

アドバンス・シミュレーション 第3回 ・セミナー 2022

2022年 9月30日(金) 離

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
- 招待講演
「機械学習による材料物性シミュレーションの高速化」 3
2. 国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター
副主任研究員 永井 佑紀 様
3. アドバンスソフトからの情報提供 39

講演概要

「機械学習による材料物性シミュレーションの高速化」

国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構

システム計算科学センター 副主任研究員 永井 佑紀 様

機械学習は様々な分野で使われていますが、多くは「判断する、推測する」事が目的です。しかし、機械学習の力はこれだけではありません。本セミナーでは、機械学習を「高速化」に使う話を紹介します。材料科学分野においては、より正確なシミュレーションを行う為には量子力学的効果を計算に取り入れる必要があります、これが系のサイズや時間を制限していました。しかし、この量子力学的効果の計算を模倣するニューラルネットワークがあれば、シミュレーションを大幅に（1,000倍以上）高速化することができます。

本セミナーでは、「機械学習シミュレーション」の紹介と最近の進展についてお話しします。



アドバンスソフト株式会社 セミナー事務局

〒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

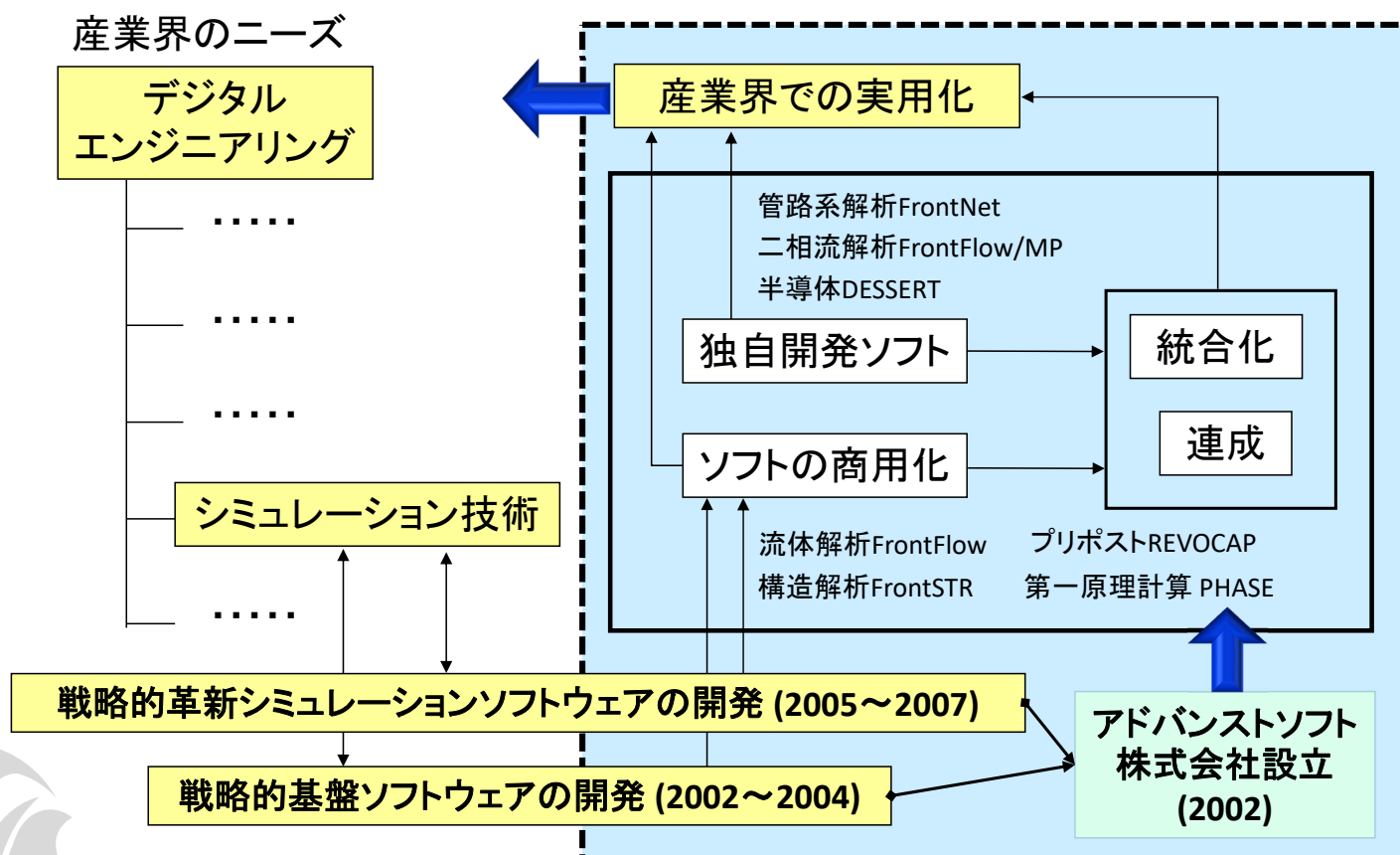
URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

