set to 'データセット1'), and 'Config file'. Below these is an 'Output directory path' field with 'saved' selected. At the bottom right of the modal is a blue 'Start AI prediction' button. Red text annotations are overlaid on the image: ① 学習モデルなど、必要な条件を設定 (Configure learning models and required conditions) points to the configuration fields; ② AI予測実行 (Execute AI prediction) points to the 'Start AI prediction' button.

DFT計算(100構造で約2日)

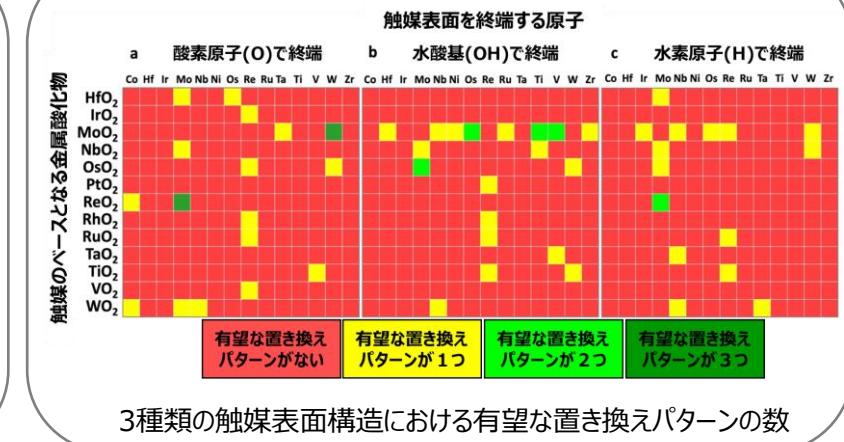
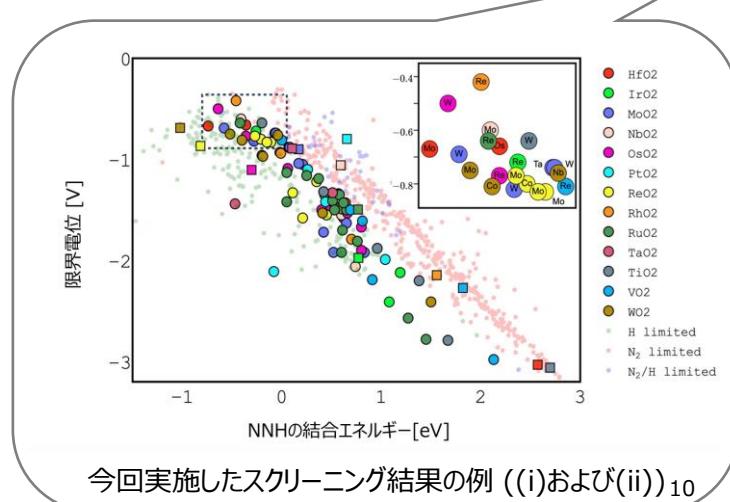


今回実施したスクリーニングの概要

FUJITSU

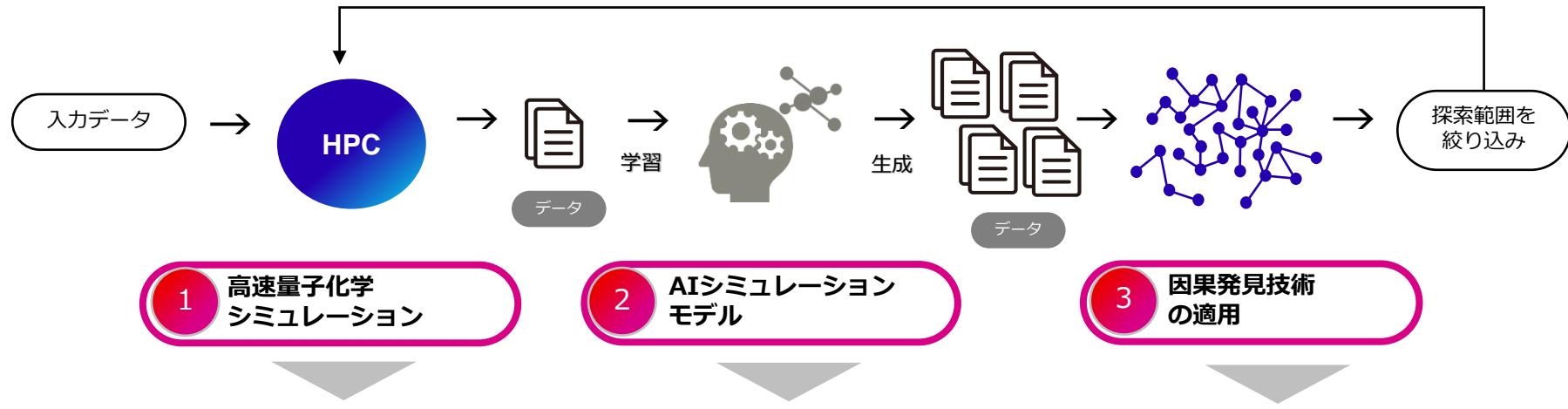
量子化学シミュレーションを用いたハイスループットスクリーニング

アンモニア合成触媒：
約**2400**種類の組み合わせ



今回開発・適用した技術： HPC & AI の融合による高速材料探索技術

FUJITSU



1 高速量子化学 シミュレーション

高精度シミュレーションを10倍
高速化、高品質データを高速
生成 (HPC)

2 AIシミュレーション モデル

約100倍の高速化により
大量のシミュレーション
を超高速実行 (AI)

3 因果発見技術 の適用

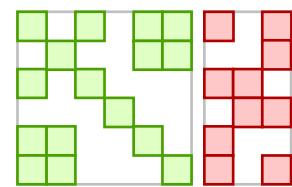
材料候補とその物性の
因果関係を分析し、
新たな気づきを得る (AI)

