

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)

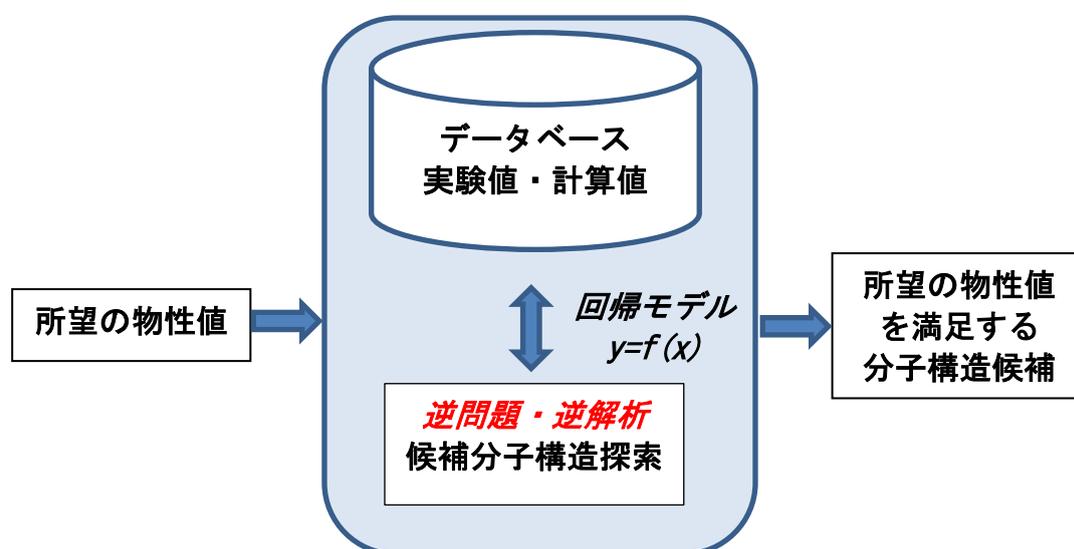
問合せ先 取締役管理部長 下川 健司

(電話番号: 03-5446-5530)

HPCシステムズ、効率的な新材料開発のための マテリアルズ・インフォマティクス(MI)ソフトウェアを開発、リリース

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、機械学習と計算化学技術を組み合わせ、「逆問題・逆解析」の手法を用いて、所望の物性値からその条件を満たす分子構造の候補を導き出すマテリアルズ・インフォマティクス(MI)ソフトウェアを開発しましたので、お知らせいたします。

同マテリアルズ・インフォマティクスソフトウェアは、所望の物性値を入力すると、当社独自のアルゴリズムにより、多様な分子構造を探索するとともに、分子構造から物性値を計算・評価し、所望の物性値を満足する分子構造候補を提案します。また、複数の目的物性を考慮することができ、合成の可能性や水溶性等の指標を含めたスコアを算出し、分子構造を評価することもできます。



実験データや計算データがある場合は、機械学習によって回帰モデルを構築し、高速で物性予測を行います。蓄えられたデータが無い場合でも、分子軌道法や分子動力学法により物性予測をすることが可能です。

また、一度計算した実験データをデータベースに蓄える機能がありますので、使い込むほどに使い勝手が向上し、より短時間で効果的な逆解析ができるようになっていきます。

更には、研究開発者が思い付いた化学構造を入力すると、機械学習により複数の物性値を瞬時に推定して表示する対話機能も付加されています。

現時点で扱える物性は次の通りです。

MO・DFT法：HOMO-LUMO gap、光吸収波長、発光波長、屈折率、分極率、双極子モーメント等

M D 法：密度、粘度、誘電率等

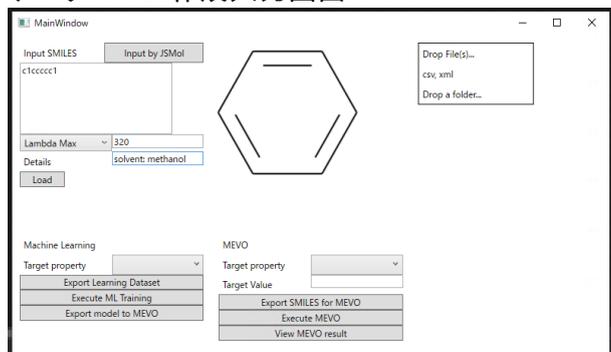
機械学習：融点、密度、HOMO-LUMO gap、光吸収波長、発光波長、屈折率、分極率、双極子モーメント、粘度等

