

PCクラスワークショップ in 柏 2025

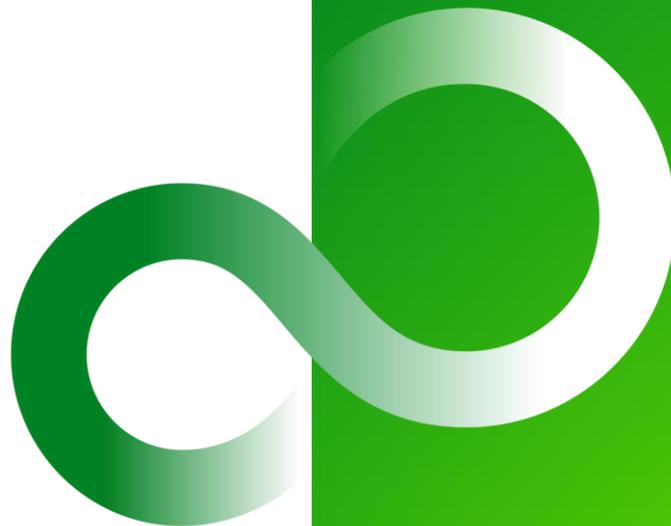
FUJITSU

HPCとAIで加速する ゼロエミッション材料開発

2025年6月27日

富士通株式会社 富士通研究所

實宝 秀幸



Computing Technologies and innovation

- ✓ Computing and AI lead future innovation
- ✓ Fujitsu continues to provide computing technologies

Innovation



Materials



Genomics



Generative AI

Middleware

Computing Workload Broker (CWB)

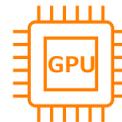
AI Computing Broker

Quantum Computer

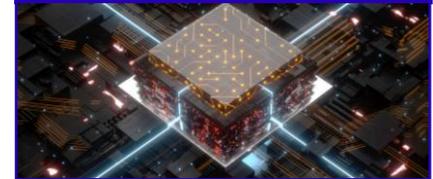


Photo Credit: RIKEN

GPU



CPU (FUJITSU-MONAKA)



Architecture

富士通研では、新材料開発を支援する2つのツールを開発中

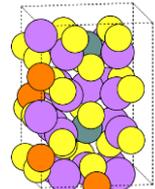
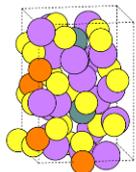
シミュレーション

ターゲット材料の化学反応をシミュレート

MD対象の構造

Molecular Dynamics (MD) シミュレーション

MD-sim結果



sim結果を分析

- ・物性値評価
- ・構造解析
- ・化学反応解析
- ・etc.

MD向け NNP作成ツール



大規模長時間MDシミュレーションを
実現する特化AIを簡単に作成

結果解析・施策立案

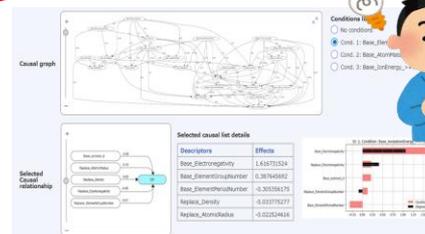
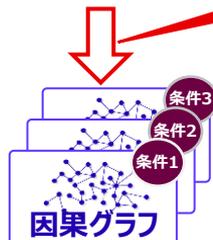
因果関係を可視化し知見獲得を支援

シミュレーション
実験データ



因果による 結果分析ツール

化学反応(結果)と
材料構造(原因)の
因果関係を発見

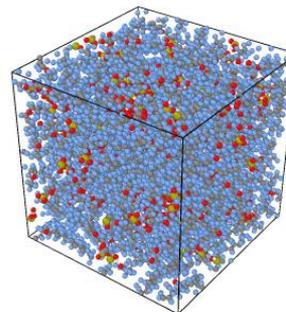
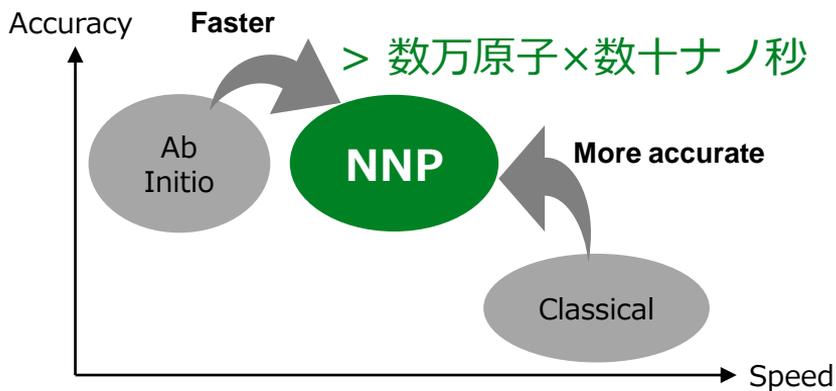


