

高機能計算機による機械学習を基盤とした マテリアルシミュレーションフローの構築

2026/06/18

機械学習と高性能計算に関する先駆的計算科学フォーラム2026

出光興産株式会社

○原田 洋介, 中田 浩弥

主な成果

- **MLP-MD**により、粒界を含む固体電解質のLi拡散を大規模に解析した
- バルク拡散の活性化エネルギーは実験値と整合し、手法の妥当性を確認した
- 粒界近傍ではLiトラップが生じ、**粒界抵抗の微視的起源**を示唆した

玄界利用の意義

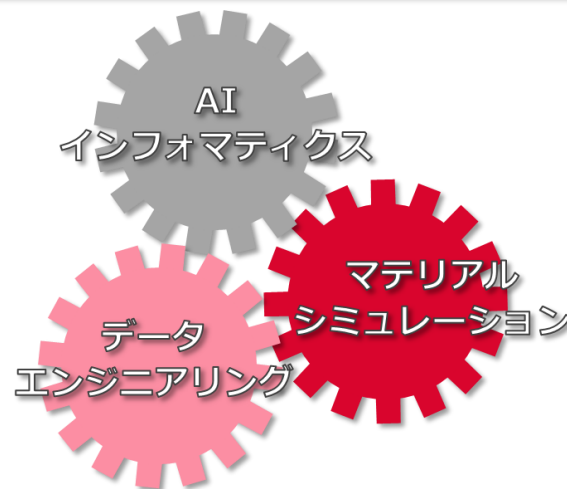
- 粒界構造構築から多温度MDまでを含む**反復計算ワークフロー**を実行できた
- 多条件・大規模・長時間の解析を、研究計画に沿って遂行できた
- 粒界拡散という、静的DFTでも経験的力場でも扱いにくい問題に対して、**MLP-MDと玄界を組み合わせることで、実用的な研究ワークフローを成立させた**

本発表は、2025年5月～2026年3月に行ったプロジェクト (p25009742) の成果報告です

競争力の源泉は独自性のあるデータ ← これを生むプロセス ← これに潜むサイエンス

- ✓ 技術のコモディティ化
- ✓ 汎用的な生成AIの台頭

AI技術が競争力を生む
状況では、既に無い



リアルな実験に頼らず、
独自性のあるデータ取り
を担う

材料系	計算手段と攻め所
有機低分子	• DFT×MIが進展，構造データの量が物を言う • 一部で分子生成モデル適用へ
有機ポリマー 大規模分子系	• MD (第一原理MD，粗視化MD含む) での現象理解と構造把握がメイン • MIでの条件探索は有効だがプロセスデータの質担保が課題
無機材料 有機/無機ハイブリッド	• 第一原理計算，第一原理MDでの構造＋ダイナミクス解析が必須 • 機械学習ポテンシャル (MLP) の恩恵が最も大きい

対象材料：アルジロダイト型硫化物固体電解質 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{-X}$ (X=Cl, Br)

