

2025/12/8 マテリアル戦略有識者会議

Matlantisにおける 基盤モデル構築・人材育成の取り組み

Matlantis 株式会社 経営企画部長
瀬川晶子

Matlantisについて

Matlantis : 材料開発のためのAI原子レベル シミュレーション



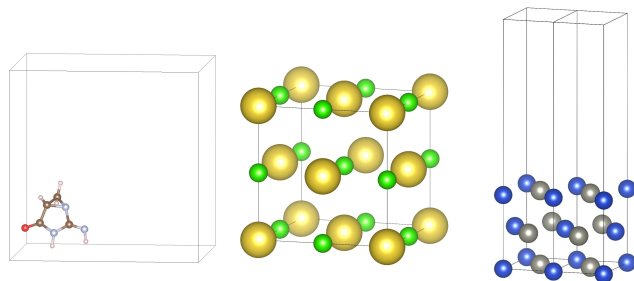
2021年6月1日に設立

3社のジョイント・ベンチャー:



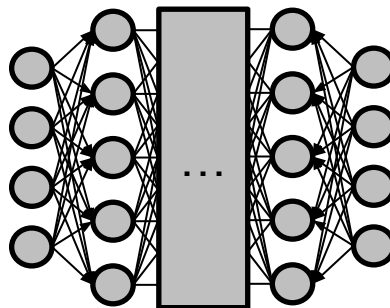
材料候補

研究者が調べたい新材料

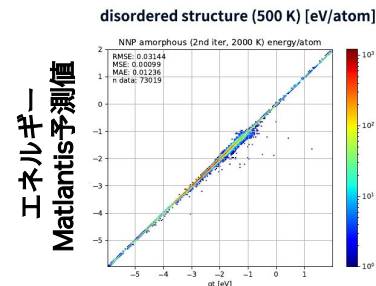


独自AIモデル: PFP

(基盤モデル/ 機械学習原子間ポテンシャル)



候補材料の特性を 高精度に予測



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



80M 倍

3,000原子でのDFT計算と
比較した場合

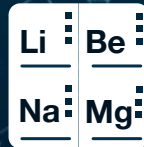
最大対応原子数



44k 原子

Professional Planで
Pt bulkの場合

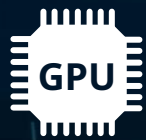
対応元素数



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



2,700 年

6,200万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



150+

企業および学術機関
などの団体

累計原子数



73T 原子

2022年11月～2025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

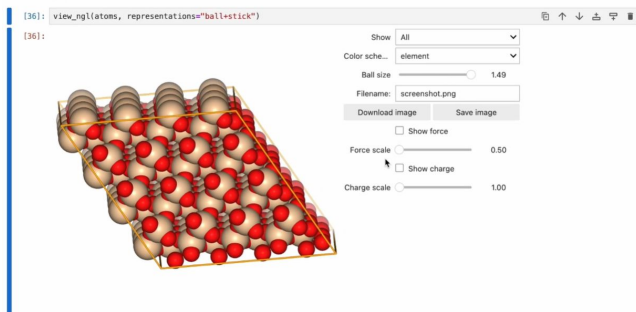
PFP v8 2025年11月現在

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橋渡しクラウド（ABCi）を用いて開発されました。

© Matlantis Corporation

Matlantisでのシミュレーションの様子

モデリング→計算→可視化・物性予測をブラウザ上で完結



材料のモデリングを行い

```
Dyn step: 26, energy: -3673.649
Dyn step: 27, energy: -3673.661
Dyn step: 28, energy: -3673.678
Dyn step: 29, energy: -3673.675
Dyn step: 30, energy: -3673.675
Dyn step: 31, energy: -3673.678
Dyn step: 32, energy: -3673.668
Dyn step: 33, energy: -3673.648
Dyn step: 34, energy: -3673.636
Dyn step: 35, energy: -3673.624
Dyn step: 36, energy: -3673.616
Dyn step: 37, energy: -3673.612
Dyn step: 38, energy: -3673.615
Dyn step: 39, energy: -3673.622
Dyn step: 40, energy: -3673.634
Dyn step: 41, energy: -3673.649
Dyn step: 42, energy: -3673.664
Dyn step: 43, energy: -3673.677
Dyn step: 44, energy: -3673.687
Dyn step: 45, energy: -3673.691
```