富士通独自の因果発見技術

MD向けNNP生成ツール

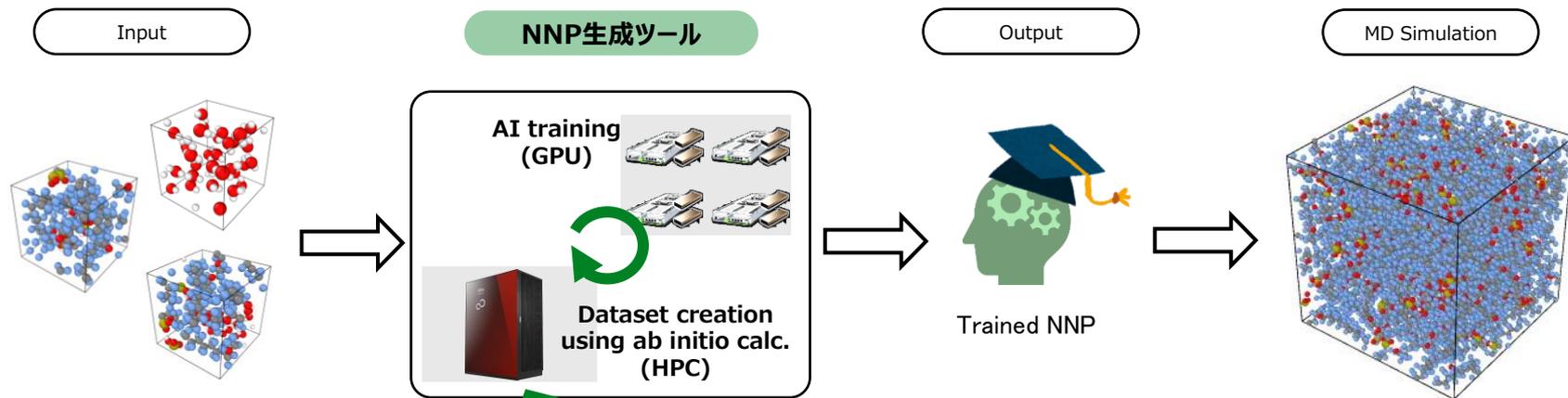
NNPは、従来不可能だった大規模&長時間のMDをab initio同等の精度で実現可能だが、シミュレーション中に構造が崩壊しやすい

大規模MD中に現れる複雑な原子間相互作用をNNPが表現しきれず、**構造崩壊**



含水ナフィオン19,670原子のNNP-MD(従来)

ターゲット材料に特化した高精度 & 高速 & **安定性の高いMD**
を実現するNNP生成ツールを開発



Initial structures

複雑な原子間相互作用を高精度に表現できる
独自のActive Learning手法

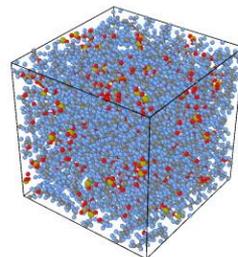
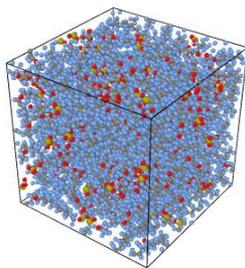
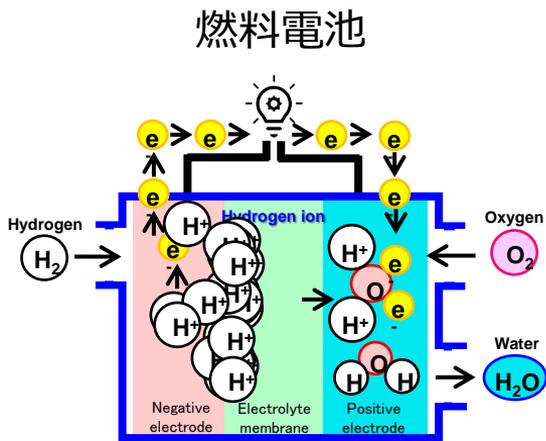
20,000原子系で30ナノ秒以上のMDを8日間で実現