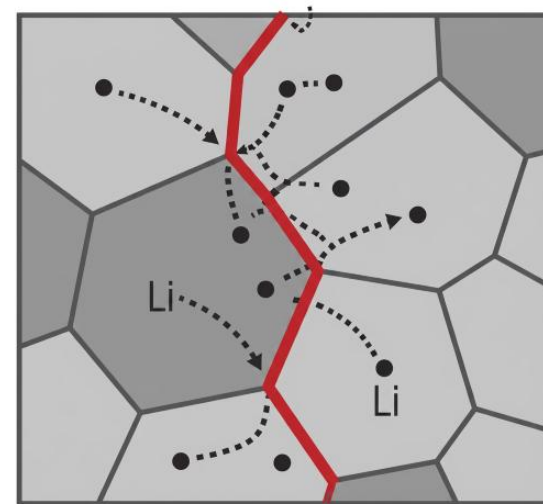
バルクで高いLiイオン伝導度を示す一方、
粒界が伝導のボトルネックとなる可能性

研究目的

粒界近傍でLiイオン伝導が低下する微視的起源を原子レベルで明らかにする

特に、以下の点に着目

- ・ 局所構造の乱れ
- ・ Liサイト占有の偏り
- ・ ホッピング経路の遮断 / トラップ形成

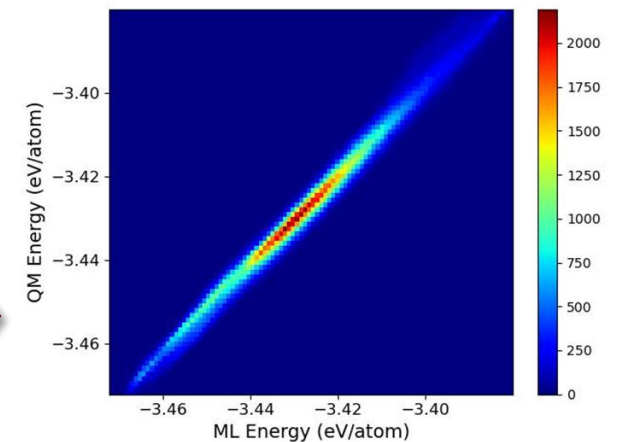
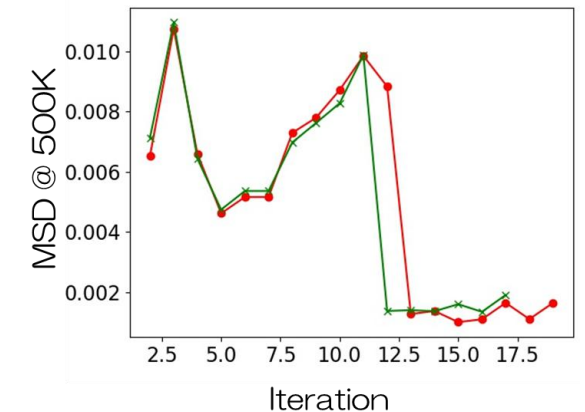


粒界拡散の解析には、**局所無秩序を含む大規模系**と、**長時間の統計サンプリング**が必要

- 第一原理MDでは、系サイズ・時間スケール・条件探索数に制約がある
- 経験的力場では、粒界近傍の複雑な局所環境表現に課題がある

⇒ MLP-MDによる、**ab initioに近い精度**と**大規模MDの実行性**が有望

手法	精度	計算可能規模	粒界拡散解析に対して
第一原理MD	高い	小規模・短時間	統計サンプリングが不足しやすい
経験的力場MD	限定的	大規模・長時間	局所環境の表現に課題
MLP-MD	高い	大規模・長時間	本研究で採用



Convergence testの結果
MSDがQMでの結果と良く一致

本研究で目指した**反復的ワークフロー**

粒界構造構築 ⇨ 構造最適化 ⇨ MLP-MD ⇨ 温度依存解析 ⇨ 再評価

単一の大規模計算ではなく、下表の要素を並行してスループット良く進める必要があった

工程	要求	玄界での効果
粒界構造作成・緩和	多数ジョブ，並列実行	条件展開を短期間で実施
温度依存MD	長時間計算	実用時間内で収束
複数モデル比較	高スループット	統計性を確保
解析・再計算	反復計算	開発サイクルを維持