HPC/AI を組み合わせた探索効率化技術により
新材料候補の探索期間の大幅な短縮を可能に

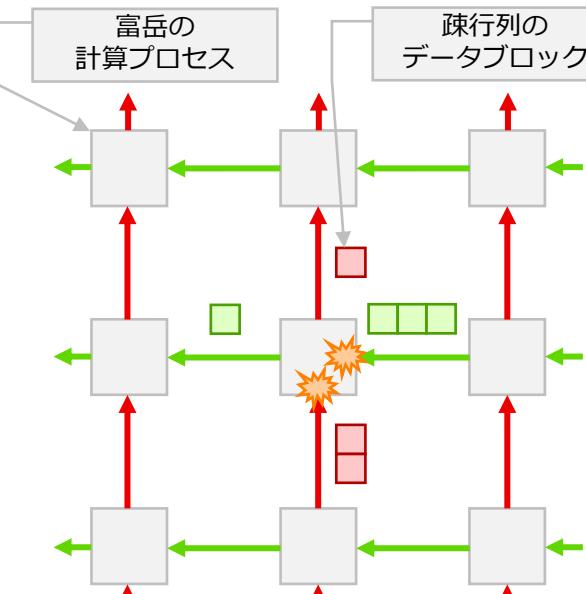
計算ノード間の通信待ち時間削減による並列計算の効率化

FUJITSU

従来技術

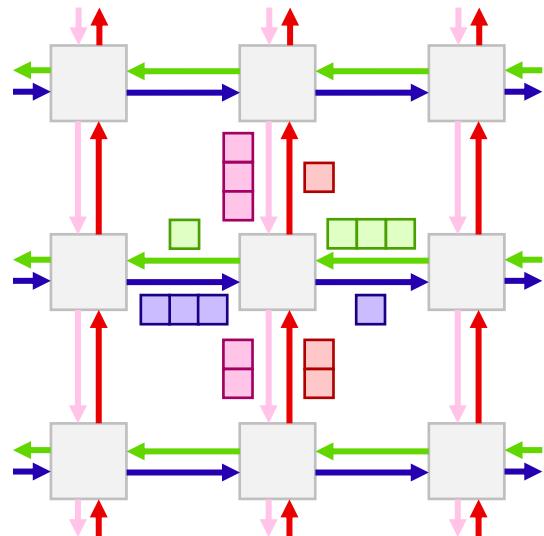


材料開発アプリにおける
疎行列積を「富岳」で計算



通信される行列データ の量が不均衡
→ 通信待ち時間 が発生

新規開発した技術



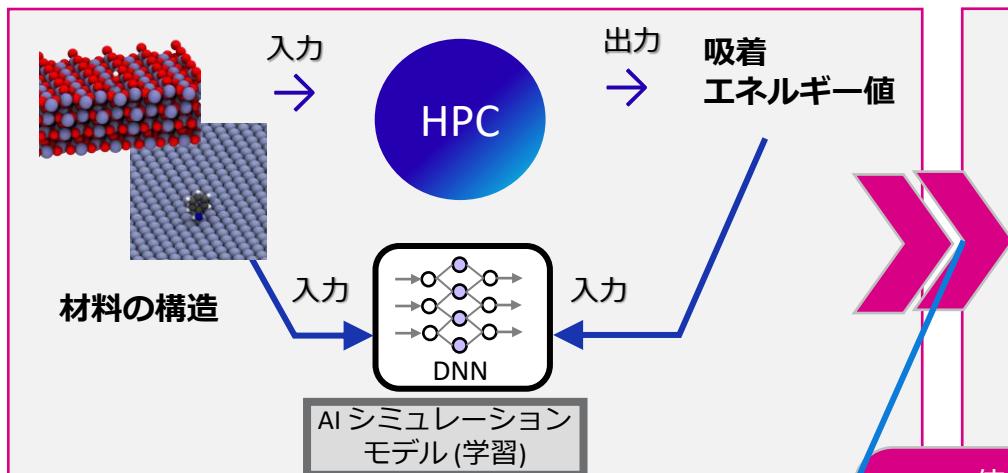
二次元トーラス上で双方向に通信することで
通信をオーバーラップし、待ち時間を削減

AI シミュレーションモデル

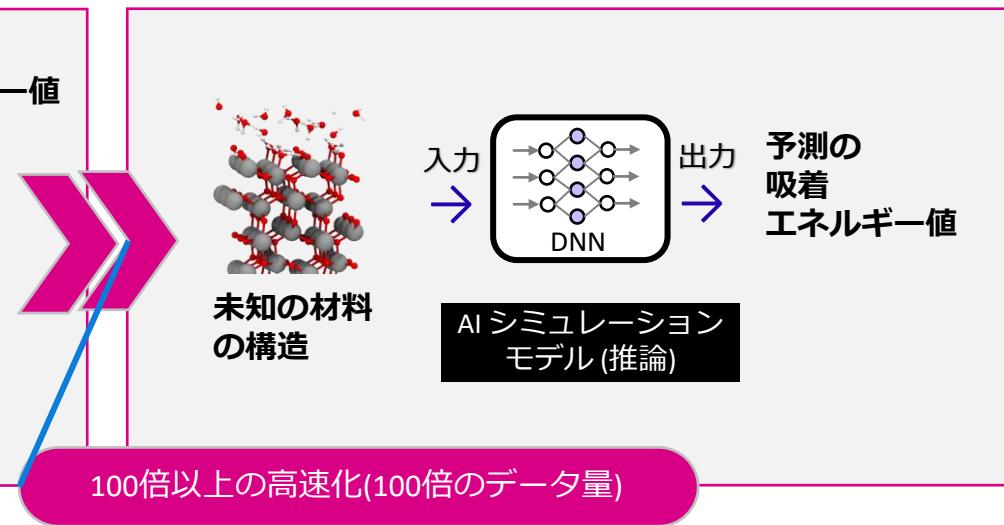
FUJITSU

- HPCで大量に実行したDFTシミュレーションデータをAIシミュレーションモデルに学習させ、未知の材料構造の吸着エネルギー値を瞬速で推論
→ **3000倍以上のデータ入手が可能になる**
- 大量データ生成により、探索範囲の拡大、因果発見技術の精度向上が図れる

量子化学(DFT)シミュレーション



DFTシミュレーションの AI シミュレーションモデルへの置き換え



材料探索向けNNの予測精度を改善する技術

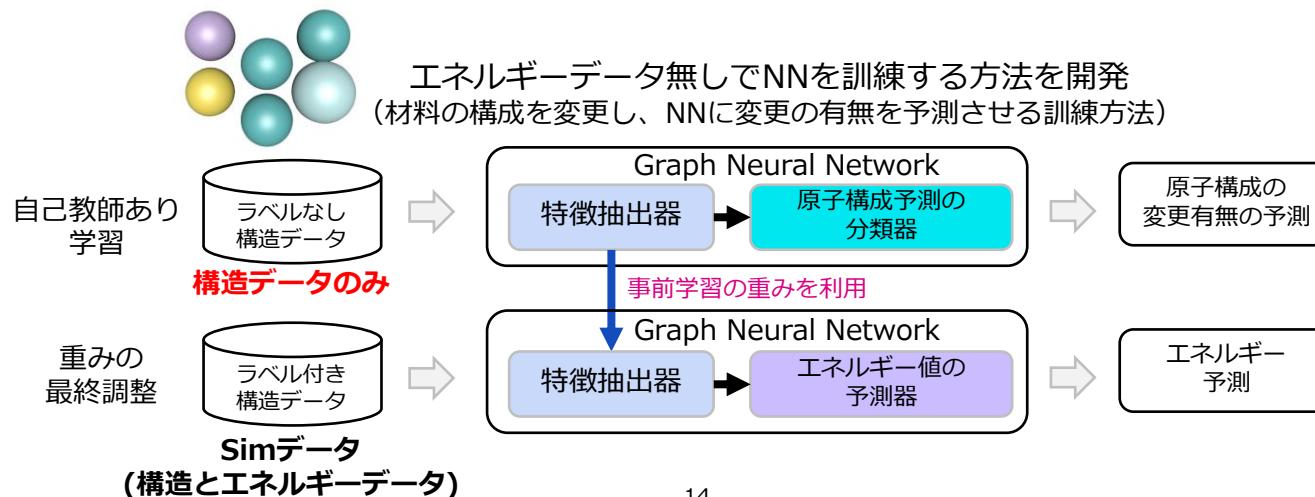
FUJITSU

● 背景・従来の課題

- 材料探索には、材料の「エネルギー」が性能指標に用いられる
- エネルギー予測精度の高いNNの実現に必要な大量のエネルギーデータを用意するには数十～数千時間かかる

