

プレスリリース

報道関係者各位

HPCシステムズ株式会社
代表取締役 小野 鉄平
(コード番号:6597 東証マザーズ)
問合せ先 取締役管理部長 下川 健司
(電話番号:03-5446-5530)

HPCシステムズ、効率的に材料開発を行う新材料開発手法 マテリアルズ・インフォマティクスの分子構造生成方法及びプログラムを特許出願

ハイパフォーマンスコンピューティング分野のニッチトップ企業である HPC システムズ株式会社(本社:東京都港区、代表取締役 小野 鉄平、以下 HPC システムズ)は、マテリアルズ・インフォマティクス(以下 MI)分野のプログラム開発において、画期的な分子構造生成アルゴリズムの開発に成功したことから、この度特許出願を行いましたのでお知らせします。

【MI(マテリアルズ・インフォマティクス)とは】

MI とは、素材・材料開発分野においてビッグデータ解析や人工知能(AI)技術を活用し、素材・材料開発のコストダウンやスピードアップを可能にする新しい手法です。

従来の素材・材料開発における分子設計は、所望の物性を有する分子構造を研究者が考え、分子軌道(MO)法等の計算化学手法により物性を予測し、良い物性を発現する可能性の高いものを実際に合成加工するというものです。現在でもこの方法が研究開発の主流となっておりますが、この方法では、新素材・新材料の開発が研究者の経験と勘に委ねられてしまいます。

一方、近年の新しい流れとして、大量のデータに基づいた機械学習(ML: Machine Learning)技術を利用し、シミュレーションに依らず短時間で物性を推定する手法の開発が進みつつあります。

【特許出願の概要】

HPC システムズは、機械学習と計算化学技術を組み合わせることにより、蓄えられたデータが無い場合でも所望の物性を入力するとその物性を有する分子構造を提案する MI ソフトウェアの開発に取り組んできました。このソフトウェアの分子構造生成アルゴリズムを鋭意検討の結果、画期的なアルゴリズム開発に成功し、この度特許出願を行いました。

【出願の意義】

現在、実際の研究開発現場で利用できるより使い易いソフトウェアを目指して開発を続けております。HPC システムズは、2006 年の会社設立以来、「人とコンピューティングの力で世界平和に貢献する」という経営理念、「人の創造力とコンピューティングを融合させ未来をつくる企業になる」というビジョン、「研究者には研究する力、開発者には製品を開発する力を提供すること」というミッションを掲げ、素材・材料研究開発のマテリアルサイエンス分野を重点事業領域と位置付けて、大手製造業と大学官公庁の最先端研究開発向けに、量子化学計算をはじめとする計算化学アプリケーション、高性能システムに関する技術力と知見を活かした様々なソリューションを展開してまいりました。更に独自の MI プログラム開発を推進し、革新的な素材・材料研究開発を支援することを通して、持続可能な社会の実現に向け、新たな価値創造に貢献してまいり所存であります。

【HPC システムズについて】

HPC システムズ(<https://www.hpc.co.jp/>)は、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)分野のニッチトップ企業です。科学技術計算用高性能コンピュータとシミュレーションソフトウェア販売、科学技術計算やディープラーニング(深層学習)AI 環境を構築するシステムインテグレーションサービス、シミュレーションソフトウェアプログラムの並列化・高速化サービス、計算化学ソフトウェアプログラム、マテリアルズ・インフォマティクスアルゴリズム開発・販売、受託計算サービス・科学技術研究開発支援、創薬研究開発や素材・材料研究開発分野向けサイエンスクラウドサービスまでをワンストップで提供しています。

社 名 HPC システムズ株式会社

所在地 東京都港区海岸 3 丁目 9 番 15 号 LOOP-X 8 階

設 立 2006 年 7 月 3 日

資本金 2 億 367 万円 (2020 年 12 月末現在)

代表者 代表取締役 小野 鉄平

お問い合わせ

HPC システムズ株式会社

https://www.hpc.co.jp/contact/company_form/