

2024年7月11日

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 東証グロース)

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、MI を用いた素材開発に必要な分子構造と物性値のデータベース作成システム「AutoMO」を開発

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、**機械学習による高速な分子構造探索を可能にするデータベース作成システム「AutoMO」を開発**しましたので、お知らせいたします。

AutoMO は Gaussian の入力ファイル作成と計算実行をし、計算された物性値のデータベースを作成します。AutoMO で作成されたデータベースは、独自開発の高機能材料設計支援ソフトウェア「M-EVO[®]」^{*}の計算データベースとして利用することができます。

HPC システムズは、ソフトウェアや関連システムの開発・強化へより一層注力し、各分野の研究・開発を多面的に支援してまいります。

1. AutoMO とは

素材開発における分子構造と物性値のデータベースを作成するためには、分子構造を SMILES、mol、sdf 形式で入力し、Gaussian 16 で DFT 計算を行わなければなりません。こうしたすべてのステップにおいて化学と計算の知識が要求され、たったひとつの分子を計算するだけでも手間がかかります。機械学習用に大量の分子を計算するとなると、その手間は膨大なものになります。加えて、結果を整理する仕組みも準備しなければなりません。これらの煩雑な課題を丸ごと解決する計算支援ツールが AutoMO です。AutoMO で得られた物性値は、csv ファイルで保存し M-EVO[®]の計算データベースとして利用することができます。

※高機能材料設計支援ソフトウェア「M-EVO[®]」

当社独自開発の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ソフトウェア

<https://www.hpc.co.jp/chem/m-evo/>

【AutoMO のフロー】



▼ 分子構造入力

SMILES表示
c3ccc(c2ccccc1c2)cc3

決定

▶ ファイルアップロード

選択済データ

- c1ccccc1
- c3ccc(c2ccccc1c2)cc3

消去 ファイル転送結果へ

分子構造は二次元構造を描いて
SMILES に変換可能

結果一覧

MolID	Image	SMILES	Energy / eV	Relative Energy / eV	Charge	Multiplicity	Method	Label
1		<chem>c3ccc(c2ccccc1c2)cc3</chem>	-1712.2675	0.000	0	1	B3LYP/6-31g(d)	1
2		<chem>c1ccccc1</chem>	-1199.9378	512.3297	0	1	B3LYP/6-31g(d)	2
3		<chem>O</chem>	-1199.9378	512.3297	0	1	B3LYP/6-31g(d)	3
4		<chem>Nc1ccccc1</chem>	-1199.9378	512.3297	0	1	B3LYP/6-31g(d)	4

MolID:1 [IR] B3LYP/6-31g(d)

Intensity / cm⁻¹ vs Wavenumber / cm⁻¹

結果画面をクリックすると、赤外吸収スペクトル/ラマンスペクトル/NMR スペクトルを表示

	A	B	C
1	MolID	Image	SMILES
2	2		<chem>NCCc1ccccc1</chem>
3	3		<chem>O</chem>
4	6		<chem>Nc1ccccc1</chem>

データベースを Excel ファイルに保存する際、2次元分子構造も同時に保存
どの分子のデータかを確認可能

2. AutoMO の機能

- 一般的なソフトウェアで作成した構造ファイルと計算したい物性を選択すれば計算が始まります。
- 構造ファイルがなくても、ブラウザ上で構造を入力できます。
- 計算条件を細かく管理できます。
- ジョブの様子を確認できます。
- 計算結果は一覧表にでき、CSV や Excel でまとめてダウンロード可能です。
- 計算しなかった物性も、あとからボタン 1 つで追加計算できます。
- グラフで視覚的に計算の確認ができます。
- 配座の探索も可能です。
- 計算結果をその後の機械学習に活用できます。

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 3,014 万円 (2024 年 3 月 31 日時点)

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

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