アドバンスソフト株式会社のご紹介

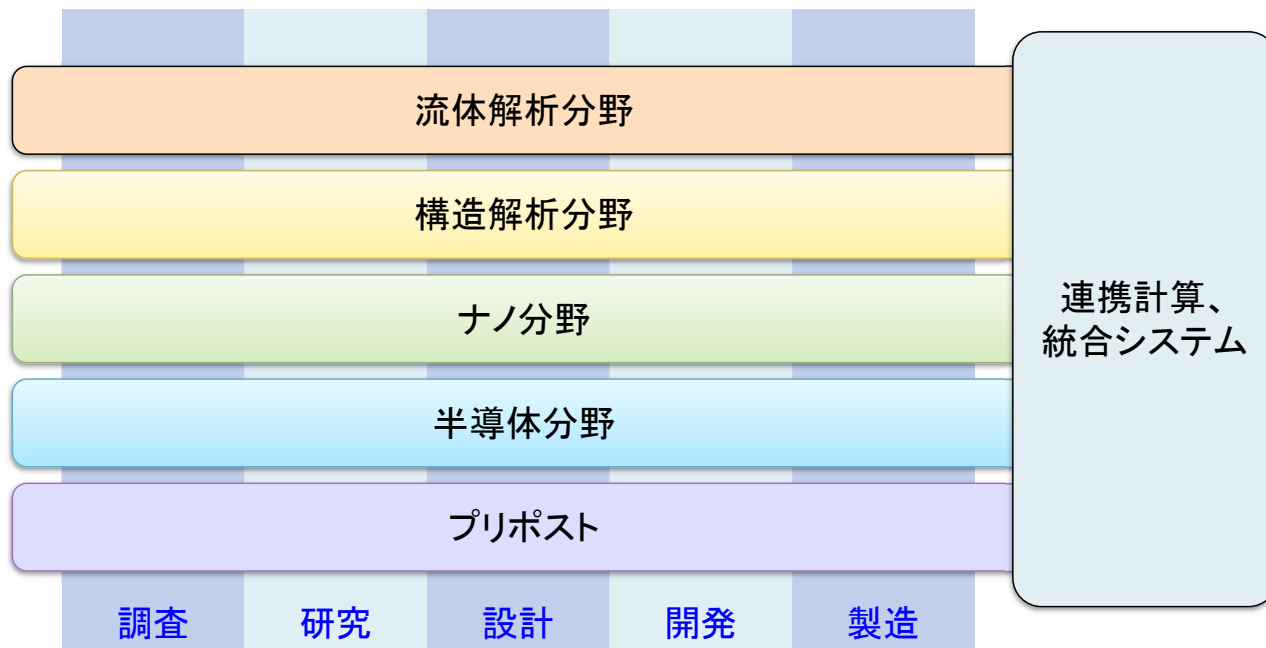
第3回 アドバンス・シミュレーション・セミナー
(日本原子力研究開発機構 永井 佑紀 副主任研究員 ご講演回)

