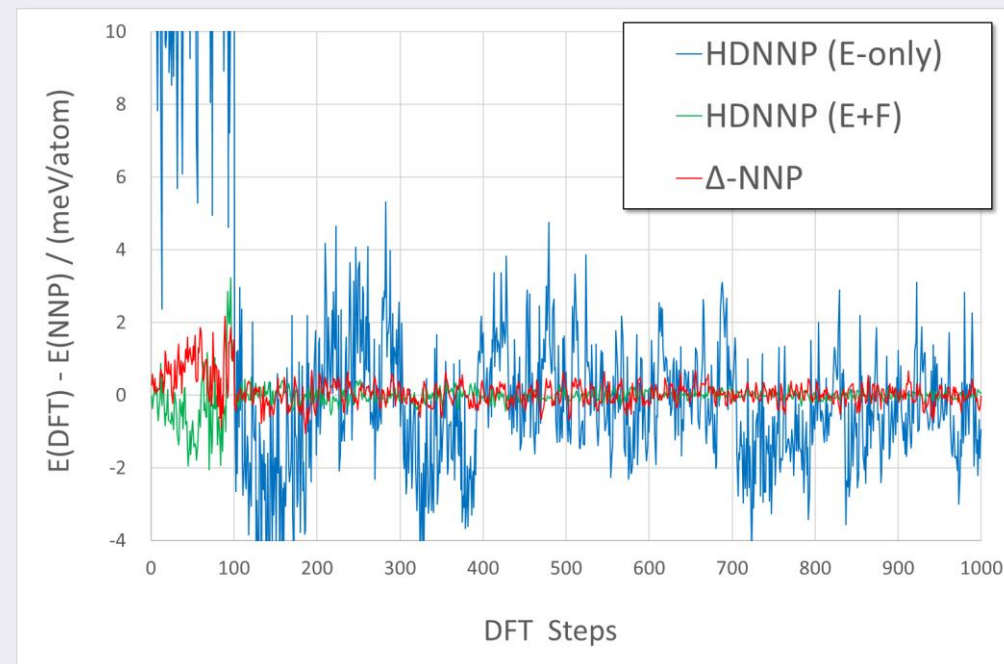
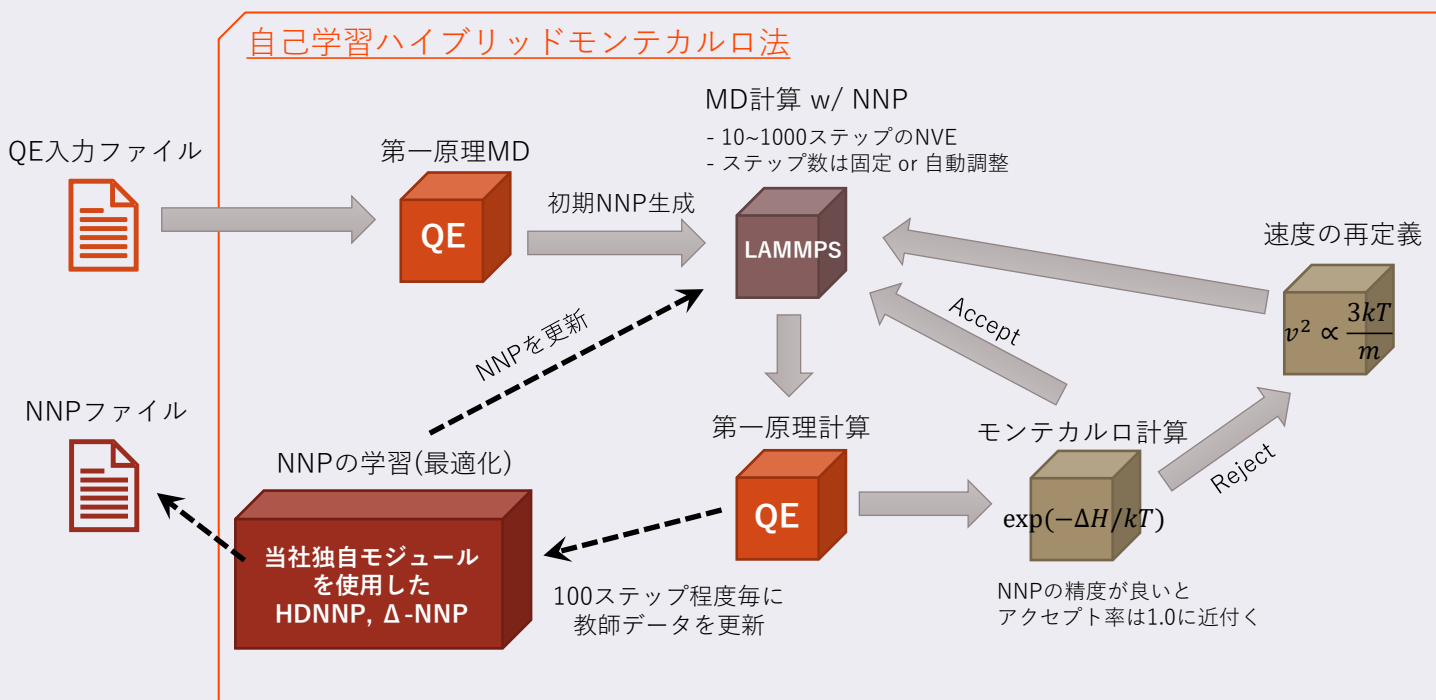