※ ab initio計算 ⇒ **800年以上**(推測)

Electrolyte membrane:
含水ナフィオン(19,670原子)

当社の開発技術
なし

当社の開発技術
あり

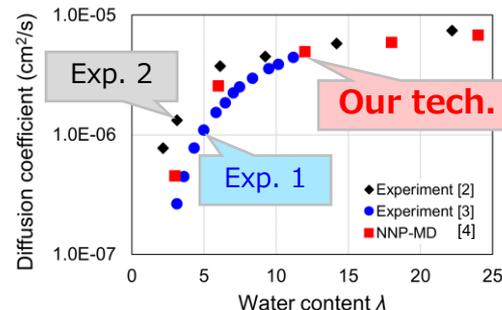


MD破綻

安定なMD

含水率依存性の
実験傾向を再現

水素原子の自己拡散係数



[2] T. A. Zawodzinski Jr. et al., *J. Phys. Chem.* 95, 6040–6044 (1991).

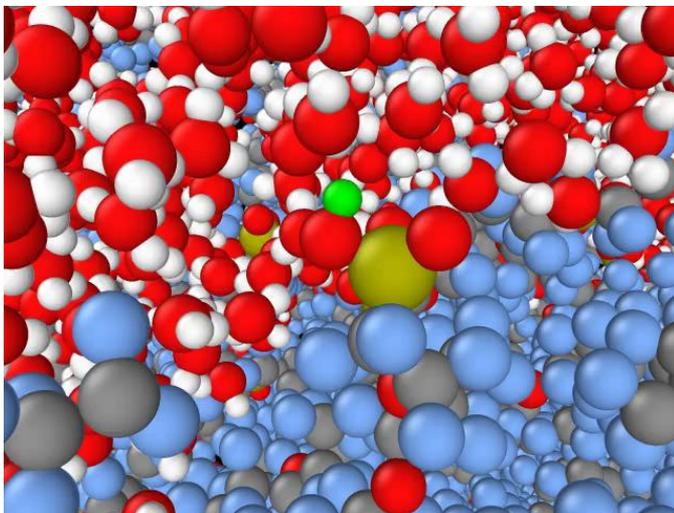
[3] S. Ochi et al., *Solid State Ion.* 180, 580–584 (2009).

[4] Y. Yoshimoto, et al., arXiv preprint, arXiv:2503.20412 (2025).

開発技術を適用して作成したNNPは**化学反応**を扱える

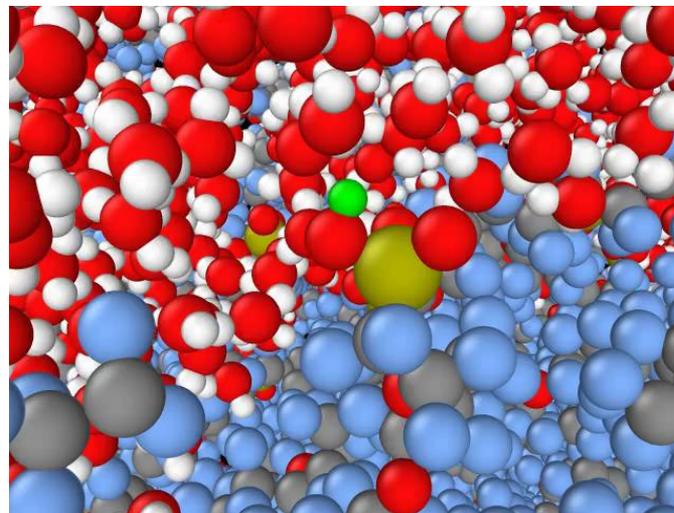
含水ナフィオン(19,670原子)