2022年9月30日 (金) 開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

<p>第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE</p> <p>密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。</p> <p>ナノ材料 GUI 付属</p>	<p>ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo</p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。</p> <p>ナノ材料 プリポスト</p>	<p>流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red</p> <p>非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3次元流体解析ソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i</p> <p>非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に超音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。</p> <p>流体</p>
<p>大規模 3次元 TCAD システム Advance/TCAD</p> <p>超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3次元 TCAD システムです。</p> <p>半導体デバイス GUI 付属</p>	<p>ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD</p> <p>Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。</p> <p>ナノ材料 AI・機械学習</p>	<p>気液二相解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP</p> <p>沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet</p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave</p> <p>マクスウェル方程式を FDTD 法で 3次元的に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。</p> <p>光波・電磁波</p>	<p>構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR</p> <p>固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>構造</p>	<p>大気拡散影響予測システム Advance/Emerg</p> <p>大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>	<p>深層学習用ツール Advance/iMacle</p> <p>機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限度の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。</p> <p>AI・機械学習</p>
<p>汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP</p> <p>解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。</p> <p>プリポスト</p>	<p>音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise</p> <p>環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>音響</p>	<p>自社による開発（国プロ含む） 開発チームによる質の高いサポートサービス カスタマイズや機能追加も応相談 並列数無制限（追加料金なし）</p>	

機械学習による材料物性シミュレーションの高速化

原子力機構システム計算科学センター
理研 革新知能統合研究センター (AIP)

永井佑紀

1

自己紹介

永井佑紀

経歴

- 2005: 北海道大学工学部応用物理学科卒業
- 2010: 博士(理学) 東京大学 (指導教官: 加藤雄介氏)
- 2010-2019 日本原子力研究開発機構 常勤研究員
- 2016-2017 米国マサチューセッツ工科大学客員研究員@ボストン
- 2018- 理研革新知能統合研究センター (AIP)客員研究員
- 2019- 日本原子力研究開発機構 副主任研究員

物性理論 (主に超伝導)

機械学習と物理学

専門分野

- 物性理論x機械学習
- 材料科学x機械学習



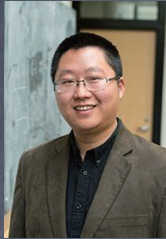
“物理学者,機械学習を使う —機械学習・深層学習の物理学への応用— ” 朝倉書店(2019/10)

第5章”自己学習モンテカルロ法”

2020- ディープラーニングと物理学 オンライン 世話人

精度が保証された機械学習: 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の開発etc

Collaborators



Liang Fu's group in MIT

YN, H. Shen, Y. Qi, J. Liu, and L. Fu
 "Self-learning Monte Carlo method:
 Continuous-time algorithm",
 Physical Review B 96, 161102(R) (2017)
Editors' Suggestion

2016-2017 米国MITで客員研究員
 をしていたのがきっかけ

日本原子力研究開発機構システム計算科学センター

Masahiko Okumura, Keita Kobayashi, Motoyuki Shiga

YN, M. Okumura, K. Kobayashi, and M. Shiga,
 "Self-learning Hybrid Monte Carlo: A First-principles Approach",
 Phys. Rev. B **102**, 041124(R) (2020)

YN, M. Okumura, A. Tanaka
 "Self-learning Monte Carlo method with Behler-Parrinello neural networks",
 Phys. Rev. B **101**, 115111 (2020)

K. Kobayashi, YN, M. Itakura, and M. Shiga,
 "Self-learning hybrid Monte Carlo method for isothermal-isobaric
 ensemble: Application to liquid silica",
 J. Chem. Phys. **155**, 034106 (2021)

他：格子QCD(量子色力学)への応用

今日は話しません

YN, Akinori Tanaka, Akio Tomiya,
 "Self-learning Monte-Carlo for non-abelian gauge theory with dynamical fermions",
 arXiv:2010.11900
 Akio Tomiya and YN
 "Gauge covariant neural network for 4 dimensional non-abelian gauge theory",
 arXiv:2103.11965