● 開発技術

- エネルギーデータを増やさなくてもNNを高精度化する技術(触媒探索向け自己教師あり学習)を開発
 - データを増やさなくてもよい → データを用意する時間・費用が抑えられる
 - NNが高精度化 → より効率的な材料探索が可能となる



2. 分子動力学（MD）用 NNP生成ツール

分子動力学 (MD) シミュレーション

FUJITSU

N 個の原子から成る系の時間発展を運動方程式を解くことでシミュレーションする手法

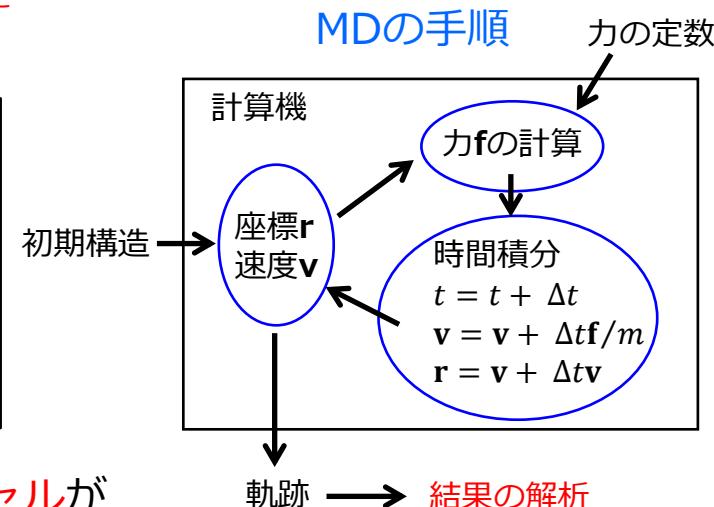
運動方程式 : $m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\nabla_i U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$

予め関数形が定義された
経験的ポテンシャル

MDの手順

- ① 初期構造 (原子の座標) の入力
- ② 原子の座標に基づき、原子に作用する力を計算
- ③ 運動方程式を数値積分して、原子の位置・速度を更新
→ ②, ③を繰り返すことで、時間発展を計算

- 対象とする系に応じて、種々の経験的原子間ポテンシャルが提案されている
- 予め関数形が定義された経験的ポテンシャルを用いるため、精度に限界がある



機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）について

FUJITSU

● シミュレーションを用いた材料開発の課題

- 古典MDシミュレーションで使用される**経験的ポテンシャルは精度が限定的**
- 第一原理計算は、高精度であるが、**時間がかかる**

→ これらを解決可能な技術：**機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）**



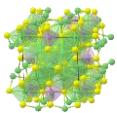
- しかし、MLIPを作成するには逐次的な手続きコストやノウハウが求められる

- 訓練データセットの作成
- MLIPの訓練と評価
- 外挿性がない場合のデータ拡張 ... etc.

- 多種多様なライブラリの使用方法
- 効率的なMLIPの訓練方法
- 効率的なデータセット拡張方法 ... etc.