Classical MD (GAFF2)



プロトン(水素イオン)ホッピングが起きない

NNP-MD

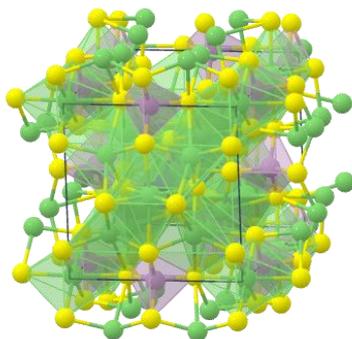


プロトンホッピングが起きる

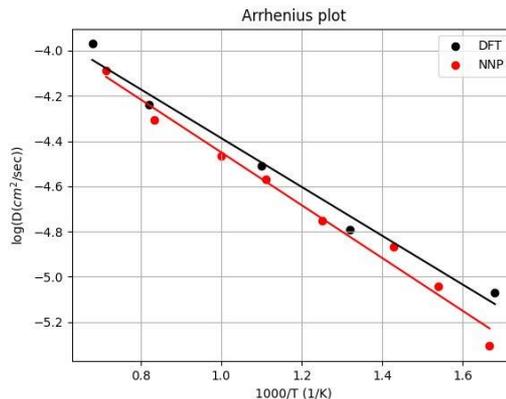
H: Hydrogen
C: Carbon
O: Oxygen
F: Fluorine
S: Sulfur

LGPSにて実験値と比較して活性化エネルギーを精度よく再現

LGPS
($\text{Li}_{10}\text{Ge}(\text{PS}_6)_2$)



Liイオンの拡散係数
(1600原子の系で評価)



アレニウスプロットから
算出した活性化エネルギー

	活性化エネルギー [meV]
実験値 [1]	242
Ab initio MD [2]	210
NNP-MD	232

[1] First Principles Study of the $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ Lithium Super Ionic Conductor Material, Yufei Mo et al., Chemistry of Materials 2012 24 (1), 15-17

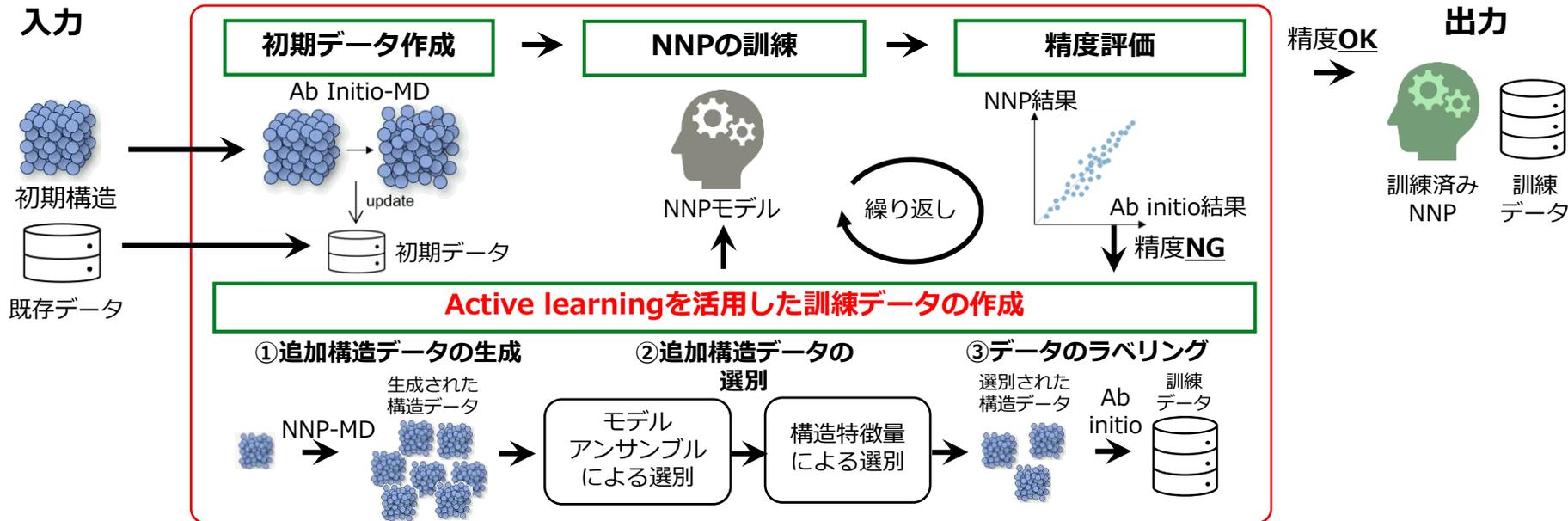
[2] High-power all-solid-state batteries using sulfide superionic conductors, Yuki Kato et al., Nat Energy 1, 16030 (2016).

