



## 深層学習DFTソフトウェア

# Advance/OF-DFT リリース

Advance/OF-DFTは、Orbital-Free DFT (OF-DFT)の拡張理論であるAtomic Orbital Facilitated DFT (AOF-DFT)を実装したPython/PyTorchベースの電子状態計算ソフトウェアです。アドバンスソフト株式会社の特許技術をベースに開発した深層学習運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft26を搭載しており、従来のOF-DFTよりも高精度、且つ、Kohn-Sham DFT (KS-DFT)よりも高速( $O(N)$ )に材料系の電子状態シミュレーションを行うことができます。

## Atomic Orbital Facilitated DFT (AOF-DFT)

従来の Orbital-Free DFT (OF-DFT)は軌道の情報を含まないため 局所擬ポテンシャルしか使うことができず、仮に運動エネルギー汎関数が厳密であったとしても、ノルム保存型擬ポテンシャル(NCPP)などの非局所擬ポテンシャルが利用可能なKS-DFTには精度の面で劣ることが課題の1つでした。この問題を解決する方法として、アドバンスソフト株式会社はAtomic Orbital Facilitated DFT (AOF-DFT)という新手法を開発しました。AOF-DFTでは原子軌道 $\chi_i^A(\mathbf{r})$ を用いて電子密度を

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_A \sum_{i,j} P_{ij}^A \chi_i^A(\mathbf{r}) \chi_j^A(\mathbf{r})$$

と表現することで、系全体に広がった波動関数(分子軌道 or バンド)の情報を含まずに、原子内においてのみ密度行列の情報を保持することができます。その結果、電子密度の情報量を $O(N)$ に維持しつつ、NCPが利用可能となります。KS-DFTにて既によく使われているNCPを転用することで、OF-DFTと同様の高速な電子状態解析を周期表の全元素に適用可能となります。Advance/OF-DFTではOpenMX(<https://www.openmx-square.org>)にて使用されている擬原子軌道および擬ポテンシャルを採用しています。ただし、v1.0ではランタノイドなどの一部元素の擬ポテンシャルが非対応です。原子軌道の導入により、Mulliken電荷解析も可能となります。

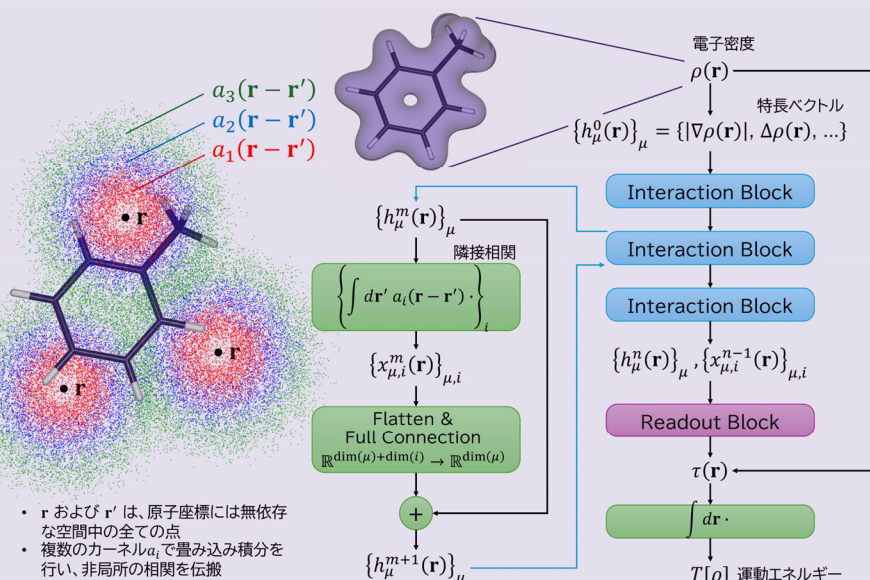
## 深層学習運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft26

グラフ理論を連続多変数化した独自技術「汎グラフ」を運動エネルギー汎関数に適用し、金属・絶縁体・酸化物・表面・欠陥・有機分子などの種々の電子状態を事前に学習させている。

[ オンライン・ドキュメント ]

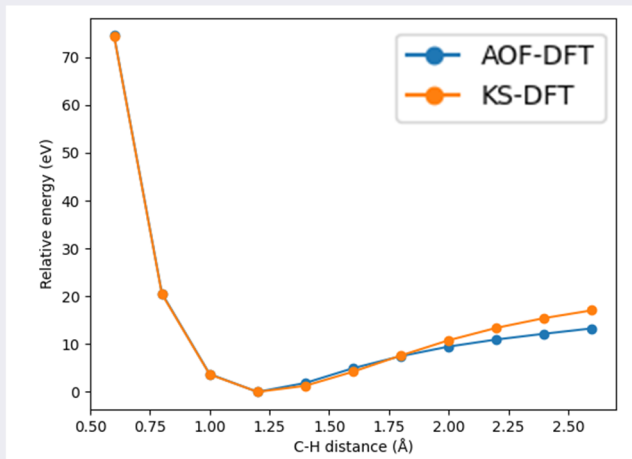


<https://aofdft-doc.readthedocs.io/>



# 計算事例

## 1) メタン分子のC-H結合

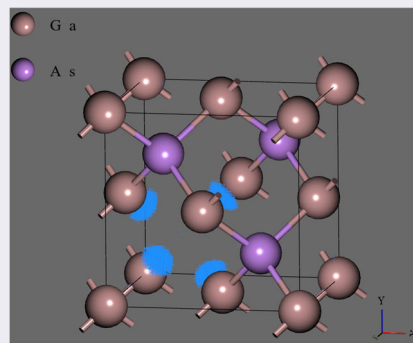


## 2) Fe(BCC)結晶のスピンモーメント

AOF-DFT	KS-DFT	実験値
2.0 $\mu\text{B}/\text{atom}$	2.6 $\mu\text{B}/\text{atom}$	2.2 $\mu\text{B}/\text{atom}$

## 3) As欠陥を含むGaAs結晶

電子ドーピングに伴う差分電荷密度



	AOF-DFT	KS-DFT
AS	-0.10	-0.09
Ga	-0.17	-0.18

電子ドーピングに伴うMulliken電荷の変化

## 4) バンドギャップ $E_g = d^2 E_{\text{DFT}} / dN^2$

	AOF-DFT	KS-DFT (OpenMX)	KS-DFT† (VASP)
CdSe	0.27 eV	0.10 eV	0.56 eV
AlSb	0.80 eV	0.83 eV	1.23 eV
AlP	1.65 eV	1.75 eV	1.63 eV
CsCl	6.09 eV	3.61 eV	4.99 eV

† <https://next-gen.materialsproject.org>

# ソフトウェア仕様

提供方法	Pythonのソースコードおよび事前学習済みモデルを提供。 同時実行数や利用するマシンに関する制限は無し。
使用方法	ASE( <a href="https://ase-lib.org">https://ase-lib.org</a> )のCalculatorとして、 AOF-DFTの計算機能が実装されており、使用方法はASEに準拠。
OS	Windows, Linux, macOS (Pythonが利用可能であれば任意)
Python	Python: 3.10以降、PyTorch: 2.8以降
デバイス	CPU (OpenMPスレッド並列対応、MPI非対応) GPU (CUDA 12.6以降)

# ライセンス価格等

永続ライセンス (企業・国研)	200万円 (税抜)
永続ライセンス (大学)	100万円 (税抜)
モデルのファインチューニング等	個別見積

## アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング17階西

TEL: 03-6826-3971 E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp)

ウェブページ: <https://www.advancesoft.jp>