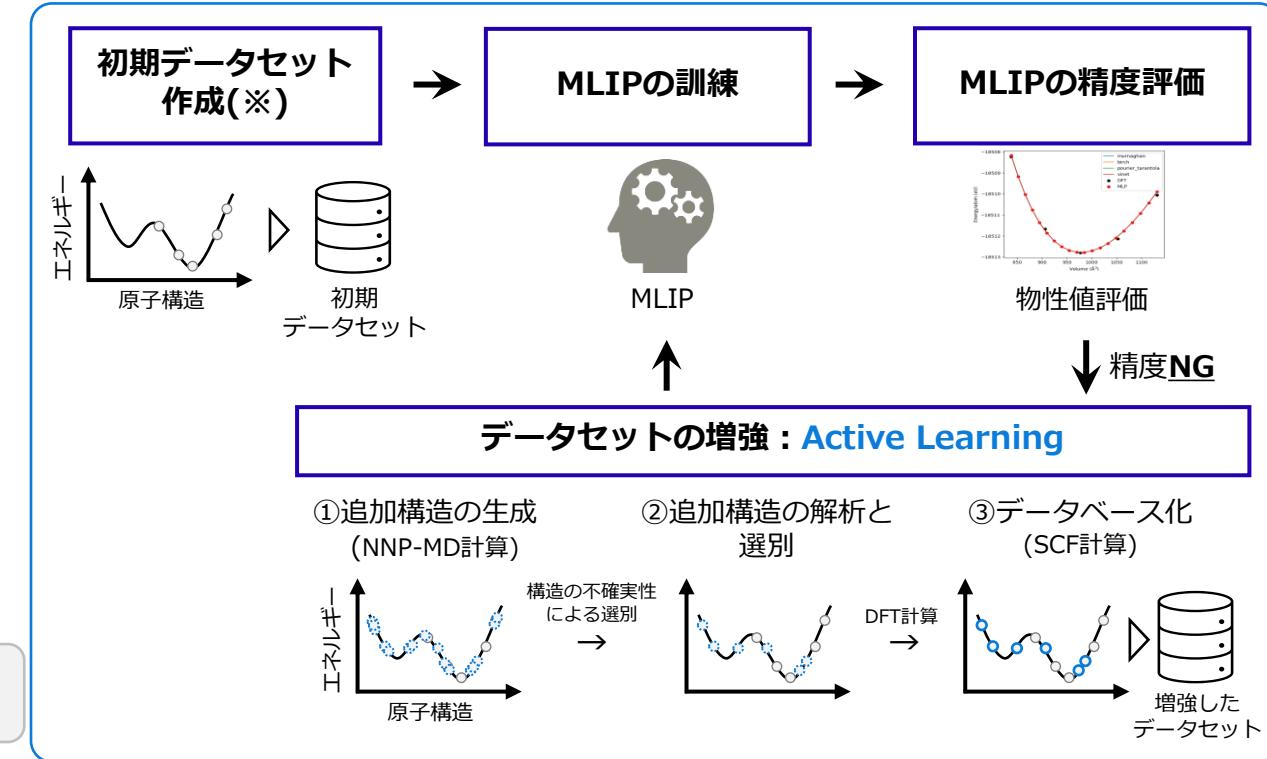
⇒ **MLIP自動生成ツールの開発**

MLIP自動生成ツール



初期構造

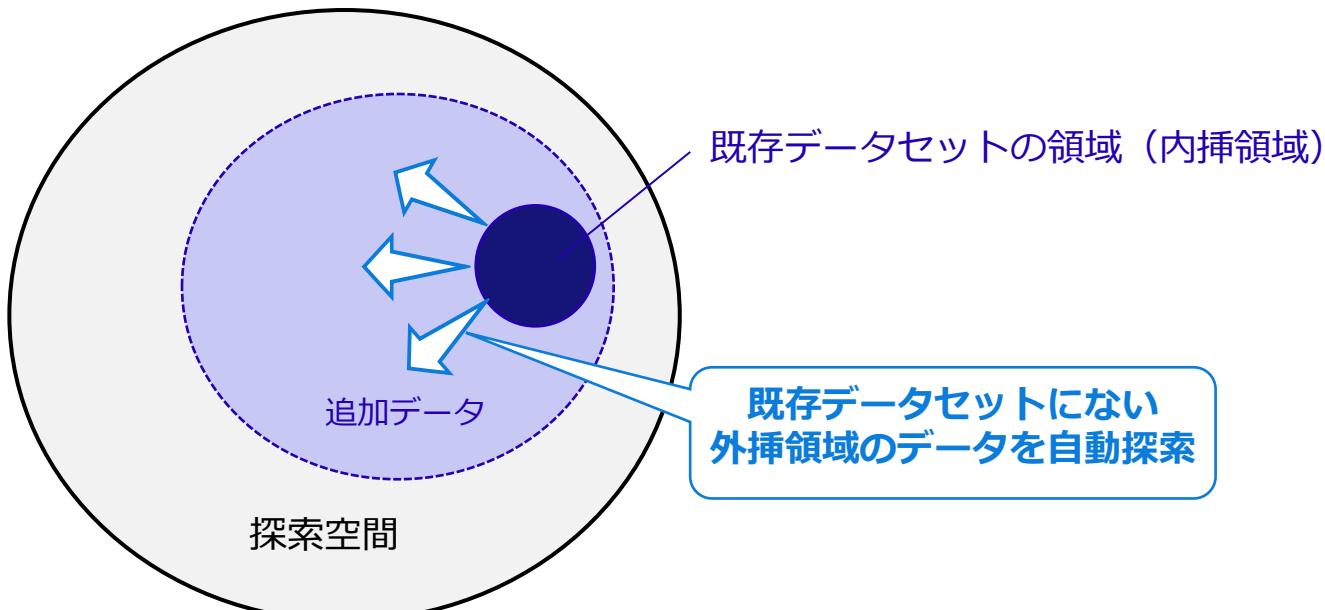
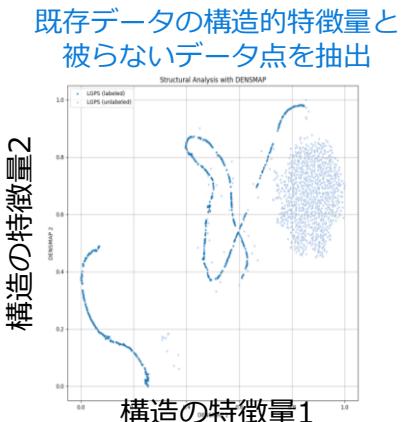
MLIP自動生成ツール



本ツールの利点（1/3）

FUJITSU

- ✓ **スクリーニング**：構造的な特徴量を計算し、構造類似度から既存データにない構造を抽出
→ 既存データ（内挿領域）にはない別の領域（外挿領域）のデータを自動生成



本ツールの利点 (2/3)



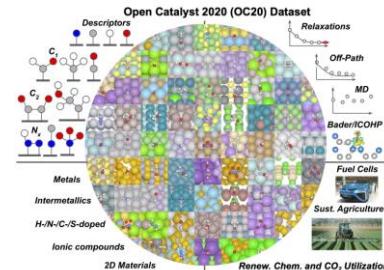
2. 事前学習済みAIモデルの活用

- ✓ 大規模データセットで学習した事前学習済み汎用GNNを活用可能

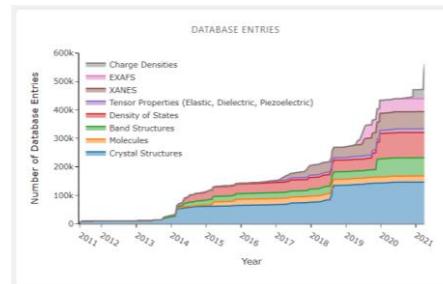
GNN	対象	学習した大規模データセット	データセットの構造数
PaiNN ^{※1}	触媒系	Open Catalyst ^{※2}	128万構造
M3GNet ^{※3}	電池、金属材料系	Materials Project ^{※4}	180万構造

※ただし、顧客データ領域を学習できていない場合、精度が大幅に低下してしまう

- ✓ 顧客データ向けにGNNを再訓練・データ追加生成 → 顧客データ領域における精度向上を実現



Open Catalyst^{※2}



Materials Project^{※4}

※1 <http://proceedings.mlr.press/v139/schutt21a.html>

※2 <https://opencatalystproject.org/>

※3 <https://www.nature.com/articles/s43588-022-00349-3>

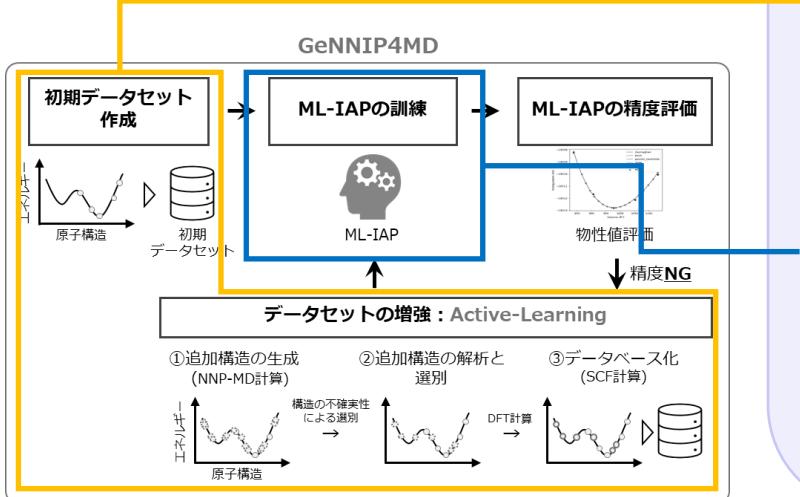
※4 <https://materialsproject.org/>

本ツールの利点 (3/3)