今日の講演

機械学習を何に使うか？

猫画像判別、自動運転、囲碁、自動お絵描きetc

何かを判断したり、推測したりを機械が行う -> 代わりにやってもらう



シミュレーションに機械学習を使うには？

これまで計算が大変だった部分を機械が行う



シミュレーションの高速化に機械学習を用いる

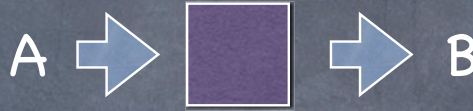
今日の講演

シミュレーションに機械学習を使うには？

これまで計算が大変だった部分を機械が行う



定式化済みだけど計算コスト大



計算コストの軽い機械

シミュレーションの高速化に機械学習を用いる



f(x): 場の量子論、密度汎関数理論、流体力学etc



g(x): ニューラルネットワーク

機械学習を使ったシミュレーションの妥当性はどう検証するのか？

-> 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の提案

アウトライン

- 機械学習の発展
- 物理学と機械学習
- 原子・分子シミュレーションと機械学習
- 機械学習分子シミュレーションの問題点と解決策：自己学習ハイブリッドモンテカルロ法
- 適用例：SiO₂とYNi₂B₂C
- まとめ

機械学習の発展

機械学習の発展

2012年 Google : Youtubeから1000万枚の画像をインプット

Google が 2012 年に発表した、「ネコを教師なしで認識できた例」
<http://googleblog.blogspot.jp/2012/06/using-large-scale-brain-simulations-for.html>

Youtube から 200 x 200 pixe の画像を 1000 万枚 (人間の顔、猫などが含まれる画像) をインプットとした

9階層のニューロを構築

コンピュータが最も「ネコ」と反応する画像がコレ!

教師なしで、「顔に強く反応」し、「ネコに強く反応」する仕組みができた

猫を教師なしで認識に成功
 どれが猫か教えない

機械学習 (ディープラーニング)
 の威力を示した

これまでの機械学習 :
 「猫は耳がある」「猫には二つ目がある」
 →人間が猫を定義していた

機械が猫を学習する (特徴量学習)

→第三次人工知能ブーム

<https://iotnews.jp/archives/11680>

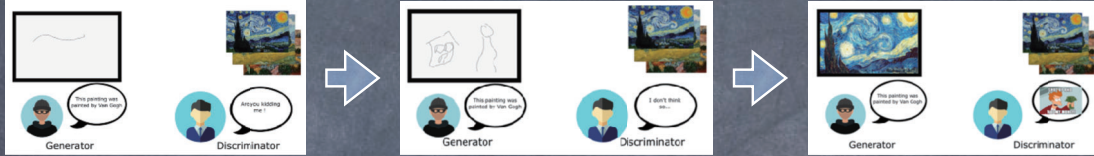
機械学習の発展

2014年

Deep Convolutional Generative Adversarial Networks (DCGAN)

<https://medium.freecodecamp.org/how-ai-can-learn-to-generate-pictures-of-cats-ba692cb6eae4>

鷹作職人AIと判別人AIの両方をトレーニングする



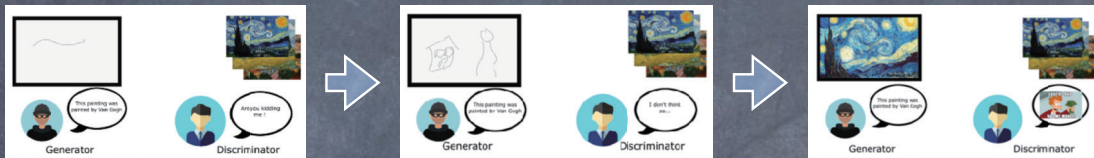
機械学習の発展

2014年

Deep Convolutional Generative Adversarial Networks (DCGAN)

<https://medium.freecodecamp.org/how-ai-can-learn-to-generate-pictures-of-cats-ba692cb6eae4>

