

材料科学研究の基盤モデルとしての汎用機械学習ポテンシャル

Matlantis株式会社

青木 祐太

<https://doi.org/10.69290/j.001233-vol33>

1. はじめに

材料科学分野における研究開発を効率化するために、計算機を使って実験の工数を減らしたいというのは昔からある需要である。原理的には物質の性質は、その物質を構成する原子間の相互作用を決定づける電子が支配するので、実験値を参照しない第一原理的なアプローチに基づく場合、シミュレーションには基本的に量子力学に基づく計算が必要となり、その計算コストは重くなる。したがって、このようなシミュレーションは物性発現のメカニズムの解明に用いられることが多く、大量の候補材料を対象としたスクリーニング用途にはあまり積極的には用いられてこなかった。近年は計算機パワーの向上によって、対象とする物性によってはこのような状況も変わりつつあるが、それでも多くの場合においては計算で扱える原子数のスケールと実際に予測したい現象や物性の発現する空間スケールとの乖離の問題から難しいことが多く、材料探索においてはより効率的な手法が求められる。

そこでこの十数年あまりの間に発展してきたアプローチがマテリアルズ・インフォマティクス (materials informatics: MI) である[1][2]。MI とは、機械学習などの情報科学的な手法を用いて材料科学上の各種課題にアプローチする方法論のことを指す。典型的な問題設定は、材料を特徴づける特徴量 (化学組成、原子レベルの構造情報など) などからその物質が持つ特性を予測する回帰問題であり、この問題を解くためにはこれらの特徴量を入力変数に用い、予測したい物性を出力するような機械学習モデルを構築するという手段を取ることになる。

ここで考えなければならないのは、材料科学分野における研究開発タスクの多様性である。タスクによって扱う材料、予測したい物性、興味のある現象のスケールなどが多岐に渡るが、あるタスクのために用意した機械学習モデルを別のタスクのために流用するのは容易ではない。基本的に、多くの機械学習モデ

ルはタスク特化型なので、解きたい問題ごとに、あるいは適用したい材料カテゴリや探索範囲ごとに機械学習タスクとしての適切な問題設定を行い、モデルの学習を行わなければならない。近年はモデルの訓練や予測精度の評価などの自動化も進展してきているものの、研究開発上の問題解決に資するような適切な機械学習プロジェクトを設計するにはノウハウに属する部分も依然として多く残されている。機械学習タスクとしての適切な問題設定、適切なモデルアーキテクチャの設計や選択、適切な学習用データセットの収集や構築、適切な学習済みモデルの評価などを、解きたい材料科学上の問題ごとに行わなければならないとなると、いかに機械学習モデルによる予測が高速だとしても、トータルでの研究開発のスピードを上げることにつながるかは必ずしも自明ではない。また、産業界が求めるような実用的な特性に直結する物性ほど、材料科学データベースなどに記載されている基礎的物性のように大量のデータを容易には集められないことが多い。

そこで近年注目を集めているのが機械学習ポテンシャル (machine learned interatomic potential: MLIP) である[3][4][5]。これは、原子レベルの構造から系のエネルギーや各原子に働く力を予測するモデルであり、いわばシミュレーションのコアとなる「エンジン」を、計算コストのかかる従来の量子化学計算などから機械学習モデルに置き換えるアプローチである。特定の物性を直接予測するタスク特化型の MI とは異なり、MLIP は物理法則に基づいたシミュレーションの土台となるため、モデルが一つあればそれを用いて動的な挙動の観察から熱力学的な安定性の評価まで、様々な解析タスクへ柔軟に応用できるという特徴を持つ。また、学習用のデータは第一原理計算により生成できるため、十分な計算資源さえ確保できれば、質の揃ったデータを大量かつ系統的に用意することができる。

本稿では、まず MLIP が材料科学研究においてどのような物理的・技術的意義を持つのかを整理する。その上で、従来の MLIP の限界を超え、事前の追加学習なしにあらゆる系へ適用可能な汎用機械学習ポテンシャル (universal machine learned interatomic potential: uMLIP) を実現するために必要な要素と、それが研究開発現場において「基盤モデル」としていかなる価値をもたらすのか、その最前線の動向とともに概説していく。