当社ツールによる「NNP-MD計算」と「第一原理計算MDや実験値」が同等であることを確認できた事例

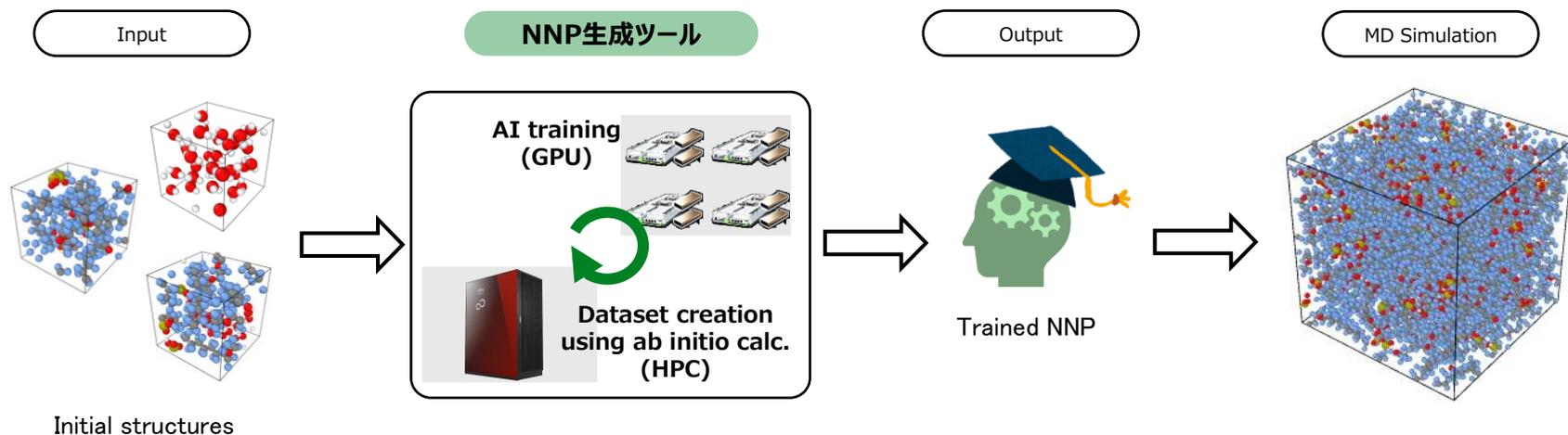
	材料	原子数	評価項目
有機	ナフィオン	19,670	密度, 自己拡散係数
有機	ポリエチレングリコール	10,530	密度, 自己拡散係数
有機	ポリプロピレングリコール	7,872	密度, 自己拡散係数, 熱膨張係数, 等温圧縮率, 誘電関数
有機	ポリエチレン	2,024	密度, 溶解度パラメータ
電池	LGPS	1,600	リチウムイオンの活性化エネルギー
電池	$\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$	192	リチウムイオン伝導率
電池	Y-doped BaZrO_3	5,010	プロトンの活性化エネルギー
光触媒	SrTiO_3	320	酸素欠陥形成エネルギー
触媒	Pt_3Ni	272	水素の吸着距離分布
無機	金	55	最安定構造の比較

- 独自の訓練データ作成技術(Active learning)によりユーザーのターゲット材料に特化した**高精度 & 高速 & 安定性の高いMD**を実現するNNPを生成

開発したNNP自動生成ツール



- **HPC&AI**を活用した材料開発加速を目指し、**MD向けNNP生成ツール**を開発
- 複雑な原子間相互作用を高精度に表現できる独自のActive Learning手法により、高精度 & 高速 & **安定性の高い**NNP-MDを実現



Thank you

