

Facebook社の開発した汎用型Graph Neural Network力場が無料で利用可能に^{※1}

Facebook社とカーネギーメロン大学が主催するOpen Catalyst Project^{※2}では、触媒系を主なターゲットとして最新のGraph Neural Networkを活用したいくつかのシミュレーション技術が開発されており、その中の一つに機械学習力場があります。この機械学習力場は約1億3千万個の第一原理計算の結果を教師データとしており、触媒系のみならず種々の結晶・表面系・有機分子などに適用可能な汎用性を有しています。2021年末に最終的な成果物が公開され、アドバンスソフトでは世界に先駆けてこれを実用化いたしました。具体的には、Python/PyTorchで実装された当該力場をLAMMPS^{※3}から参照するためのインターフェースを開発し、さらに、当社のGUI製品であるAdvance/NanoLaboからLAMMPSを呼び出すことでGUI画面上で手軽に汎用型Graph Neural Network(GNN)力場を使った分子動力学計算が可能となりました^{※4}。

汎用型GNN力場を使うメリット

✓ ユーザーによる力場作成が不要

事前に学習済みのNeural Networkが提供されているため、力場を自作することなく、原子座標の情報のみで分子動力学計算が実施できます。

✓ 適用範囲の広さ

結晶と分子を同時に同じ力場で扱うことが出来るため、無機材料/有機材料の界面など種々の問題に適用できます。

✓ 第一原理計算に近い計算精度

第一原理(DFT)計算の結果を教師データとしているため、計算されたエネルギーや力はある程度の定量性を持ちます。

Advance/NeuralMDとの併用

汎用型GNN力場はその汎用性の高さ故に、逆に計算精度では専用型のBehler-Parrinello Neural Network(BP-NN)力場に劣る傾向にあります。当社のBP-NN力場運用ツールAdvance/NeuralMDの教師データ生成に汎用型GNN力場を利用することで計算精度の問題を解決できます。これにより、より短時間で高精度に大規模系のシミュレーションが実現できます。

仕様詳細

解析対象	結晶、表面系、有機分子など (ゼオライトなどでも検証したところ比較的良好)	クラウド	任意のクラウド環境で利用可能 ^{※5}
対応元素	ランタノイドを含むほぼ全ての元素 (詳細は調査中)	オンプレミス	任意のマシン環境で利用可能
力場種別	GemNetなどS2EFタスクで最適化された5種	モデリング	GUI上で種々のモデル作成が可能 ^{※1}
既存力場との併用	LAMMPSのハイブリッド力場法が適用可能	可視化	GUI上で入出力データを可視化 ^{※1}
CPUでの並列	OpenMPスレッド並列 (MPIには非対応)	計算実行方法	LAMMPSの実行方法に準拠、GUIからのジョブ投入 ^{※1}
GPUの利用可否	PyTorchによる処理がGPU化	価格	計算エンジン(LAMMPS、汎用型GNN力場)は無料、GUIは有償 ^{※1}

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。デモンストレーションも可能です。

〒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 FAX: 03-5283-6580

URL: <http://www.advancesoft.jp/>

E-mail: office@advancesoft.jp



^{※1} GUIから汎用型Graph Neural Network力場を使用される場合には、別途Advance/NanoLaboのライセンス料金(50万円~)が発生します。

^{※2} <https://opencatalystproject.org> ^{※3} <https://www.lammps.org> ^{※4} 汎用型Graph Neural Network力場のインターフェースを搭載したLAMMPSは <https://github.com/advancesoftcorp/lammps>にて公開しています(無償利用可)。Advance/NanoLaboにおけるインターフェースはVer.2.4(2022年2月リリース)より利用可能です。 ^{※5} 別途クラウドベンダーとの契約が必要です。

ソフトウェアシステムの構成

Advance/NanoLabo [GUI]

- 結晶構造、分子構造の取得生成
- 表面、界面、高分子、溶液などのモデリング
- LAMMPSの入力データを作成、計算結果を可視化
- ローカルマシン、計算サーバー、クラウドにてLAMMPSの計算ジョブを実行

LAMMPS [MD計算エンジン]