2. 機械学習ポテンシャルの意義

実用材料の性能を決める物性には、その材料を構成する原子の運動や原子間の相互作用の強さなどにその起源を還元できるものが多い。原子の運動は、各原子に働く力さえ精確に求めることができれば、基本的にはニュートンの運動方程式で記述できるものと考えられる。各原子に働く力を支配する原子間相互作用自体は、その系の電子状態によって決まるものであり、これ自体は量子力学的に求めるべき対象である。しかし、電子状態そのものは主役ではなく、あくまでも原子間の相互作用を求める過程で必要とされるものであり、したがって電子状態は原子間の相互作用やそれによって生じる原子の運動を通してのみ興味のある特性に影響を与えることが多い。そうであれば、原子レベルの構造の情報から、その系のエネルギーや各原子に働く力を予測する部分のみを機械学習で置き換えられれば、あとは物理法則に基づいたシミュレーションによって、材料科学上の様々な問題に対して柔軟に対応できることになる。多くの手法において、量子力学に基づく電子状態計算の計算コストは系を構成する原子数 N に対して $O(N^3)$ で増大するが、一度求められた原子間ポテンシャルに基づき古典的な原子の運動方程式を解くのは $O(N)$ の計算コストで済む[6][7]。すなわち、電子状態を計算する部分の計算コストが最も大きくなるので、その部分のみを機械学習に置き換えた上で、残りの部分は物理法則に基づいたシミュレーションに委ねるのは非常に合理的なアプローチと言えるだろう。特に、実用的な研究開発に用いられる電子状態計算手法の多くは、Hartree-Fock 方程式[8][9]や Kohn-Sham 方程式[10][11]などの自己無撞着方程式を解くため

に繰り返しアルゴリズムに基づく収束計算が必要になるため、この部分を機械学習モデルによる予測に置き換えることは計算速度の劇的な向上をもたらす。MLIPを用いた原子レベルシミュレーションは、最も計算コストのかかる部分のみを機械学習に置き換えることで、従来の計算科学的アプローチが両立することが難しかった速度と信頼性、そして汎用性を担保していると言える。

ここで、MLIP の機械学習タスクとしての問題設定について、より立ち入ってみたい。各原子に働く力は、系を構成するすべての原子の元素種および位置座標の関数として決まる系のポテンシャルエネルギー関数に対して、着目する原子の位置座標に対する偏微分として求めることができる。したがって、基本的にはその系の原子レベルの構造の情報から系のポテンシャルエネルギーさえ予測することができれば、その系における原子の運動を記述できることになる。したがって、機械学習の問題設定としては、系を構成する全ての原子の元素種 $\{c_i\}$ および位置座標 $\{\mathbf{r}_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$) について、

$$E = f(\{c_i, \mathbf{r}_i\}) \quad (1)$$

となるようなサロゲート関数 $f(\{c_i, \mathbf{r}_i\})$ を構築するという問題になる。これが構築できれば、各原子に働く力は

$$\mathbf{F}_i(\{c_i, \mathbf{r}_i\}) = -\frac{\partial E(\{c_i, \mathbf{r}_i\})}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (2)$$

という形で求められる。ここで、 i は原子のインデックスであり、 N は系内に存在する全原子数である。ニューラルネットワークモデルであれば、この偏微分は自動微分を用いることで数値微分に頼らず求めることが可能である。エネルギーと力を別々の出力として個々に学習させることも可能ではあるが、その場合はエネルギーと力の物理的な整合性を保つことができず、シミュレーションの最中にエネルギー保存則が満たされなくなるなどの不自然な挙動を起こす可能性が高まる。

エネルギーという、各種シミュレーションの土台にもなる最も基礎的な物理量に対する予測のみを機械学習に置き換え、その後の部分は物理法則に基づいたシミュレーションに委ねているため、原理的にはエネルギーの予測さえうまくいっているのであれば、それを用いて各種シミュレーションによって算出されるその他の物性についても、シミュレーション手法そのものの妥当性さえ確保できていれば、ある程度は信頼性が担保されると言えよう。したがって MLIP は、原子レベルの材料科学研究における、一種の基盤モデル (foundation model) とみなすことができる。基盤モデルとは、そのモデルさえあれば特定のタスクだけではなく、他の様々なタスクにも柔軟に対応できるモデルという意味であり、たとえば大規模言語モデルが基盤モデルの一種であると言える。本来、大規模言語モデルが訓練されているタスクは「入力した文字列に続く自然な文字列を生成する」というタスクのみであるが、自然言語という、人間が意味を認識し柔軟に使いこなすことのできるデータをインターフェースに使用していることで、人間に取って「意味のある」やり取りを行うことができ、それを通して様々な実用的なタスクを柔軟にこなすことができる。