FUJITSU

3. 計算資源の使い分けによる高速データ生成＆高速訓練

- ✓ 处理に合わせた適切なアーキテクチャの選択
- ✓ 並列実行可能なActive-Learningアプローチ



◎数万オーダーのデータ作成から
MLIPの作成までを最短1日
で実行可能

機能一覧

FUJITSU

実行フェーズ	機能	説明	備考
データ 作成・増強	初期データ生成	AIMDによる構造生成	Ab Initio MDを活用、高精度なデータ生成
		摂動による構造生成	原子構造をランダムに変化、計算効率が良いデータ生成
	サンプリング	NVT Sampling	NVTアンサンブルを用いたMDによるサンプリング方法
		NPT Sampling	NPTアンサンブルを用いたMDによるサンプリング方法
		Deform Sampling	体積の強制的変化・非平衡MDによるサンプリング方法
	スクリーニング	Query by Committee	複数MLモデルを用いた構造の不確実性の評価
		特徴量距離による解析	MLモデル内部の特徴量解析による構造類似度の評価
	ラベリング (DFT)	VASP	計算効率が高い第一原理計算ソフトウェア
		Quantum ESPRESSO	幅広い物性計算が可能な第一原理ソフトウェア
		CPMD	Car-Parinello法を用いた第一原理計算ソフトウェア
MLIPの訓練	DeePMD-kit	大規模実行可能な機械学習ポテンシャルを生成可能	
	OpenCatalyst	触媒データ128万点を学習したGNNを配布	触媒材料に有用
	M3GNet	Materials Projectデータ180万点を学習したGNNを配布	電池、金属材料に有用
MLIPの評価	yyplot	エネルギー、力の精度評価	
	EOS (状態方程式)	体積を変化させたときのエネルギー評価	
	RDF (動径分布関数)	原子間距離分布の評価	

● MLIPの適用事例

- 「MLIPを活用したMD計算」と「第一原理計算や実験値」の結果が同等であることが確認できた事例

材料	組成	原子数	FJ計算実績	用途
電池	$\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$	1600	✓	全固体電池で利用される硫化物系の固体電解質
電池	$\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$	192	✓	全固体電池で利用される酸化物系の固体電解質
触媒	$\text{Pt}_3\text{Ni}, \text{H}$	272	✓	被毒されにくい燃料電池の電極
無機	Au	55	✓	金クラスター
電池	Y-doped BaZrO_3	5010	✓	燃料電池の固体電解質膜向けプロトン伝導体
有機	プロピレンジリコール	2808	✓	有機溶媒
有機ポリマー	ポリエチレンジリコール	担当にお問合せお願いいいたします	✓	有機溶媒
有機ポリマー	含水ナフィオン	担当にお問合せお願いいいたします	✓	燃料電池の電解質膜 含水率 : 0, 3, 6, 12, 18, 24

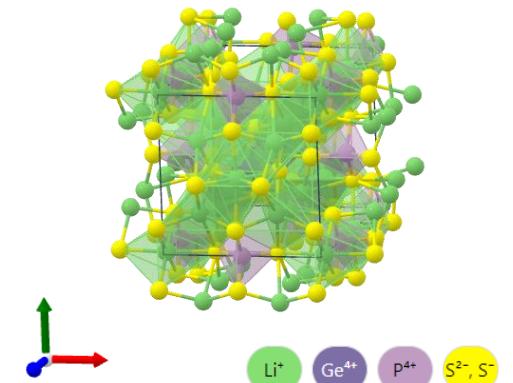
本ツールを用いた検証：LGPS (1/2)

FUJITSU

- リチウムイオン伝導体LGPS : $\text{Li}_{10}\text{Ge}(\text{PS}_6)_2$

- 高いリチウムイオン伝導度を示す硫化物系LGPSで、全固体電池の固体電解質として利用される
- 本ツールで生成したMLIPを活用し、1600原子でのLiイオンのMSDと拡散係数を導出した

設定項目	設定値
原子数	1600原子 (右図50原子を4x4x2に拡張)
アンサンブル	NVT
温度設定	600K ~ 1400Kまでの種々の温度 → 計8パターン
MDタイムステップ	0.5 fs
MDステップ数	2,000,000 ステップ
シミュレーション時間	1 ns

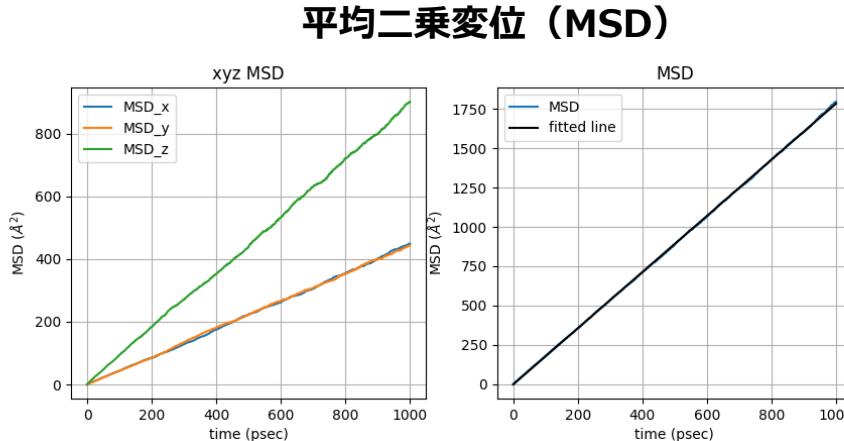


<https://materialsproject.org/materials/mp-696128>

本ツールを用いた検証：LGPS (2/2)

FUJITSU

- リチウムイオン伝導体LGPS : $\text{Li}_{10}\text{Ge}(\text{PS}_6)_2$
 - 計算結果



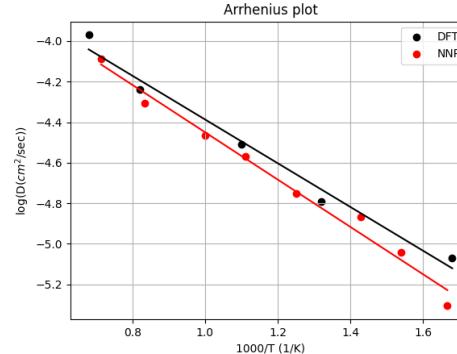
今回のLGPS構造では、Ge, P, Sが作る三角錐の影響で
x, y軸は拡散しにくく z軸方向に拡散しやすい^{※1}

⇒ MLIPはその傾向をよく再現できている

※1 : First Principles Study of the Li₁₀GeP₂S₁₂ Lithium Super Ionic Conductor Material,
Yufei Mo et al., Chemistry of Materials 2012 24 (1), 15-17

※2 : High-power all-solid-state batteries using sulfide superionic conductors,
Yuki Kato et al., Nat Energy 1, 16030 (2016).