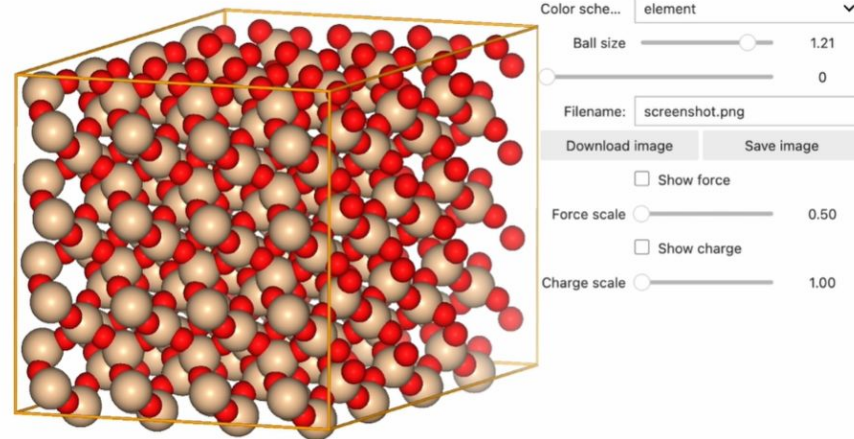
```
[ ]: from pfcc.extras.visualize.view import view_ngl
      traj = Trajectory("output/dyn.traj")[:15]
      view_ngl(traj, representations=("ball+stick"))

[4]: from pfcc.extras.visualize.povray import traj_to_gif, traj_to_gpg
      from IPython.display import Image

      traj_to_gpg(traj, "output/is2-md.png", rotation="38x,38y,38z", clean=True, n_jobs=16, width=600)
      Image(url="output/is2-md.png") # .: width=150
```

計算を実行

[38]:



原子の動きが可視化できます
新材料の物性も予測できます

原子シミュレーションが切り拓く材料開発の革新

Matlantisは実験の量と質の向上に貢献

従来手法
(DFT計算)