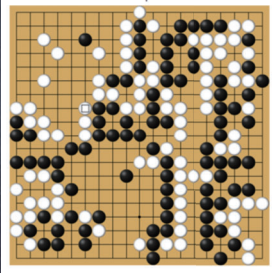
鷹作職人AIと判別人AIの両方をトレーニングする



敵対的ニューラルネットワークで自動生成した猫画像

機械学習の発展

Google DeepMindのコンピュータ囲碁プログラム:AlphaGoの衝撃



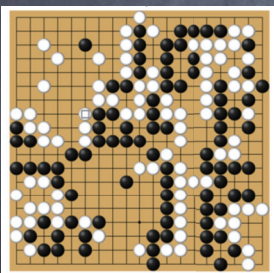
2016年3月 AlphaGo Lee(2代目)

韓国プロ棋士イ・セドル（世界最強棋士）に勝利（4勝1敗）

参考：ドキュメンタリー「アルファ碁」 Netflix

機械学習の発展

Google DeepMindのコンピュータ囲碁プログラム:AlphaGoの衝撃



2016年3月 AlphaGo Lee(2代目)

韓国プロ棋士イ・セドル（世界最強棋士）に勝利（4勝1敗）

参考：ドキュメンタリー「アルファ碁」 Netflix

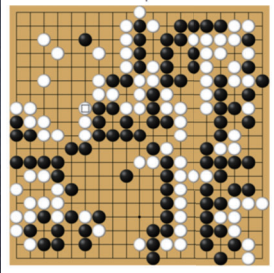
2017年5月 AlphaGo Master(3代目)

人類最強棋士 柯潔（カ・ケツ）に全勝勝利

人間の棋譜から学習→自己対戦で強化

機械学習の発展

Google DeepMindのコンピュータ囲碁プログラム:AlphaGoの衝撃



2016年3月 AlphaGo Lee(2代目)

韓国プロ棋士イ・セドル（世界最強棋士）に勝利（4勝1敗）

参考：ドキュメンタリー「アルファ碁」 Netflix

2017年5月 AlphaGo Master(3代目)

人類最強棋士 柯潔（カ・ケツ）に全勝勝利

人間の棋譜から学習→自己対戦で強化

2017年10月 AlphaGo Zero(4代目)

碁のルールだけ教える→自己対戦で強化

3日後：AlphaGo Leeに100戦全勝

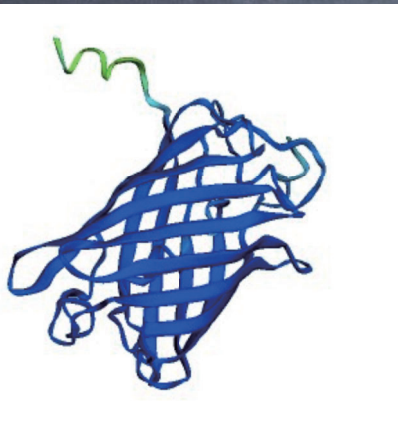
40日後（2900万対局）：AlphaGo Masterを上回る

未知の定石を操り始める

機械学習の進展

2021年 Alphafold2の登場 タンパク質の塩基配列から構造を推定可能

<https://www.chem-station.com/blog/2021/07/alphafold2.html>

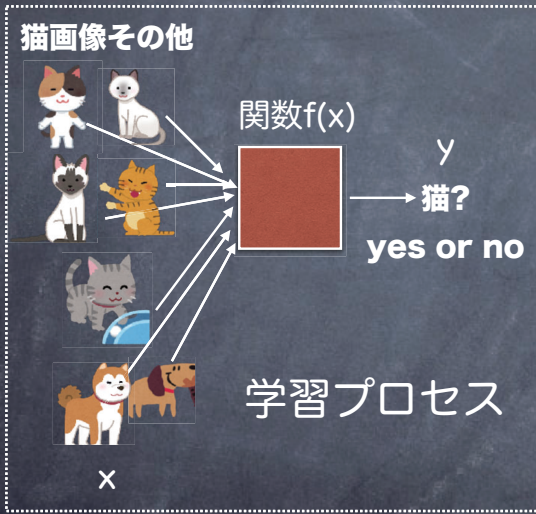


1. ゲノムシーケンスデータから塩基配列だけがわかっているタンパク質について、アミノ酸の一次配列からタンパク質の構造と機能を推定したい
2. タンパク質の結晶構造を決めるために結晶を作って回折像を得たものの、位相が決定できずに途中で解析がお蔵入りしてしまっている。計算した予測構造を活用して構造解析をやり遂げたい
3. タンパク質同士がどんな複合体を形成するかシミュレーションをやりたい