自己学習ハイブリッドモンテカルロ法による Neural Network力場の自動生成機能を搭載

Advance/NeuralMD Ver.1.6 に「自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」が搭載されます。自己学習ハイブリッドモンテカルロ法は、日本原子力研究開発機構により開発された第一原理モンテカルロ法のアルゴリズムです(Y. Nagai, et al., Rhys. Rev. B 102 041124 (2020))。モンテカルロ法における提案構造としてNeural Network力場による分子動力学計算のトラジェクトリーを適用することで、モンテカルロ計算自体については第一原理の精度が保証されつつ、効率的な構造のサンプリングが実現できます。モンテカルロ計算の実行と同時に、各構造で計算された第一原理計算の結果を利用してNeural Network力場の学習についても並行して実施されます。その結果、当該手法を実行すると対象とする系に特化したNeural Network力場が自動生成されることになります。ユーザーが自ら教師データを作る必要が無く、Quantum ESPRESSOの入力ファイルを準備するだけでよいため、力場作成の手間が大幅に削減できます。さらに、当社のGUI製品であるAdvance/NanoLaboには当該機能のインターフェースが実装されており、**ユーザーは画面上のボタンを押すだけでNeural Network力場が簡単に作成できます。**



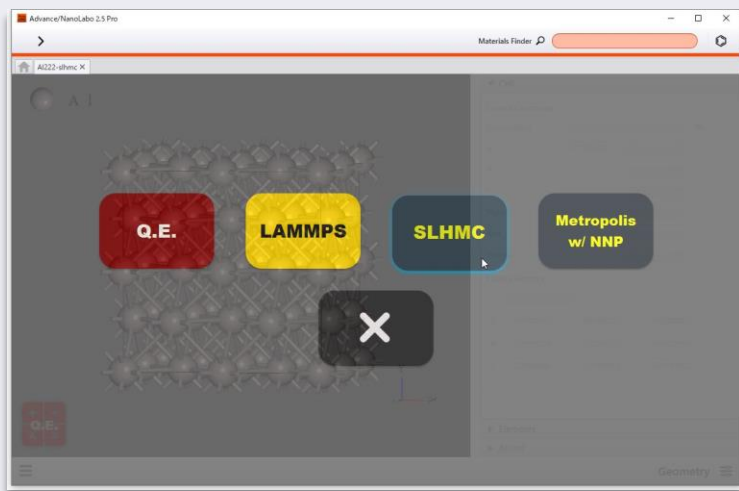
α - Al_2O_3 での計算例。1000~2000ステップで十分に良い精度の力場が生成される。