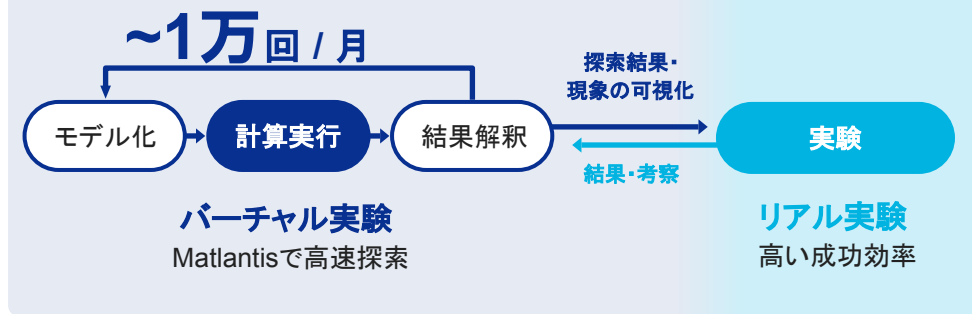
見えない

- 現象観察が困難

組合せが膨大

- 探索空間が膨大

大規模スクリーニングによるMatlantis駆動型の新素材探求



見える・分かる

- 実験と同期するスピード感で、現象の可視化が可能に

効率的な探索

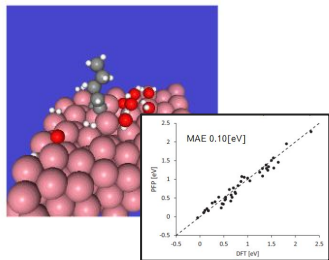
- バーチャル実験で高速なスクリーニングが可能に



代表的な適用分野



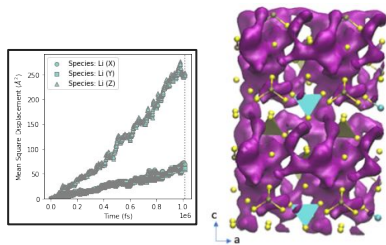
触媒



Large scale screening for optimal dopant species



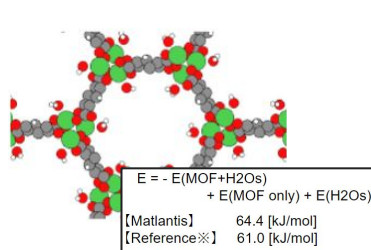
バッテリー



Li diffusion in solid electrolyte



吸着剤

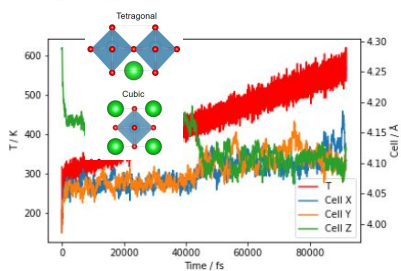


Adsorption energy in MOF

次の時代を支える
多くの新材料開発に
Matlantisは使われて
いる



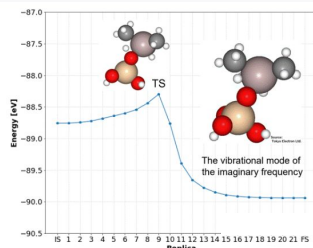
セラミックス



Phase transition in BaTiO3



半導体



Reaction analysis of trimethylaluminum



高分子



磁性体



金属

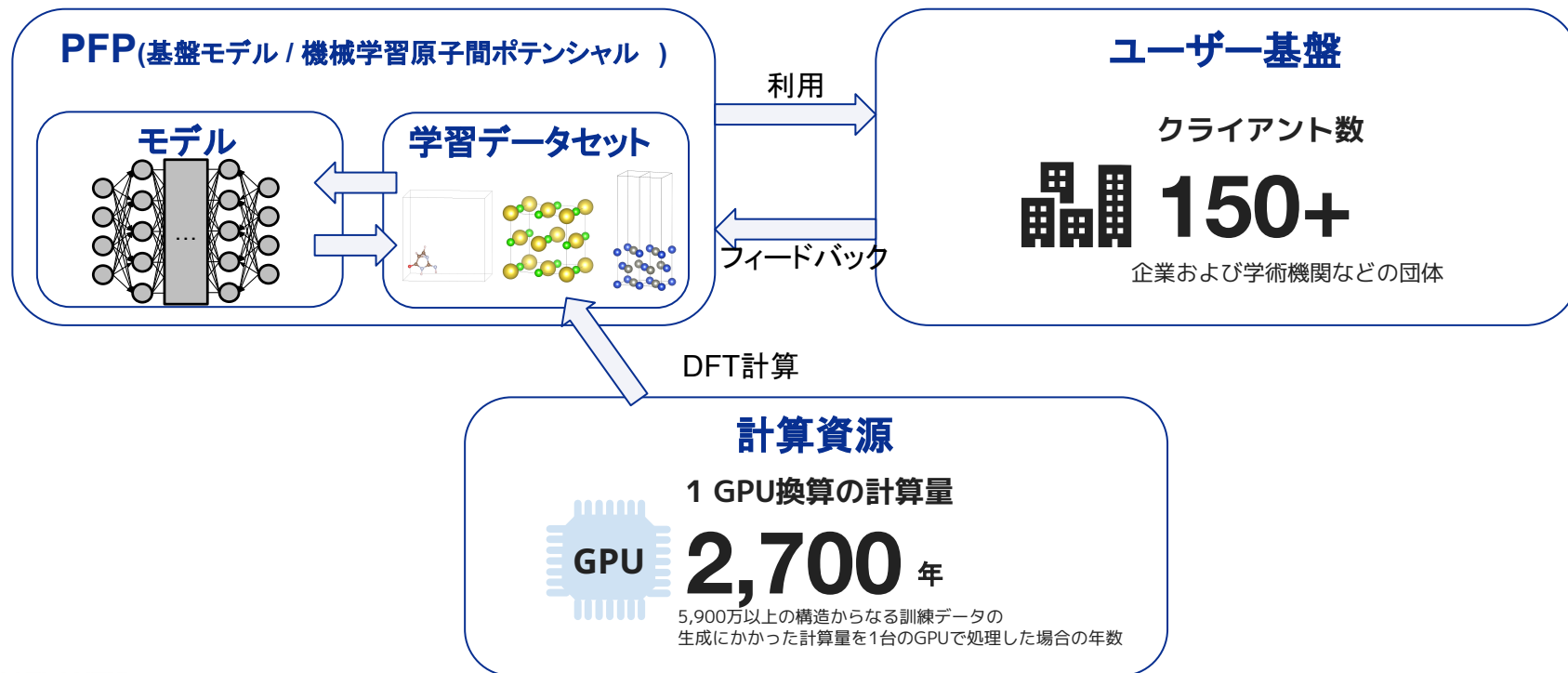
⋮

その他の
多くの分野
で利用

基盤モデル(PFP)構築の取り組み

基盤モデル構築におけるMatlantisの強み

- 材料開発での実ニーズに基づき、モデルアーキテクチャと学習データセット双方を継続開発
- 計算資源への投資を継続し、1GPU換算で2700年分の計算量の学習データセットを構築