拡散係数のArrhenius plot



活性化工エネルギー(meV)

MLIP	DFT ^{※1}	実験 ^{※2}
232	210	242

拡散係数、活性化工エネルギーのどちらも
DFTや実験値とよく一致している

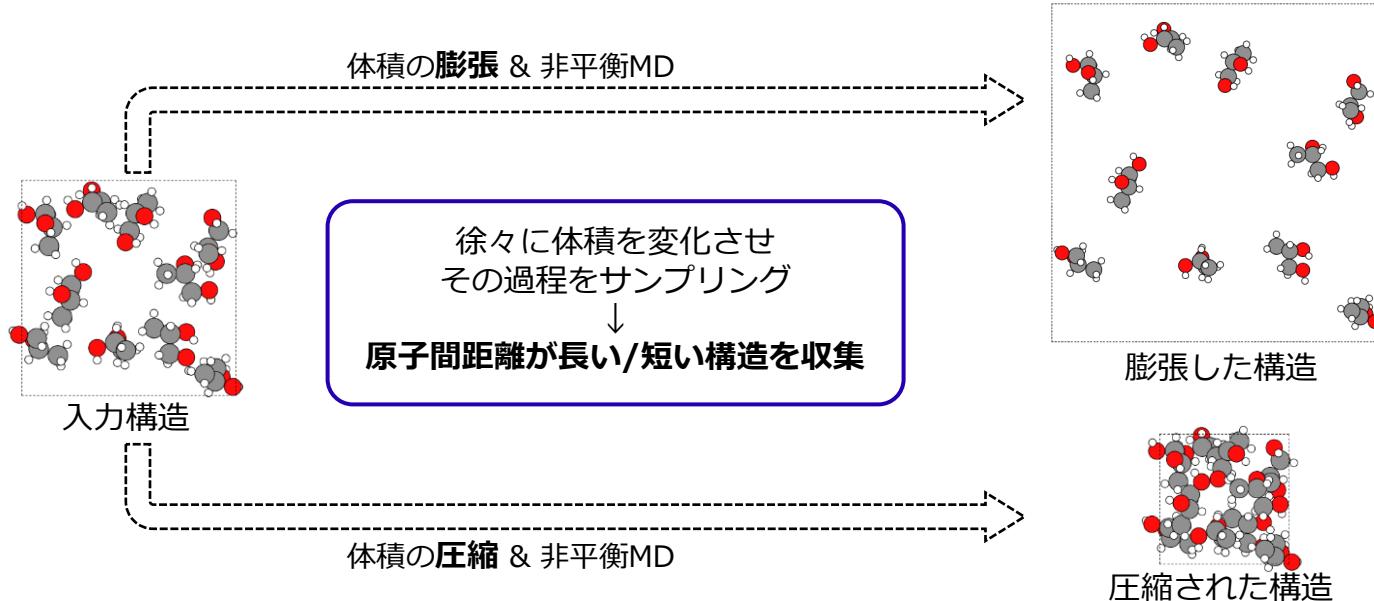
- 弊社で行った実験結果

題材	組成	用途	原子数	ポテンシャル生成時間 (4 GPUs)	MD原子数	MD時間 (NNP-MD)	MD時間 (AIMD) (予測)
LGPS	$\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$	全固体電池の固体電解質	50	約66時間	1,600	約4.4時間	約120年
プロピレンジリコール	$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}_2$	半導体基板の樹脂	130	約176時間	2,808	約45時間	約2,400年
Pt3Ni触媒の水素吸着	Pt_3Ni , H	燃料電池の電極触媒	34	約28時間	272	約10分	約3年

NNP作成条件
 NNP-MDの条件
 DFTの推定時間

各実験に対して、論文の結果と比較し、NNP-MDが十分な精度を導出していることを確認しております。

- Deform Sampling: 体積の強制変化によるサンプリング



有機溶媒にて、シミュレーション崩壊に対する防止効果を確認済み

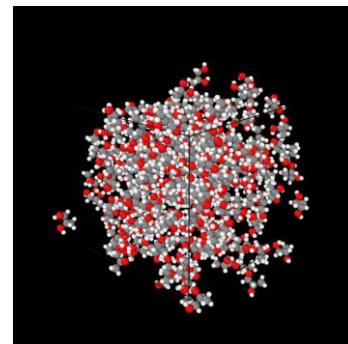
有機溶媒：プロピレン glycole

FUJITSU

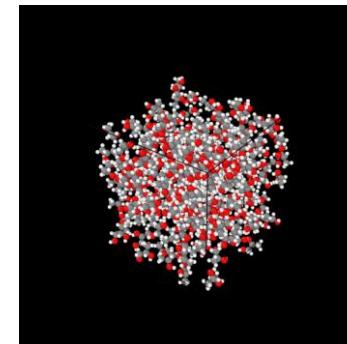
評価対象となる物性値を精度良く再現し、長時間MDシミュレーションを実現

	原子数	MD実行時間 [nsec]	密度 [kg/m ³]	自己拡散係数 [m ² /s]
従来技術では、途中で 機械学習MDが崩壊	実験値	---	---	1040 [2] 2.60×10^{-11} [3]
富士通ツールでは、 大規模系の長時間MDが 可能	従来	2,808	3.5	---
	富士通ツール	2,808	20	1060 5.34×10^{-11}

従来



富士通ツール



- ・水素の挙動が現実と乖離し構造が崩壊
- ・長時間MDが困難

- ・長時間MDでも拡散挙動を正しく再現
- ・分子構造を保持(崩壊しない)

[2] Kulcszewski, T.; Pleiss, J. A Molecular Dynamics Study of Liquid Aliphatic Alcohols: Simulation of Density and Self-Diffusion Coefficient Using a Modified Opls Force Field. *Mol. Simul.* 2013, 39, 754–767.
[3] D'Agostino, C. et al. Deactivation Studies of a Carbon Supported Apt Nanoparticulate Catalyst in the LiquidPhase Aerobic Oxidation of 1,2-Propanediol. *Catal. Sci. Technol.* 2014, 4, 1313–1322.

3. 因果発見技術

従来のAI

膨大なデータの中の相関関係を利用して予測

因果発見技術

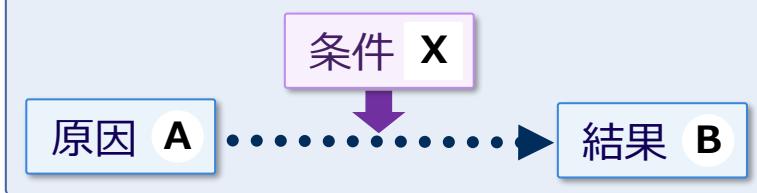
データから因果関係の法則を見出す

データ

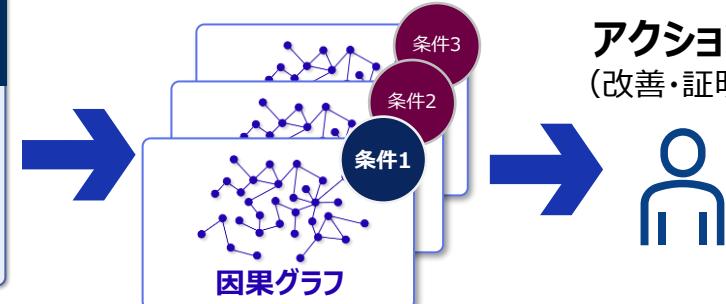


因果関係の法則

条件Xのとき因果関係A→Bが生じる



アクション
(改善・証明)