膨大なデータを入力することで、高精度な予測を行う

機械学習とは

教師あり学習



大量の入力データxを用いて、 $f(x)=y$ を満たす関数f(x)を決める

例：囲碁棋譜データ→勝利の方程式

囲碁プロ棋士に勝利

機械学習とは

教師あり学習

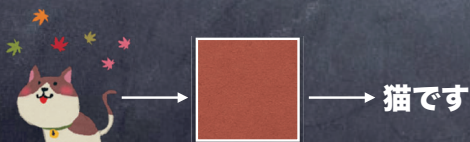
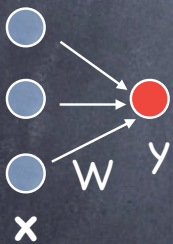
大量の入力データxを用いて、 $f(x)=y$ を満たす関数f(x)を決める

一番シンプルな例

$$y = ax + b \quad \text{直線で近似 (線形回帰)}$$

インプットが複数→xがベクトル

$$y = Wx + b$$



機械学習とは

教師あり学習

大量の入力データ x を用いて、 $f(x)=y$ を満たす関数 $f(x)$ を決める

一番シンプルな例

$$y = ax + b \quad \text{直線で近似 (線形回帰)}$$

インプットが複数 $\rightarrow x$ がベクトル

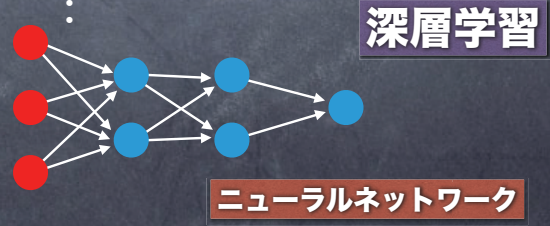
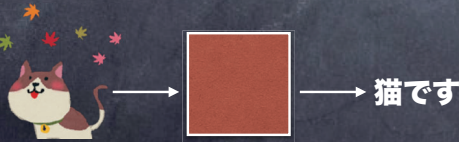
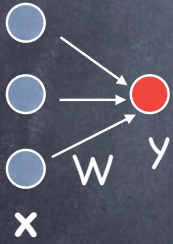
$$y = Wx + b$$