MLPを用いても、**産業研究の時間軸**でこれらを回すには**HPC環境が不可欠**

⇨ 玄界の利用により、**多条件・大規模・長時間の解析を現実的な期間で実施**できた

粒界を含む原子モデルを3つの手順で構築



粒界サイトの座標およびS/Cl/Br占有をランダムに変化させ、Li拡散特性が収束するまでモデルを調整

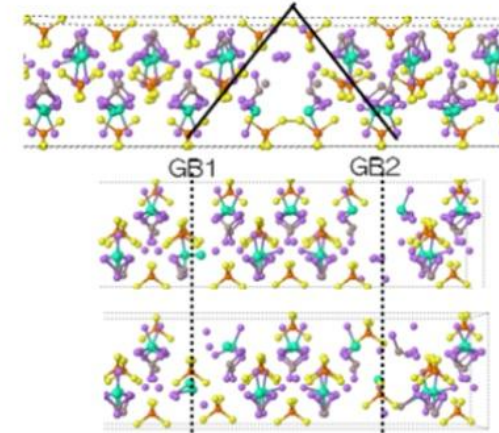
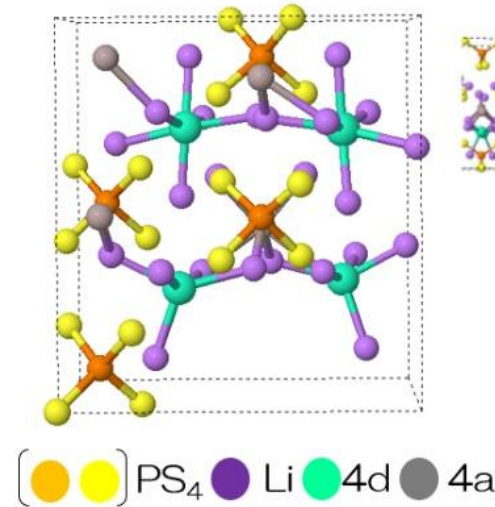
理想粒界ではなく、現実的な粒界モデルで解析



- Mean square displacement (MSD)
 - Arrhenius解析
 - Liの滞在時間 / 空間分布
- により拡散状態を評価

バルクと粒界を同一フレームワークで比較することで、**粒界起因の伝導障害要因を抽出した**

Benchmark System: $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{X}$ (X=Cl or Br)



1. Paste Surface
2. Modify for PBC
3. Random change for GB coordinate

- セルサイズ：10x8x8
- 原子数：5000原子
- 温度範囲：350–500 K
- MD時間：100ps
- タイムステップ：1 fs
- 評価量：MSD / residence time / density map

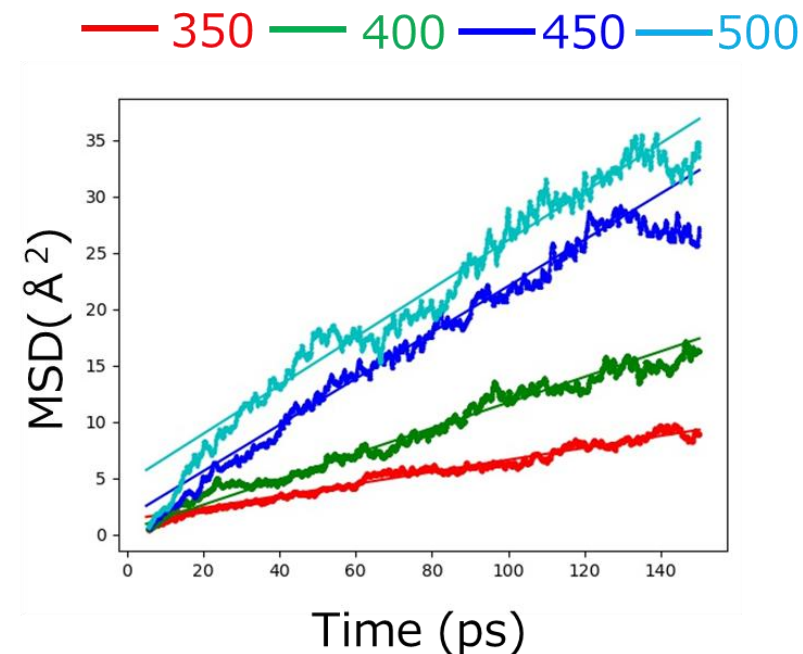
MLP-MDは自己無撞着的に最適化し、**MSDがQMと良好に一致**

⇒ 粒界を含む大規模系への適用が可能と判断

350-500 KにおいてLi拡散を評価し、**Arrhenius解析**により
活性化エネルギーを算出

⇒ バルク・粒界の両方で、計算結果は実験値と
良好に整合

**粒界では、バルクに比べて
Li拡散の活性化エネルギーが上昇**しており、
粒界がLi伝導の障壁となることが示された



Activation Energy (kcal/mol)