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法のメリット

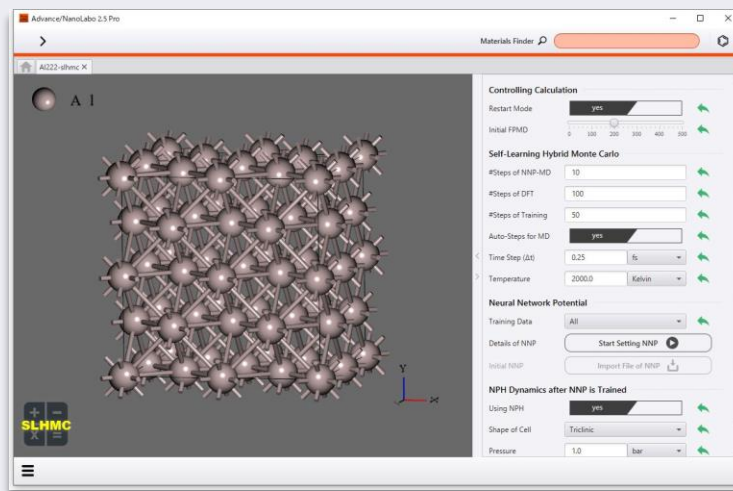
- ✓ ユーザーの練度や作成手順に依存せず、常に同水準のNeural Network力場が生成可能。
- ✓ 計算プロセスが自動化されているため、ユーザーが行うべき操作が極めて少ない。
- ✓ 操作手順が少ないことに加え、教師データの数も低減できる傾向にあるため、力場作成に要する時間を大幅に削減できる。これまで数週間掛かっていた作業が半日～数日ほどに。
- ✓ モンテカルロ計算の結果を使って、厳密に第一原理の精度で物理量の評価が可能。

Advance/NanoLaboからの操作手順

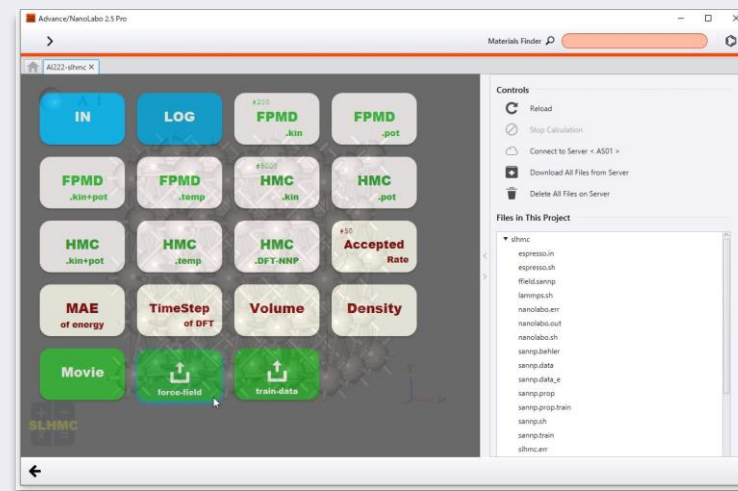
①計算モードを自己学習ハイブリッドモンテカルロ法(SLHMC)に変更



②計算条件などを設定して計算実行



③計算完了後に力場ファイルをエクスポート



当社の提供するNeural Network力場の各種製品

Advance/NeuralMD

- Behler-Parrinello型のNeural Network力場
- 個別の系に最適化された力場をユーザーが作成
- 原子番号で重み付けされた対称関数により多元素系に対応
- 原子ごとの電荷を第3世代アルゴリズムで計算可能
- 当社独自開発の Δ -NNP法により教師データの数を低減 & ロバスト性の向上
- 古典モンテカルロ法により未知構造のみを選択的に生成
- 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法による力場自動生成
- MPI + OpenMP並列に対応