3. 研究開発現場における汎用機械学習ポテンシャルの必要性

MLIP は本質的には、対象となる系の原子レベルの構造から、その系のエネルギーや各原子に働く力を予測する機械学習モデルである。しかし、本来我々が求めているのは、エネルギーや力に対する予測精度そのものではなく、それを使って物理化学的なシミュレーションを行うことで得られる各種物性値に対する予測精度である。すなわち、MLIP に対する評価は、機械学習タスクにおける回帰問題としてのエネルギーや力に対する予測精度だけではなく、MLIP を用いて実行されたシミュレーションそのもののパフォーマンスで検証されるべきものである。そのような検証を、各研究者が研究テーマごとに毎回行うというのはなかなかハードルが高い。本来、材料科学分野の研究者が取り組むべきなのは材料そのものの研究であり、その研究に使うためのポテンシャルの構築に多くのリソースが割かれてしまう状況は、研究開発の効

率化や加速化といった観点からすると、あまり好ましい状況ではない。そのため、考えられるあらゆる系、あらゆる状況や構造に対応できる汎用機械学習ポテンシャル (universal machine learned interatomic potential: uMLIP) が求められる。

MLIP を“汎用”に使うため、さらには新しい材料の設計に使うためには、未知の構造に対しても十分な予測能力が発揮できるような設計が必要である。近年の uMLIP においては message-passing graph neural network (MPGNN) というアーキテクチャが採用されている[12]。このアーキテクチャにおいては、各原子をノード、カットオフ半径内にある原子間のつながりをエッジとみなしたグラフを作成し、各原子がエッジで直接結ばれた隣接原子の情報を集約しながら自身の状態を更新していく仕組みとなっている。これにより、各原子が周囲の原子から感じる局所的な相互作用を、ある意味「セルフコンシステント」に全ての原子について積み重ねることで系内全体の相互作用を記述する仕組みとなっている。そのため、局所的な原子環境についてさえ十分多様な構造を訓練できていれば、系全体としては未知の新しい構造に対しても十分な予測能力を発揮できる可能性が高まる。大域的な構造の多様性と比べれば、局所的な原子環境の多様性はそれほど大きくはないだろうと期待できるため、この仕組みは極めて重要である。

また、安定な構造だけでなく不安定な構造、実在することが確かめられていない仮想的な構造や非現実的な構造なども積極的に訓練データに取り入れる必要がある。uMLIP を謳う MLIP においては、依然として既存の材料データベースに存在する安定構造およびその周辺の構造データのみを訓練データに使用しており、不安定な構造や非実在の仮想的、あるいは非現実的な構造を積極的に訓練データに取り入れていないものがある。しかし、例えば化学反応経路を探索するというタスクにおいては化学反応の過程で現れるエネルギー的に不安定な状態に対する十分な予測精度が必要とされるし、あるいは未知の新物質探索の際には、どのような構造なら不安定であり非現実的で、どのような構造なら安定で存在しうるものになるのかを、モデルはあらかじめ学習できていなければならない。

この、学習データのサンプリングの重要性を示した事例の一つが、ヒドロキシカルビン (COH) が Co (0001) 面上に吸着した表面吸着構造に対する、Preferred Networks 社の高本らによる検証結果である[13]。高本らは、Open Catalyst Project[14][15]のベースラインモデルである dimenetpp_all[16]を用いて、COH が Co (0001) 面上に吸着した構造の安定構造を探索した結果、Co 表面が崩壊して生じた断片の上に COH が吸着するという不自然な構造の方が、安定した Co 表面上の hollow サイトに COH が吸着するという、先行研究でもよく知られた自然な構造[17]よりもエネルギー的に安定となるという検証結果を示した。これは、dimenetpp_all が学習データに用いた OC20 データセットが、触媒となる金属表面のスラブ単独の構造、吸着種となる分子単独の構造、および吸着分子が金属表面に吸着した構造の安定構造および初期構造からの緩和過程の構造から成っており、現実には存在し得ないような不安定な構造がサンプリングされていないためだと考えられる。