当社顧客へ解析サービスを組み合わせることで展開していくと同時に、今後、扱える物性を増やしつつ、ユーザー様毎のカスタマイズを行うことでソフトウェアの機能性向上と活用範囲拡大を図ってまいります。

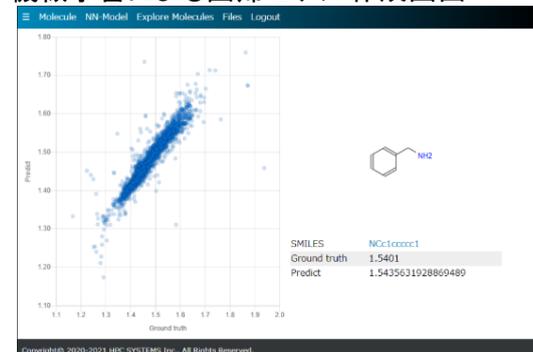
マテリアルズ・インフォマティクス(MI)は、計算化学、AI(人工知能)機械学習やビッグデータ解析、データマイニングなどを活用して、新素材材料を探索・設計・開発する新たなテクノロジーであり、従来よりも圧倒的に効率的な材料探索・開発を行うことが期待されています。2025年に向け、MI構築・導入が加速し、2030年にMI活用により作り出される高機能材料の市場規模は、8,500億円~1兆円と予測されています。

HPCシステムズは、データを基軸とした素材・材料研究開発のデジタルトランスフォーメーションの推進、研究・開発者の立場に立った現場支援を通じて、持続可能な社会の実現に向けた価値創造に貢献してまいります。

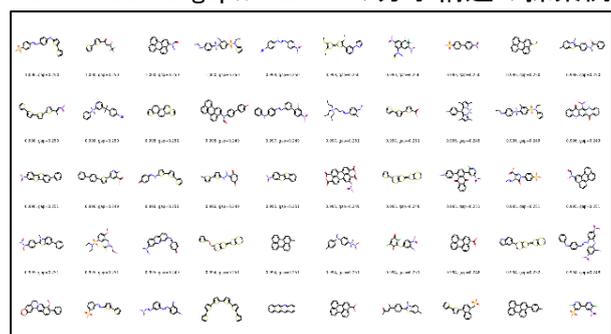
【ご参考】操作画面の一部 データベース作成入力画面



機械学習による回帰モデル作成画面



データベースを使わない場合の HOMO-LUMO gapが0.25eVの分子構造の探索例



対話による1分子の機械学習による 種々の物性推定例

Absorption	0.3015
Density / g/cm ³	1.413
HOMO / eV	-5.317
HOMO-LUMO gap / eV	4.570
LUMO / eV	-0.9647
Mass Heat Capacity / J/kg/K	1212
Permittivity	-8.735
Refractive index	1.610
Solubility parameter / Pa ^{0.5}	3.089e+4
Surface Tension / mN/m	32.33
T _{boil} / C	356.2
T _{critical} / K	920.5
T _{flash} / C	200.5
T _{melt} / C	255.7
Thermal Conductivity / mW/m K	60.25
Thermal Diffusivity / m ² /s	-2.158e-7
UVVIS / eV	-14.18
Wavelength / nm	398.3
logP	1.629

* 動作環境 Windows10 (実際の計算はLinux上ですが、Windows10上のGUIからジョブを制御します。)

HPC システムズについて

HPCシステムズは、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。

HPC事業では、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) 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、マテリアルズインフォマティクスのプログラム開発・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をワンストップで提供しています。

また、CTO事業では、顧客の用途、課題をヒアリングしながら、価格・性能・品質・高低温・防塵・防水・静電対策・過酷な環境に対する高耐久性など多種多様の対応が求められる、工場生産設備・製造装置・検査装置、制御機器や交通インフラ、自動運転、リテール店舗などのコントローラーとしての産業用コンピュータやエッジコンピュータの仕様提案から開発、生産、保守サポート、長期安定供給を実現しています。

社 名 HPCシステムズ株式会社 <https://www.hpc.co.jp/>

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 2億907万円 (2021年3月末現在)

代表者 代表取締役 小野 鉄平

プレスリリースに関するお問い合わせ

HPCシステムズ株式会社

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

マテリアルズ・インフォマティクスソフトウェアに関するお問い合わせ

HPCシステムズ株式会社 MI担当

mi_hpc@hpc.co.jp