もっと表現力を高めたい

$$y = W_2 f(W_1 x + b_1) + b$$

f : 非線形関数

$$y = W_3 f(W_2 f(W_1 x + b_1) + b_2) + b$$



物理学と機械学習

物理学と機械学習は相性が良い

物理学では何をするか

観測する



ボールの落下地点を記録する

法則を見つける

- ニュートンの法則？
- 空気抵抗を無視してみる
- 大体合う？
- もっと精緻に考える？
- 形状も考える？

理論を構築し、
解いて予測

機械学習では何をするか

物理学と機械学習は相性が良い

物理学では何をするか

観測する



ボールの落下地点を記録する

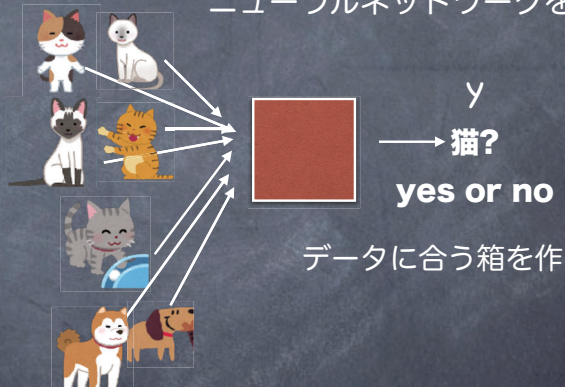
法則を見つける

- ニュートンの法則？
- 空気抵抗を無視してみる
- 大体合う？
- もっと精緻に考える？
- 形状も考える？

理論を構築し、
解いて予測

機械学習では何をするか

ニューラルネットワークを作る



データに合う箱を作る

データを集める

箱を作り、
入れて予測

ディープラーニングと物理学

機械学習を物理に使うアイデアは面白い！

永井、富谷（大阪国際工科専門職大学）、田中（理研）、橋本（京大）

で意気投合して色々企画

ディープラーニングと物理学

機械学習を物理に使うアイデアは面白い！

永井、富谷（大阪国際工科専門職大学）、田中（理研）、橋本（京大）

で意気投合して色々企画

国内研究会 Deep learning and Physics, 2017 素粒子、機械学習

国内研究会 Deep learning and Physics 2018 物性、素粒子、機械学習

物性担当の世話人として
永井参加



“物理学者、機械学習を使う —機械学習・深層学習の物理学への応用— ”

第5章”自己学習モンテカルロ法”

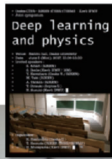
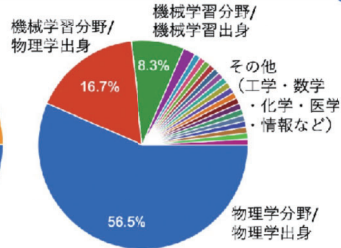
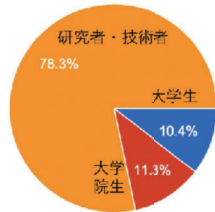
国際研究会 Deep learning and Physics 2019 物性、素粒子、機械学習