学習データの適切なサンプリングの他に、物理的な制約条件や対称性などを満たすようなモデルアーキテクチャの設計も、広範な構造に対する汎化性能や、広範な物性値に対する予測精度を効率的に確保する上で非常に重要である。例えば、エネルギーと力の整合性を保つことで、シミュレーション中のエネルギー保存則が崩れにくくなる。また、系全体のエネルギーについては回転不変性が、各原子に働く力については回転同変性が満たされている必要がある。このような制約条件を取り入れるには、やはりモデルのアーキテクチャを自由に設計できるニューラルネットワークモデルが適している。前述した通り、力とエネルギーの整合性についても、自動微分という形で数値微分に頼らずに満たすことができる。MPGNN を採用している近年の多くの uMLIP においては、いわゆる E(3)同変性を保つような設計がされており、物理的に満たさなければならない対称性がモデルのアーキテクチャレベルで保証されるようになっている。このような仕組みは実際のシミュレーション中に、物理的に不自然な挙動を引き起こす可能性を事前に低減させるとともに、これらの対称性をデータから学習する必要がなく、かつモデルの持つこのような制約条件が

一種の帰納バイアスや正則化条件として働くため、学習の効率化や汎化性能の向上にも寄与するものと考えられる。

特に、近年の uMLIP において標準的な設計思想となった E(3)同変性について、より詳しく触れておきたい。E(3)とは、3 次元空間における回転、反転、および並進操作を含むユークリッド群を指す。原子レベルの構造に対するこれらの操作に関して、系のエネルギーについては不変性が、各原子に働く力については適切に方向が変わる同変性が求められる。この物理的な対称性をアーキテクチャレベルで厳密に保証した先駆的なモデルが NequIP である[18]。NequIP は、メッセージパッシングの過程でスカラー量だけでなく幾何学的なテンソル情報を球面調和関数を用いて伝播させることで、モデル内部で向きに関する情報を保持したまま計算を行うことを可能にした。これにより、従来の不変性のみを考慮したモデルと比較して、遥かに少ない学習データで高い汎化性能と物理的整合性を実現できることが示された。この、物理的対称性のアーキテクチャレベルでの保証と、幅広い構造に対する高い表現力とを、実用的な計算速度で両立させるべく開発されたのが、高本らによって提案された TeaNet (Tensor-embedded Atomistic Network)である[19]。後に Preferred Networks 社によって開発されることとなる汎用機械学習ポテンシャル PFP (PreFerred Potential) [20][21]の技術的基盤にもなった TeaNet は、原子間の相対ベクトルから構築される 2 階のユークリッドテンソルを導入し、メッセージパッシングの枠組みの中でテンソル演算を行うことで、回転同変性を効率的に取り入れたモデルである。TeaNet の特筆すべき点は、単に精度が高いだけでなく、大規模なシミュレーションに耐えうる計算効率を意識して設計されている点にある。PFP においては、この TeaNet のアーキテクチャをベースに、周期表のほぼ全元素をカバーする膨大なデータセットでの学習を可能にするための改良が加えられている。エネルギーや力といった基本物性において、物理的な制約条件をアーキテクチャレベルで満たしているからこそ、PFP は未知の複雑な系においても不自然な挙動を示すことなく、信頼性の高い「基盤モデル」として機能しうるのである。

4. 汎用機械学習ポテンシャルの「基盤モデル」たる条件と、その価値

これまで、uMLIP の重要性や特徴などについて述べてきたが、それが材料科学研究における「基盤モデル」といえるほどの存在になるためにはどのような条件が必要だろうか。

まず一つは、そのモデルがユーザーによる事前の追加学習などの必要がない、ready-to-use なモデルである必要がある。たとえば、ChatGPT や Gemini、Claude などの商用大規模言語モデルが、事前にユーザーによるファインチューニングが必要だとしたら、ここまで爆発的に利用が広がるようなことがあっただろうか。研究開発の各プロセスの自動化が進み、このようなファインチューニングのプロセスも以前ほどの困難を伴うものではなくなるのかもしれないが、それでも研究活動そのものの中心はあくまでも人間である。だからこそ、研究者がモデルの訓練構築やファインチューニングなどに明け暮れるのではなく、材料科学上の課題そのものに注力できるようにすることが重要である。