<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/12/17.html>

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/03/7.html>

膨大なデータから現場の個々の条件において現れる重要な因果関係を発見

ヒトの全遺伝子間の因果関係を解析

従来4000年かかる全2万遺伝子間の大規模因果探索を「富岳」で1日で完了

因果関係の仮説と新発見の可能性

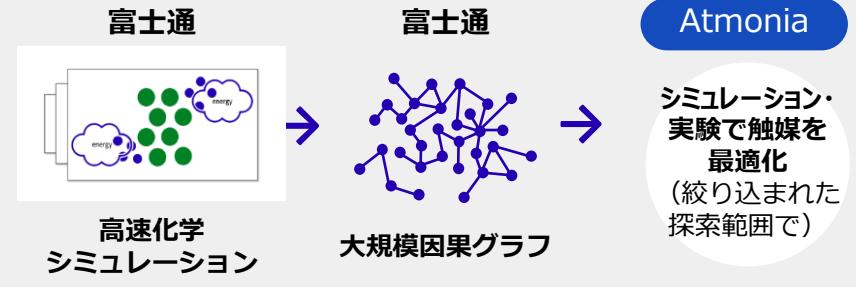


肺がんの治療薬として知られる「ゲフィチニブ」の耐性獲得メカニズムの新仮説を抽出

アンモニアをクリーンに合成する新触媒を探索

水と空気（窒素）と電気のみでカーボンフリーにアンモニアを合成する革新的な新触媒の開発を加速

個別因果で新触媒候補を絞り込み



アンモニア合成方法の開発を行うアイスランドのベンチャー企業Atmonia社との共同研究を実施

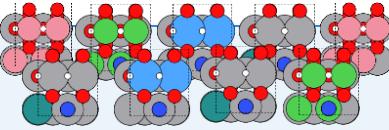
材料探索における重要な因果関係の発見

FUJITSU

データ全体に共通する因果関係だけでなく、
条件ごとのデータに特徴的な因果関係を網羅的に抽出可能

サンプル構造全体

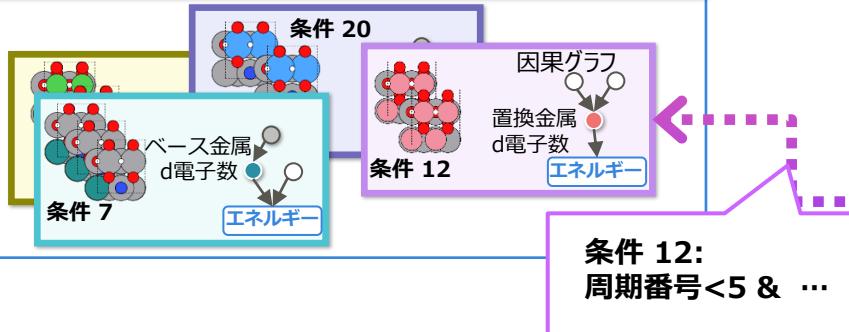
1,000 サンプル



特徴量:
ベース金属元素, 置換金属元素,
周期番号, 族番号,
(ベース/置換)最外d電子数,
活性サイト1, 活性サイト2,
終端状態1, 終端状態2など

探索空間 :
>1,000,000 条件

特徴的な因果関係を持つ構造の集団を網羅的に抽出



データ全体に対する重要な因果関係

順位	特徴量	エネルギーに対する因果効果
1	特徴量A	-0.58
2	特徴量B	-0.31
...
50	置換金属d電子数	0.06

重要でない

特定条件(条件12)に対する重要な因果関係

順位	特徴量	エネルギーに対する因果効果
1	特徴量X	-1.28
2	置換金属d電子数	-1.25
...

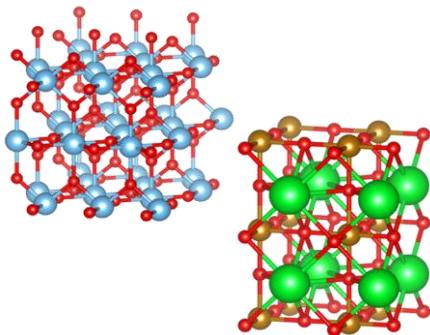
重要!

構造データ作成とシミュレーションで得たデータを基に、因果発見でより高性能な構造の探索領域を把握、次の探索に活かすことで、開発コストを削減

分析結果を次の探索ステップに活用する

1 構造データ作成

探索したい材料の構造データを作成する



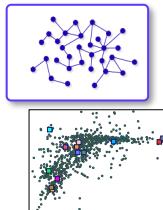
2 量子化学シミュレーション

量子化学シミュレーション(DFT)により、安定構造やエネルギーなどの物性を計算する



3 因果発見

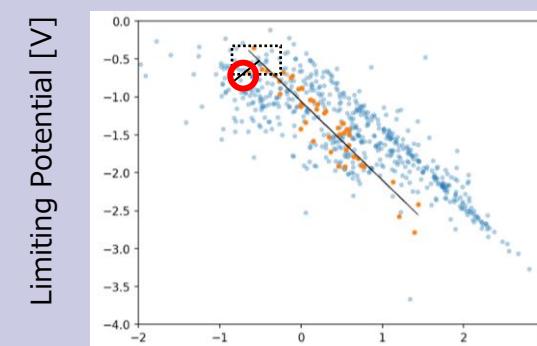
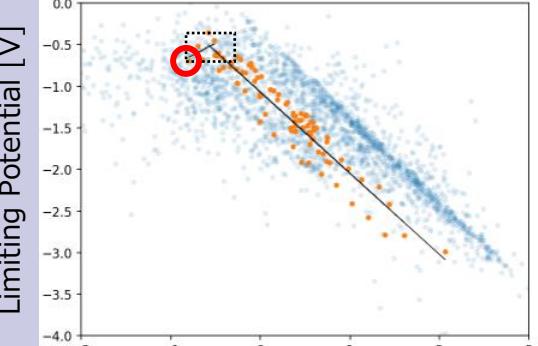
構造と物性間の因果関係を分析し、新たな気付きや納得感を得る



アンモニア合成の触媒探索の事例ご紹介

FUJITSU

アンモニア合成の合金触媒探索で、因果発見により、シミュレーションする構造数を**1/3以下**に削減しつつ、網羅的探索と同じ最終候補の選択に成功

	因果発見利用あり	因果発見利用なし
シミュレーションする構造数	612 (28%)	2184 (100%)
アンモニア合成可能な構造数	100	289
最終候補(W置換したMoO ₂)が選択されているか		

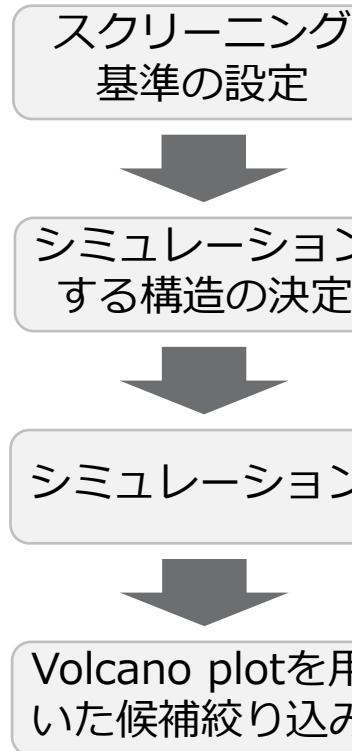
※右図で赤丸が最終候補、青点がシミュレーションする構造、橙点がアンモニア合成可能な構造を示す。

最終候補(赤丸)が選択されている。合成可能な構造数は利用なしより少ないが、最終候補が山形頂点に近い許容範囲内(四角の点線内)にあり、最適候補であると確認できる。
34