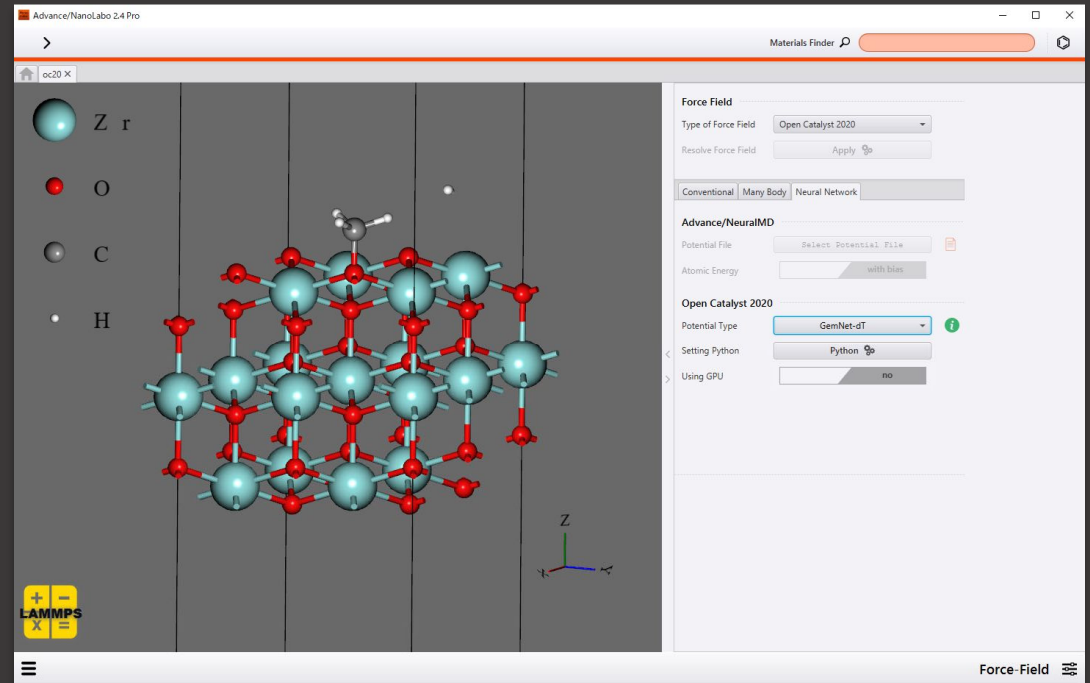
- 分子動力学計算の各種機能 (NVE, NVT, minimize など)
- 計算結果の解析 (動径分布関数、拡散係数 など)
- 汎用型GNN力場の呼び出し (既存力場とハイブリッドも可)

汎用型GNN力場 [力場エンジン]

- Python/PyTorchで実装されたモジュール
- OpenMP or GPUに対応
- GemNet, DimeNet++など5種が利用可能

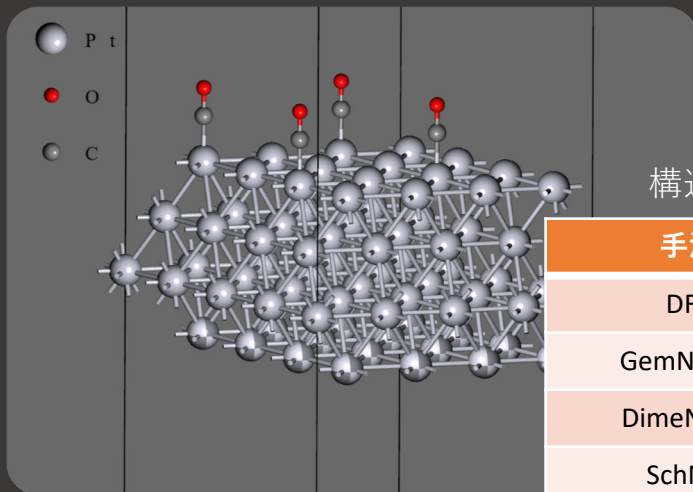
Advance/NanoLabo Ver.2.4

GUI画面から、汎用GNN力場の種類やGPU使用有無を設定可能



計算事例

Pt(111)表面のtopサイトへのCO分子吸着



構造最適化後の吸着エネルギー

手法	吸着エネルギー
DFT	1.42 eV
GemNet-dT	1.11 eV
DimeNet++	1.27 eV
SchNet	1.36 eV

Pt-COのポテンシャル曲線