次に、ベンチマーク至上主義に陥らないことも重要である。特定のベンチマークのスコアを良くすることが主眼になってしまうと、ベンチマークに使われた特定のデータセットや特定の物性値に対するスコアのみが向上し、その他の材料系や物性値への適合性が落ちてしまうということが往々にしてあり得る。これは広義の過学習とも言える事態であろう。特に、MLIP は単なる機械学習モデルではなく、シミュレーションの一部として使うものである。したがってその真価は、系のエネルギーや各原子に対する力に対する予測精度だけではなく、シミュレーションを実行することで得られる広範な物性値に対する予測精度で評価されるべきものである。単純な回帰モデルとしての予測性能を競うのであればエネルギーや力に対する予測精度を検証すればよいのだが、多くの場合、材料科学研究における課題に関して、エネルギーや力を予測することそのものが最終ゴールではないはずである。

Preferred Networks 社が開発し、Matlantis 社が提供する汎用機械学習ポテンシャル「PFP」およびそれを搭載したシミュレーション環境「Matlantis」においては、以上述べたような「基盤モデル」として活用できるため

の条件を揃えられるよう、ready-to-use な使用に耐えられる汎用的な精度を目指し、常に改善が続けられている。

それでは、基盤モデルとしての条件を満たした uMLIP が得られた暁には、そこにどのような価値が生まれるだろうか。

第一原理計算と同等の精度で、より大規模、あるいはより長時間の分子動力学 (molecular dynamics: MD) シミュレーションが可能になれば、第一原理計算に基づくシミュレーションでは再現することのできなかった空間スケール、時間スケールの現象が取り扱えるようになる。それだけでなく、統計力学的なサンプリングの精度が高まることで、エネルギーと力の精度については第一原理計算より若干劣ったとしても、より大規模、長時間のシミュレーションにより統計的な精度を高め、目的とする物性によっては第一原理 MD 以上の予測精度を実現することも可能である。このことを示す事例として、Li イオンの固体電解質として知られる $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ における Li イオン拡散係数に関する検討結果がある[22]。この検討においては、先行研究における第一原理 MD (40 ps)[23]より長時間の MD シミュレーション (1000 ps) が Matlantis 上の PFP により可能になったことで、第一原理 MD による結果よりも実験値[24]に近い値が得られることが示されている。

また、大量の候補材料を対象としたハイスループットスクリーニングも、これまで以上にやりやすくなるだろう。対象とする材料系ごとのファインチューニングが不要な ready-to-use な MLIP であれば、極めて相性の良い使い方である。このような事例としては、メタノール合成触媒やアンモニア合成触媒に対するスクリーニングを実施した事例が挙げられる[25][26]。また、新規結晶構造探索についても数万構造を数日以内に探索可能であり、これは第一原理計算では到底なし得ない圧倒的な速度である[27]。

さらに、大規模な系や長時間のシミュレーションへの適用を加速させるアプローチとして、高い汎用性を持つ大規模モデルの知識を、より計算負荷の低い軽量なモデルへと「蒸留」する手法も有効である。たとえば Matlantis 上では、MPGNN ベースの PFP よりも遥かに高速な動作が可能な Moment Tensor Potential

(MTP) [28]をベースとした軽量モデルに対し、PFP による予測結果を教師データとして学習 (ファインチューニング) させる「LightPFP」というプロダクトを提供している[29]。これにより、PFP が持つ広範な化学空間の知見を活かしつつ、特定の系において 10 万原子を超えるような大規模な分子動力学シミュレーションを現実的な時間で実行することが可能となる。十分に訓練された ready-to-use な PFP を教師データの生成源として活用することで、計算コストの高い第一原理計算を介さない効率的なファインチューニングが可能となる。さらに、アクティブラーニングを取り入れることで、シミュレーション中にモデルが未学習の領域に遭遇した際、自動的に PFP へと問い合わせることで教師データを補充し、軽量モデルを逐次更新していくという、半自動的な蒸留プロセスを構築することもできる。このように、基盤モデルとなりうる uMLIP は、単にそれ自身が計算ツールとして使われるだけでなく、より軽量のモデルへと知識を蒸留させる上での知識の源泉として利用することもできる。

