

ABCI 3.0開発加速利用（2024年度）成果概要（公開用）

課題名：材料開発を加速させる汎用ニューラルネットワークの研究開発

実施時期：2024年4月～2025年3月（開発加速利用：2025年1月～2025年3月）

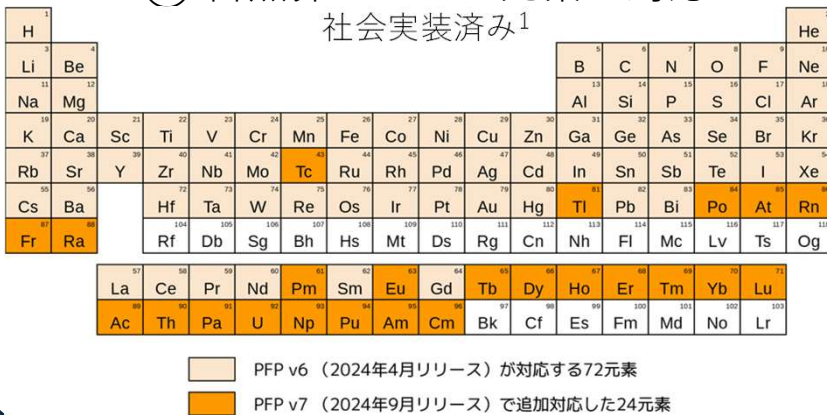
所属機関名：株式会社 Preferred Networks

代表者氏名：品川 幾

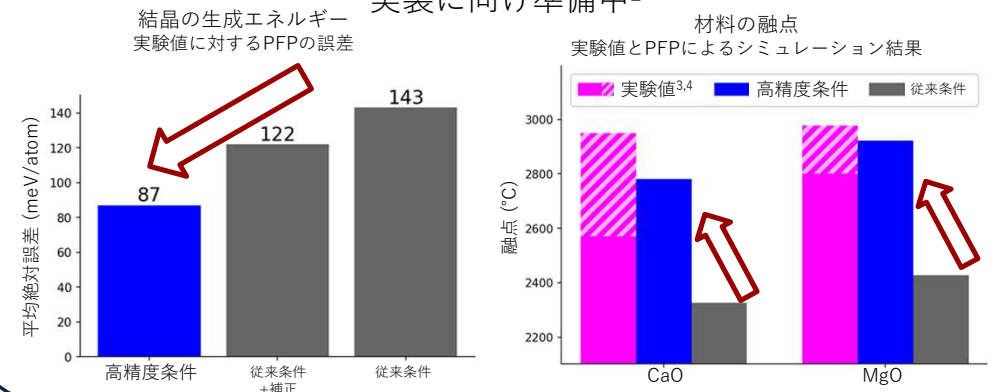
成果概要：本課題では、材料科学における原子スケール基盤モデルとして、汎用Neural Network Potential (NNP)であるPFPの研究開発を行った。弊社がこれまで構築してきた独自のデータセットを拡張することで自然界に存在する全ての元素に対応し、対応元素種の観点で真に汎用なNNPであるPFP v7を実現した。加えて、より高精度な条件でのデータセットを構築・学習することで、実験値の再現性の大幅な向上にも成功した（PFP v8として社会実装準備中）。

成果のポイント：本成果は100以上の企業・研究機関に提供され^{1,2}、半導体・電池材料・触媒などの材料開発に活用される

① 自然界の全ての元素に対応 社会実装済み¹



② 実験値の再現性の向上に成功社会 実装に向け準備中²



1: 株式会社Preferred Computational Chemistryが提供するSoftware-as-a-ServiceであるMatlantis™において、PFP v7としてリリース済み

3: S Liang and R.Schmid-Fetzer. *J. Eur. Ceram. Soc.* 38.14 (2018): 4768-4785

2: Matlantis™において、PFP v8としてリリースに向け準備中

4: 融点の実験値は文献や測定方法により異なる。斜線で示す領域が3.で報告されている実験値の範囲である

成果についてより詳細な情報を提供しているWebページ、発表論文などの情報：
プレスリリース

“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” <https://www.preferred.jp/ja/news/pr20240917/>

学会発表

- S. Takamoto, et al. “Support for 96 Elements and Improved Robustness of Universal Neural Network Potential PFP” *2024 MRS Fall Meeting & Exhibit* (2024)
- C. Shinagawa, et al. “Towards r2SCAN-level Universal Neural Network Potential for Materials Discovery” *2024 MRS Fall Meeting & Exhibit* (2024)