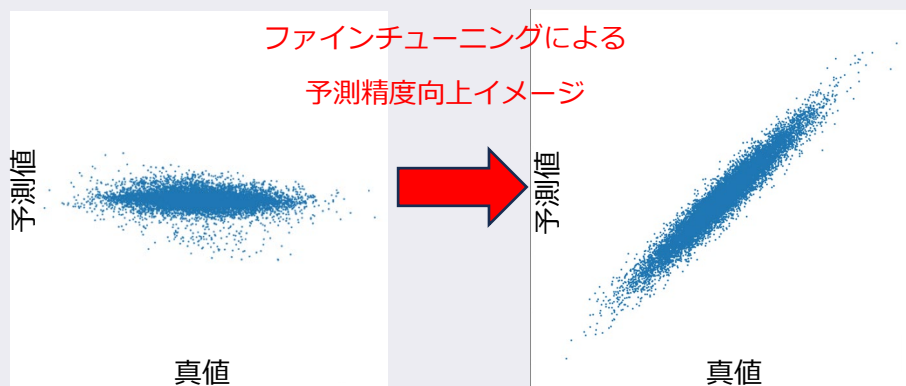


2023年11月、サービス開始

汎用 GNN 力場ファインチューニング サービスの紹介



アドバンスソフト株式会社では、グラフニューラルネットワーク(Graph Neural Networks、GNN)に基づく汎用力場 (Universal Interatomic Potentials、UIP) である M3GNet^{※1} 及び CHGNet^{※2} を使用した、事前学習済みモデルのファインチューニングサービスを 2023年11月より提供開始いたします。汎用力場は幅広い材料系に適用可能な非常に優れた手法ではあるものの、その反面、個々の系に対する精度がやや低下するという欠点があります。この欠点を補完すべく、適用対象の材料群をある程度絞り込みつつ、事前学習済みモデルを再学習させるという手法がファインチューニングです。特定の材料群にフォーカスした材料探索 (Materials Informatics、MI) を行いたい場合に、計算コスト及び精度の観点から最適なソリューションとなります。当社では、お客様のご要望に応じて汎用力場をファインチューニングして、最適化された力場を提供させていただきます。



【汎用 GNN 力場について】

GNN 力場は、ノードとエッジで構成されるグラフ構造で原子間相互作用を表現しており、多様な化学空間に柔軟に対応可能です。GNN 力場に三体相互作用を組み込んだ M3GNet、さらに磁気モーメントを用いて電荷情報を組み込んだ CHGNet は、熱力学安定性予測の性能評価において最高評価を得ております^{※3}。M3GNet 及び CHGNet の GitHub リポジトリでは、Materials Project^{※4} で行われた大規模な構造緩和データで訓練された、周期表全体で動作する事前学習済みモデルが公開されています。この事前学習済みモデルは、種々の無機材料に適用可能な汎用力場となっています。

※1 <https://matgl.ai/#m3gnet>, <https://github.com/materialsvirtuallab/matgl>

※2 <https://chgnet.lbl.gov/>, <https://github.com/CederGroupHub/chgnet>

※3 J. Riebesell et al., Matbench Discovery: An evaluation framework for machine learning crystal stability prediction, arXiv:2308.14920v1 [cond-mat.mtrl-sci] (2023).

※4 <https://next-gen.materialsproject.org/>

ファインチューニングによる予測精度向上事例

● 対象とした結晶

BCC 構造および HCP 構造の Ti64 合金。Ti64 は軽くて硬い典型的なチタン合金。3D 積層造形や粉末冶金の材料にも使われています。

● 教師データ

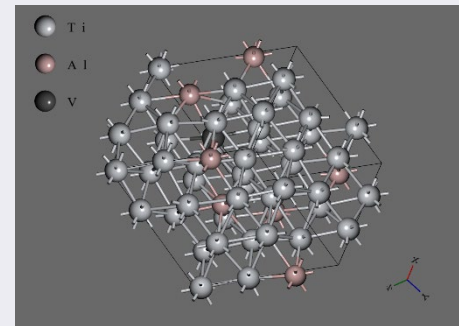
Quantum ESPRESSO^{※5} で生成した、エネルギー、力で構成（温度は 1000K）。4329 構造。

● ファインチューニングする目的

M3GNet/CHGNet 共に、事前学習済みモデルで体積弾性率を計算したところ、実験値を 20~30%ほど過小評価しました。教師データを使用してファインチューニングすることで、より実験値に近い結果を期待できます。

● 体積弾性率計算

- BCC 型 Ti 結晶のスーパーセル（27 原子系）の 3 原子を Al に 1 原子を V に置換して、Ti64 合金を模擬しています。
- ファインチューニング済みモデルを使用して結晶構造を最適化した後、体積を 98%~102%の範囲で変化させて体積弾性率を評価しました。



計算手法	体積弾性率 / GPa
実験値	119.7
Quantum ESPRESSO	109.0
M3GNet	99.2
M3GNet (F.T.)	109.7
CHGNet	89.8
CHGNet (F.T.)	101.3

ファインチューニング(F.T.)によって
実験値により近い結果が得られました。



(10%程度改善)

※5 Quantum ESPRESSO は、GPL ライセンスにて配布されている
第一原理計算のオープンソースソフトウェア。
(<https://www.quantum-espresso.org>)

弊社ファインチューニングサービスについて

- 受託解析業務として実施いたします。
- 教師データは、お客様にご用意頂く、弊社側で作成する、どちらでも対応可能です。
- 作成したファインチューニング済みモデルは、弊社製品 Advance/NanoLabo から利用可能です。
- ご予算に応じて対応させていただきます。お気軽にご相談ください。

アドバンスソフト株式会社

〒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