何よりも重要な価値は、実験とシミュレーションの間にある垣根を下げることで、そして試行錯誤のループを素早く回せるようになることである。結果がすぐに返ってくるというのは極めて大きな価値がある。Ready-to-use な uMLIP を搭載したシミュレーション環境は、アイデアをその場で試す、高速な仮想実験室と言って良いだろう。もし、結果が返ってくるのに数日もかかっていたら、その間に集中力も削がれるし、モチベーションが他のところに移ってしまうかもしれない。良いアイデアを練るときは集中的に試すことが必要である。もし、ChatGPT と会話をしながらアイデアを練るときに、返答に数日かかっていたらモチベーションを保てるだろうか。あらゆる物性に関して ChatGPT などのように数秒で答えが返ってくるとまでは言わないが、それでも第一原理計算同等の精度の結果が従来と比較して圧倒的なスピードで返ってくるようになれば、研究開発活動におけるシミュレーションの位置づけそのものが変わってくるだろう。

最後に、純粋に機械学習モデルとしての基盤モデルとしての位置づけについても触れておきたい。前述した通り、MPGNN においては、message-passing 層および多層パーセプトロン層を通して各原子がそ

の周囲の原子環境とそれらとの相互作用を十分に学習した後に、原子ごとのエネルギーを出力し、それらの総和を取る形で系全体のエネルギーを出力する。一方で、現実の原子間相互作用は原子核間を漂う電子系の電子状態によって決まるものであり、それを通して系全体のエネルギーが決定される。したがって、このエネルギーとして出力する前の多層パーセプトロン層の隠れ層最終層の特徴ベクトルは、原子間の相互作用を記述するための、電子状態なども含めた何らかの重要な情報が含まれている可能性がある。そこでこの特徴ベクトルを、エネルギーや力以外の物性の予測に直接使用するというアプローチも考えられるだろう。Matlantis では PFP の最終隠れ層の値を、一般的な機械学習タスクに用いるための記述子として取得する機能 (PFP Descriptors) も搭載されている。具体的な適用事例に関しては出版済みの論文を参照いただきたい[30]。

このアプローチは、転移学習の一種と捉えることができる。転移学習とは、目的とするタスク (ターゲットタスク) の学習に使えるデータ数が十分に入手できないような場合において、ターゲットタスクと関連があり、かつ学習用に十分なデータセットを入手できる別のタスク (ソースタスク) で学習されたモデルの一部を、ターゲットタスクの学習に活用するアプローチである。この PFP Descriptors の機能はまさにこの転移学習の文脈で理解することができるもので、系のエネルギーや力を予測するために大規模なデータセットを用いて学習された学習済みのニューラルネットワークモデルを、原子間相互作用を記述するための特徴量抽出器として用い、その抽出された特徴量を用いて他の物性を予測する機械学習モデルを構築するための機能となる。この観点では、PFP はエネルギーや力以外の様々な物性を、機械学習によって直接的に予測するためのモデルを学習させる際の基盤となるモデルと位置づけることもできる。転移学習におけるスケーリング則についてもここで触れておきたい。転移学習におけるスケーリング則とは、ソースタスクに対する訓練用データセットのサイズが大きくなるにつれて、ターゲットタスクに対する予測誤差もべき乗則に従って減少するという傾向のことを指す[31][32][33]。PFP はこれまでに述べた通り、様々な原子環境を反映し

た極めて膨大な構造データセットを学習に用いており、幅広い構造に対して適用できる重要な特徴量が学習されている可能性が期待できる。そのような特徴量を機械学習における記述子として用いることで、ターゲットタスクの学習用データセットでは直接カバーできていない原子環境を持つ構造に対しても柔軟に適用できる機械学習モデルがターゲットタスクにおいて学習できる可能性が高まる。したがって、uMLIP は、純粋に機械学習という文脈においても様々な物性値を予測するタスクに援用するための基盤モデルとして機能する可能性を秘めていると言える。

5. まとめ

本稿では、材料科学研究における MLIP の意義について、特にその中でも uMLIP が材料科学研究における「基盤モデル」として機能する可能性について議論してきた。

かつて第一原理計算が、実験のみに頼っていた材料開発に理論的裏付けと予測の指針を与えたが、uMLIP は、そのために必要だった計算コストという物理的制約から研究者を解放しようとしている。PFP のような ready-to-use なモデルが普及することで、研究者はポテンシャルの構築という手段に埋没することなく、本来の目的である未知の現象の探求や革新的な材料の開発にリソースを集中させることが可能となる。