基盤モデルの継続的な改善

約半年に1度モデルを更新・改善し、サポート可能な元素数、系のサイズ、対象材料を拡大

	2021.06	2022.08	2023.10	2024.04	2024.09	2025.07	リリースからの 改善幅
PFP Version	v1	v3	v5	v6	v7	v8	
主な 進化内容	D3 correction (v1.1)	元素数の拡大。 高速実行を実現 するためPFVM を利用	原子間の相互 作用の取り扱 いを改善	モデルで 新アーキテク チャ採用	自然界に 存在するすべ ての元素をサ ポート	r ² SCAN汎関数 の採用	
対応 汎関数	PBE/+U	PBE/+U	PBE/+U	PBE/+U	PBE/+U	PBE/+U r ² SCAN	
対応 元素数	55	72	72	72	96	96	
対応最大 原子数	3,000	10,000	19,000	44,000	44,000	44,000	
学習 データ数	10 × 10 ⁶	22 × 10 ⁶	42 × 10 ⁶	42 × 10 ⁶	59 × 10 ⁶	62 × 10 ⁶	+41 ~15x ~6x

* 対応最大原子数については、ユーザープランによって対応数が異なる

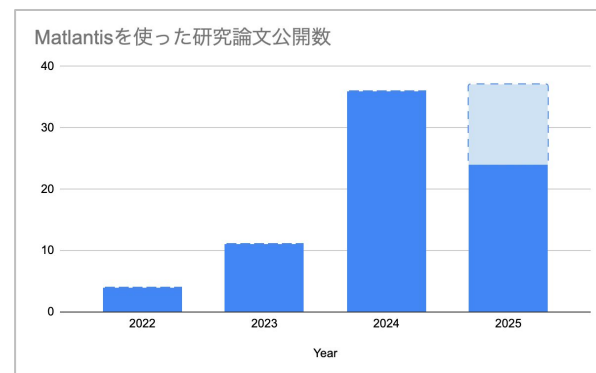
* 学習データの質・多様性についても大きく改善し続けている

人材育成の取り組み

アカデミアでのMatlantis利用状況と課題

- 国内外の研究室にてMatlantisの導入が進んでいる
 - 既にMatlantisを使った研究論文は、弊社Web掲載許可をいただいたものだけで、70超発表されており、急速に増えてきている
 - 学会でのMatlantisに関係する発表は、有難いことに、追いきれないほど

- [公開論文事例 | Matlantis](#)



- アカデミア価格での提供をしているが、学振の予算や若手研究者の予算での購入は困難と言う声もありジレンマ抱えている
- 計算化学ソフトウェア(オンプレ前提)をスパコンで共通利用できる枠組みは前例があるが、クラウド前提での開発をしているサービスでも同様に広くアカデミアで活用可能にするには新しい枠組みの検討が必要

人材育成の取り組み

- 高速に結果が出る汎用的なシミュレーションは教育との相性が高く、様々なテーマや形態での講義、講座を開催。インターンや授業向けのライセンス提供も実施

Matlantisが関わる講座・講義の例

講義名	対象	概要
<u>プラクティススクール</u>	博士課程学生	6週間にわたり参画企業の研究現場に常駐し、Matlantisを活用しながら、実際の開発課題を遂行
<u>ベンチャービジネス特論Ⅰ</u>	理工系大学院生	大学の研究成果を社会に実装していくために必要な「事業化」の視点と実践的な知識を、Matlantisの事業化を事例に学ぶことを目的とした講義
<u>最先端理工学実験(Matlantis)</u>	理工系大学院生	Matlantisを用いた、化学シミュレーション実験の実習

データ駆動型材料科学研究会の立ち上げ支援

- データ駆動型材料科学研究会の活動及び目的に賛同し、発足を支援
 - 当社代表取締役の岡野原が発起人兼理事の1人を務め、事務局長も当社より選出
 - 本研究会はMatlantisとは独立した団体として独自に運営
- データ駆動型材料科学の発展、ひいてはマテリアル分野での産業競争力の強化には、データ科学と材料科学の分野横断的な連携や人材育成が不可欠

研究会活動概要(HPより抜粋)

(1) 学術集会、ワークショップ、セミナー等の開催	(2) 内外の関連学協会との連携、協力
データ駆動型材料科学に関する最新の研究成果・技術動向を共有する場を提供する。 研究者・技術者の交流と知識循環を促進することで、知見の共有・普及を支えることを目指す。	国内外の学術団体・協会と連携し、情報交換や共同企画を通じて相互の知見を高める。 分野横断的なつながりや標準化の促進により、科学技術力・産業競争力の強化を目指す。
(3) 関連技術や知見の普及振興	(4) 人材育成
関連技術や知見を社会・産業界へ発信することで、分野の認知拡大と社会実装の加速を目指す。 これにより、技術基盤の底上げと分野全体の発展に寄与する。	習熟度・目的に応じた各対象者向けに、学習の機会を提供する。 系統的な学びを通じて人材の裾野を広げることで、持続的な分野の成長と人材循環の実現を目指す。

※その他、本会の目的を達成するために必要な活動を行う

© Matlantis Corporation. All rights reserved.