最終候補(赤丸)が選択されている

従来（因果発見利用無し）のスクリーニング

FUJITSU



基準1(N_2 吸着の選択性): $\Delta G_{N_2} < 0.1\text{eV}$ & $\Delta G_H > 0$ at 0V vs. RHE
基準2(NRR反応性): $\Delta G_{N_2 \rightarrow NNH} & \Delta G_{NH_2 \rightarrow NH_3(g)} < 0.85\text{eV}$
基準3(ドーピングパターン対応性)
基準4(安定性)

あらゆる全ての2184構造

全ての2184構造をDFTシミュレーション

基準を満たす61構造に絞込み

従来（因果発見利用無し）の絞り込みの流れ

FUJITSU

あらゆる全ての構造



基準 1 を満たす構造に絞込み

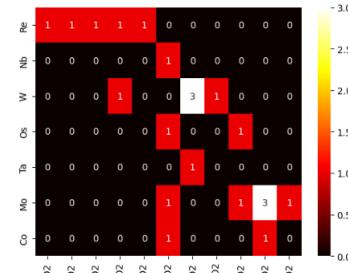
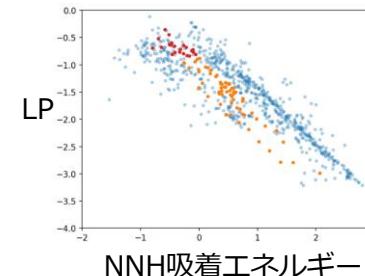
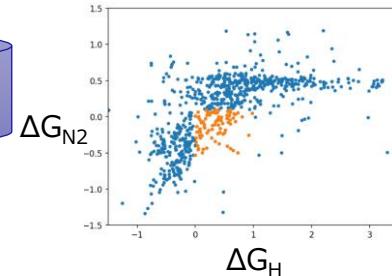


基準 1 かつ 2 を満たす構造



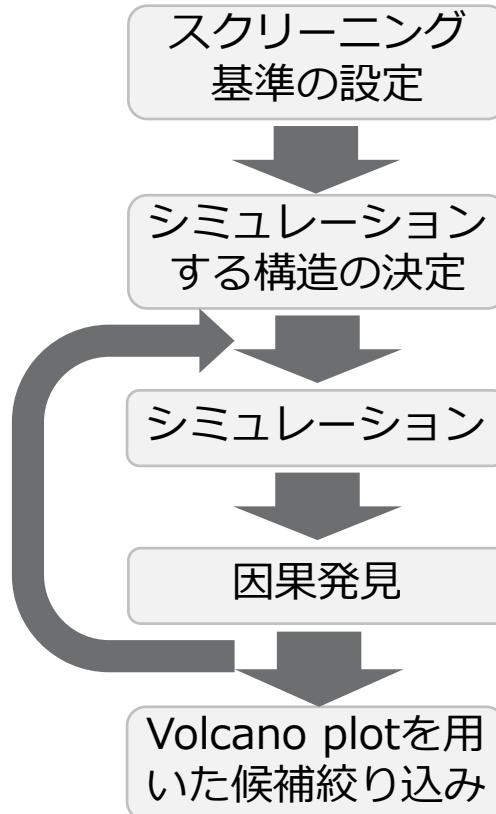
基準1と2を満たす構造
は61/2184 (2.7%)

最有力候補 (W doped MoO₂)



ドーピングパターン対応性

今回（因果発見利用あり）のスクリーニング



基準1(N_2 吸着の選択性): $\Delta G_{N_2} < 0.1\text{eV}$ & $\Delta G_H > 0$ at 0V vs. RHE
基準2(NRR反応性): $\Delta G_{N_2 \rightarrow NNH} & \Delta G_{NH_2 \rightarrow NH_3(g)} < 0.85\text{eV}$
基準3(ドーピングパターン対応性)
基準4(安定性)

あらゆる全ての2184構造

因果発見が示す高性能な構造条件から
選択した構造をシミュレーション

これまでのシミュレーションデータから
因果発見でより高性能な構造条件を把握

今回（因果発見利用あり）の絞込みの流れ

FUJITSU

ランダムに選択

因果で高性能と把握した構造条件から選択し追加

因果でさらに高性能と把握した構造条件から選択し追加

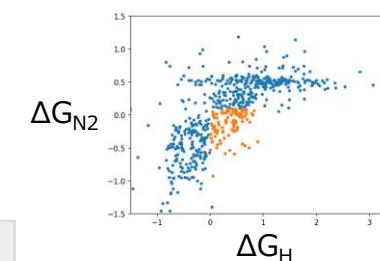
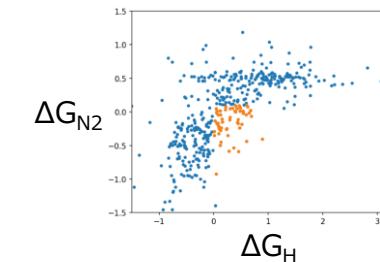
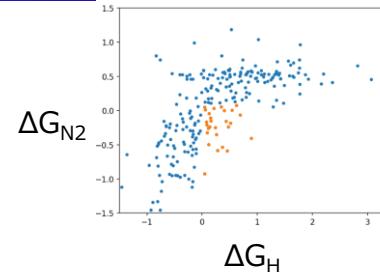
取得したデータからより高性能な探索領域を絞り込み可能なため、網羅的に構造を調べる必要がない

構造数：238

構造数：
 $238+200=438$

構造数：
 $438+174=612$

最有力候補 (W doped MoO₂)



基準1内：27
基準1外：211

基準1内：58
基準1外：380

基準1内：100
基準1外：512

基準1,2を満たす数の比較



	従来手法（網羅的探索）	因果による探索
使用した構造数	2184	612 (28.0%)
基準1を満たす構造数	289	100 (34.6%)
基準1,2を満たす構造数	61	19 (31.1%)
最も性能の良い構造	W doped MoO ₂	W doped MoO ₂

因果発見により、シミュレーションする構造数を1/3以下に削減しつつ、網羅的探索と同じ最終候補の選択に成功

- 弊社が開発を進めている材料探索プラットフォームのコンポーネントの中から、以下の3つについてご紹介しました。
 - ハイスループットスクリーニング向けニューラルネットワーク（NNP）生成ツール
 - 分子動力学（MD）シミュレーション向けNNP生成ツール
 - 因果発見技術
- Atmonia社との共同研究において、HPCとAIを連携させたスクリーニングと因果発見技術により、新たなアンモニア合成触媒の同定に成功しました。
- MDシミュレーション向けのNNPを自動生成可能なツールを開発し、無機・有機系の種々の題材において、ツールの有効性を実証しました。
- 今後も、HPCとAIを活用した材料探索プラットフォームの深化を進め、脱炭素化社会の実現に向けたコア技術の開発を進めていきます。

- 本研究成果の一部は、産業技術総合研究所のスーパーコンピュータ「AI橋渡しクラウド（ABCi）」及び理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」を利用して得られたものです

FUJITSU