大規模なデータセットから物理の本質的な特徴を学習したと期待されるこのようなモデルは、エネルギーや力の予測にとどまらず、シミュレーションや転移学習を通じた多角的な物性予測の起点となる「基盤モデル」として機能する大きな可能性を秘めている。これは、自然言語処理の分野で大規模言語モデルが情報のインターフェースを刷新したように、材料科学においても「計算」と「思考」の境界を曖昧にし、インフォマティクスと物理シミュレーションが真に融合した新しい研究パラダイムを切り拓くものである。uMLIP という基盤モデルの実現によって、シミュレーションが一部の研究者のための特別なツールではなく、研究者のアイデアを即座に形にする「高速な仮想実験室」となる未来は、それほど遠くないうちに実現するのかもしれない。

参考文献

- [1] K. Rajan, *Mater. Today* **8**, 38 (2005).
- [2] O. Isayev et al., “*Materials Informatics: Methods, Tools and Applications*”, Wiley-VCH, <https://doi.org/10.1002/9783527802265>
- [3] V. L. Deringer et al., *Adv. Mater.* **31**, 1902765 (2019).
- [4] O. T. Unke et al., *Chem. Rev.* **121**, 10142 (2021).
- [5] R. Jacobs et al., *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **35**, 101214 (2025).
- [6] J. A. Keith et al., *Chem. Rev.* **121**, 9816 (2021).
- [7] G. Wang et al., *iScience* **27**, 109673 (2024).
- [8] D. R. Hartree, *Proc. Comb Phil. Soc.* **24**, 89 (1928).
- [9] V. Fock, *Z. Phys.* **61**, 126 (1930).
- [10] P. Hohenberg et al., *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [11] W. Kohn et al., *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965).
- [12] J. Gilmer et al., “*Neural message passing for Quantum chemistry*”, ICML 2017, <https://dl.acm.org/doi/10.5555/3305381.3305512>
- [13] S. Takamoto et al., “*Towards Creating Benchmark Datasets of Universal Neural Network Potential for Material Discovery*”, NeurIPS 2022 Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences, https://ml4physicalsciences.github.io/2022/files/NeurIPS_ML4PS_2022_177.pdf
- [14] L. Chanussot et al., *ACS Catalysis* **11**, 6059 (2021).
- [15] <https://opencatalystproject.org/>
- [16] <https://github.com/facebookresearch/fairchem/blob/v0.0.3/MODELS.md>
- [17] O. R. Indervildi et al., *J. Phys. Chem. C* **112**, 1305 (2008).
- [18] S. Batzner et al., *Nature Commun.* **13**, 2453 (2022).
- [19] S. Takamoto et al., *Comput. Mater. Sci.* **207**, 111280 (2022).

- [20] S. Takamoto et al., *Nature Commun.* **13**, 2991 (2022).
- [21] C. Shinagawa et al., arXiv:2603.11063 (2026).
- [22] <https://matlantis.com/ja/calculation/li-diffusion-in-li10gep2s12-sulfide-solid-electrolyte/>
- [23] Y. Mo et al., *Chem. Mater.* **24**, 15 (2012).
- [24] Y. Kato et al., *Nature Energy* **1**, 16030 (2016).
- [25] <https://matlantis.com/ja/calculation/calculation-and-verification-of-methanol-synthesis-catalysts/>
- [26] <https://matlantis.com/ja/calculation/ammonia-synthesis-catalyst-screening/>
- [27] T. Shibayama et al, arXiv:2503.21201 (2026).
- [28] A. V. Shapeev, *Multiscale Model. Sim.* **14**, 10.1137/15M1054183 (2016).
- [29] W. Li et al., arXiv:2510.23064 (2025).
- [30] Z. Mao et al., *npj Comput. Mater.* **10** 265 (2024).
- [31] H. Mikami et al., “A Scaling Law for Syn2real Transfer: How Much Is Your Pre-training Effective?”, ECML PKDD 2022, https://doi.org/10.1007/978-3-031-26409-2_29
- [32] S. Minami et al., *npj Comput. Mater.* **11**, 146 (2025).
- [33] R. Yoshida et al., arXiv:2511.11626 (2025).

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMIII（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。