Open Catalyst 2020

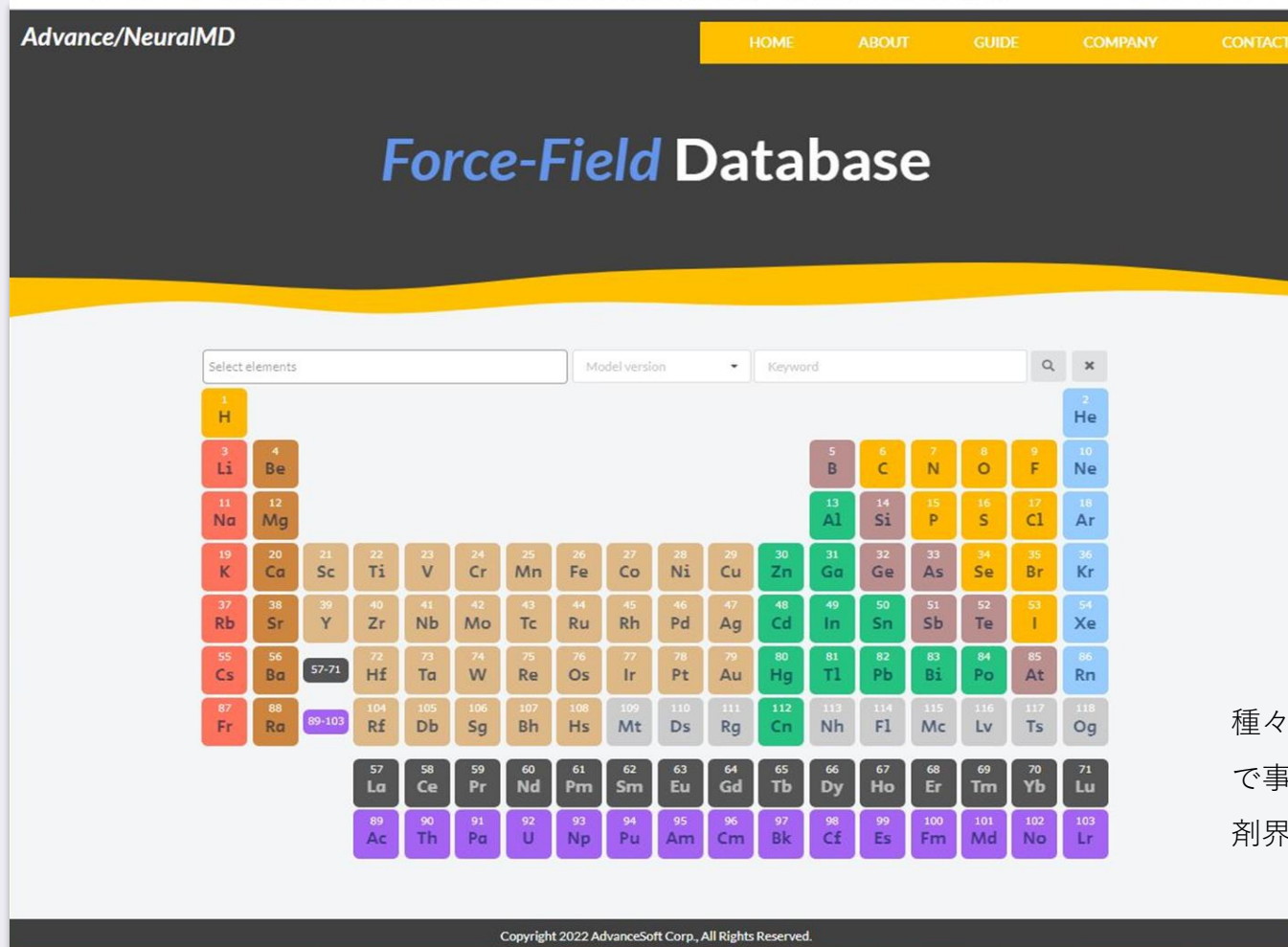
- Facebook社の開発したGraph Neural Network力場
- 事前に学習済みの力場データを使用するため、ユーザーによる力場作成が不要
- LAMMPSから力場計算用のPythonモジュールを参照
- 触媒系に最適化されているが、ある程度汎用的な使い方も可能
- 計算精度は個別の系に最適化されたBehler-Parrinello型に劣る
- 計算コストは非常に重たく、Behler-Parrinello型の150～200倍程度の計算時間
- OpenMP並列、GPUに対応 (GPU使用時は30倍ほど高速化される)

Advance/NanoLabo (GUI)

- Grand-Project機能による教師データの作成および管理、Neural Network力場の学習ジョブの実行
- Advance/NeuralMDおよびOpen Catalyst 2020の力場を使用したLAMMPSでのMD計算の実行
- 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法のインターフェース

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を 活用して力場データベースを作成中

→ 2022年夏~秋に初版公開予定



種々の材料について自己学習ハイブリッドモンテカルロ法
で事前に作成済みの力場を公開予定。(例) 有機分子、接着
剤界面、イオン液体、Liイオン伝導体、・・・