

RISMセミナーシリーズ第33回 データ駆動型AIセミナー(第10回)

ENEOSの研究開発とMatlantisの活用状況・展望

尾野秀樹 様 (ENEOS株式会社)

ENEOSでは石油精製のみならず、潤滑油や機能材、低炭素社会に資する水素の製造・利用技術を研究・開発している。その中で、デジタルトランスフォーメーションを長期ビジョンに掲げ、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) を活用した効率的な材料開発を推進している。本報告では、MI技術の中核を担うAI分子シミュレータ「Matlantis」の開発経過と、当社の製品群に対する適用事例について報告する。

Matlantisを用いた新規触媒材料の探索

小鷹浩毅 様 (ENEOS株式会社)

Matlantis はDFT相当の精度かつ超高速でエネルギー計算を実施可能なAI分子シミュレータである。Matlantisを活用する事で、DFTでは膨大なリソースを必要とする規模の計算、多元合金、不純物ドーパ系、複合酸化物など触媒材料の性能を高速に評価・スクリーニングすることが可能になった。本発表では、弊社にて実施している触媒材料の計算結果を中心に報告する。