	Expt.	Calc.
Bulk	3.49	3.09
GB	4.74	4.40

粒界近傍におけるLiトラップと拡散阻害

9

MDトラジェクトリから得たLiイオン密度より、**Liイオンが粒界近傍にトラップ**されることを確認

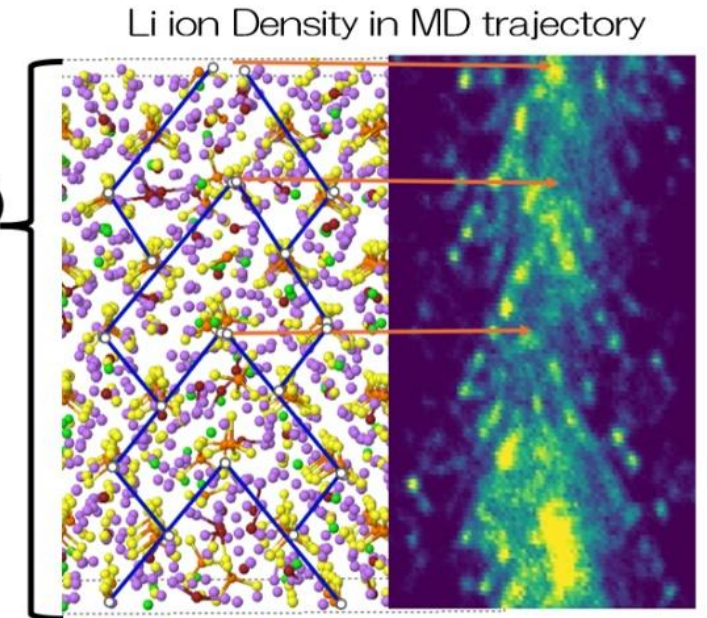
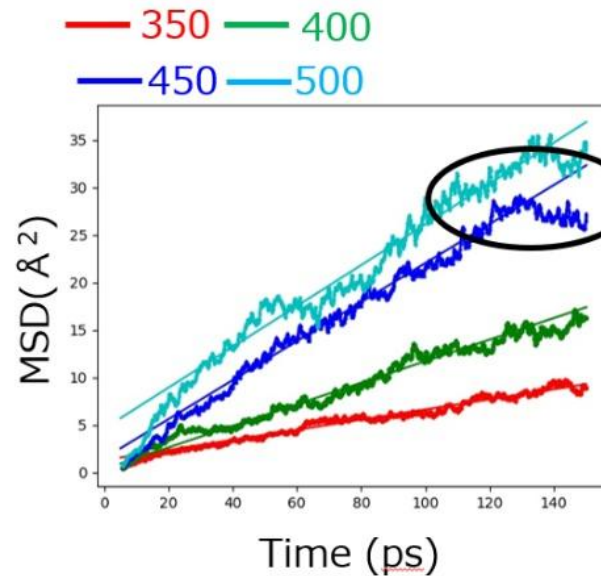
粒界近傍では、Liの空間分布が不均一
特定領域で滞在時間が増大



粒界に起因する局所的なポテンシャル
景観の変化により、**Liホッピングが抑制**



バルクでは連結している拡散経路が、粒界近傍では部分的に寸断され、
実効的な移動度低下に繋がる



粒界で観測されたLiトラップ挙動が、粒界抵抗の微視的起源の一つ

以 上