オンラインセミナー 2020- Deep learning and Physics Online 現在35回開催

コミュニティの形成

“Deep learning and physics”の名の下、2017年から研究会や国際シンポを組織し、現在は1000名のコミュニティを形成

現コミュニティ（2020年～、全 1054名）



2017年
勃興
シンポ
主催



2018年
継続
シンポ
主催



2019年
物理学会
シンポ
主催



2019年
国際
シンポ
主催



9

<https://mlphys.scphys.kyoto-u.ac.jp>

物理学

自然科学で最も精密な実験場
多階層の諸問題+数理の連携

機械学習

計算科学の爆発的進展分野
社会・技術のイノベーション

学習物理学

新法則の発見、新物質の開拓

機械学習と物理学の理論的手法群の統合により基礎物理学の根本課題を解決

2022年度科研費学術変革領域A 代表：橋本幸士（京大）

機械学習と物理学の 理論的手法群の統合により基礎物理学の 根本課題を解決

学習物理学

——— 新法則の発見、新物質の開拓 ———

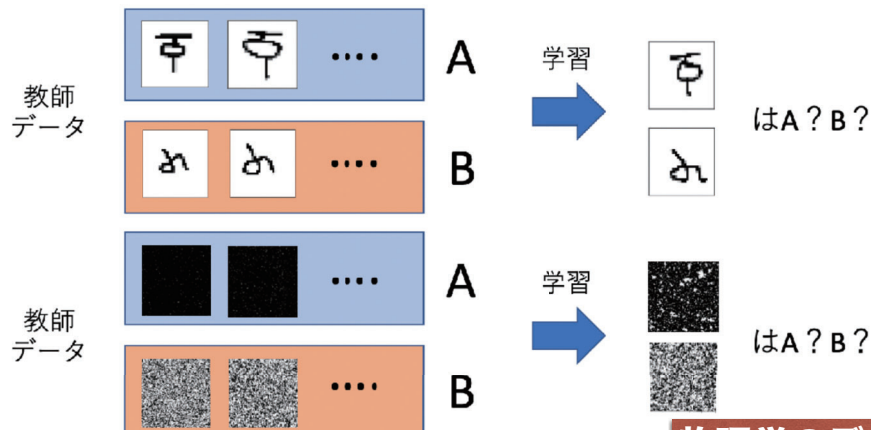
機械学習と物理学の理論的手法群の統合により基礎物理学の根本課題を解決

2022年度科研費学術変革領域A 代表：橋本幸士（京大）

機械学習とは？ 最適化の数理体系

2010年からの深層学習の爆発的研究成果が社会を変えている。
その心臓部はデータ駆動の関数最適化を行う数理体系である。

教師あり学習とは：教師データの学習で関数を最適化し未知データを予測

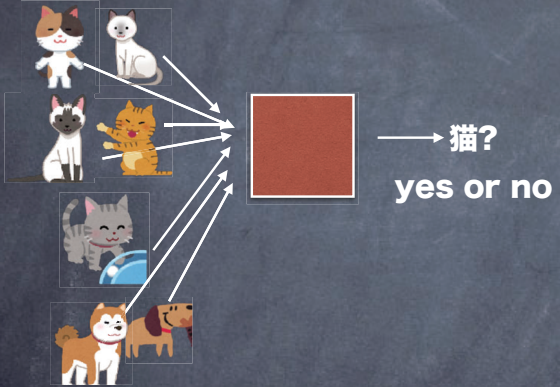


物理学のデータもデータである

機械学習をどう使うか

機械学習

学習によって作られたニューラルネットワーク



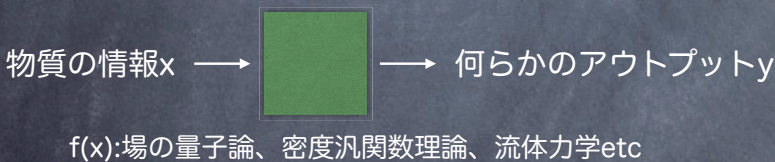
人間は「猫を識別する理論」を知らない
が「猫を識別する関数」は作れる
知っている理論に適用すると何が起こる?

物理学で、「インプットxから何かを計算する理論f(x)」を知っているとする
「インプットxから何かを計算する関数g(x)」をニューラルネットで作る
f(x)=g(x)となるg(x)を作ると何が嬉しいか?

機械学習をどう使うか

物理学で、「インプットxから何かを計算する理論f(x)」を知っているとする
「インプットxから何かを計算する関数g(x)」をニューラルネットで作る
f(x)=g(x)となるg(x)を作ると何が嬉しいか?

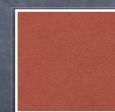
物理学



違いは何か



f(x): 非常に計算が大変な場合がある



g(x): 学習が終われば計算は一瞬

計算の高速化に使うことができる!

原子・分子シミュレーションと機械学習

量子力学と物質

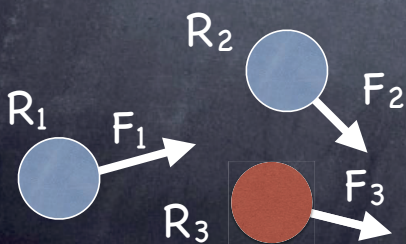
我々は量子力学を知っている

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_M) = E\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_M) \quad \text{注：時間依存がない場合}$$

電子位置 r と原子核の位置 R に関する多体のシュレーディンガー方程式を知っている
 これが解ければ物質に関する殆どのがわかる (はず)

密度汎関数理論の登場(1998年ノーベル化学賞Walter Kohn)によって

$E^{\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_M}$ は計算できるようになった (原子核位置 R を固定し電子の量子性を考慮)



あらゆるものは原子からできている

固体、液体、気体、電池、生体、創薬、ウイルスetc.
 計算ができればなんでもシミュレーションできる？

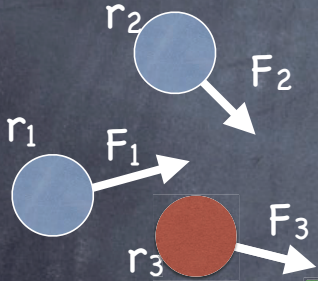
-> 計算が重たい!

分子動力学法 (MD)

原子や分子間に働く力がわかればシミュレーションできる

Lennard-Jonesポテンシャル等

エネルギーから力は計算できる



$$F_1 = \frac{\partial E(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_1} \quad F_2 = \frac{\partial E(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_2} \quad F_3 = \frac{\partial E(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_3}$$

精度の良いエネルギー評価ができれば精度の良い力がわかる

第一原理計算 -> 精度の良いエネルギーの評価が可能

密度汎関数理論(DFT)

各時刻ごとにDFT計算を行えば、精度の良い力が計算できる

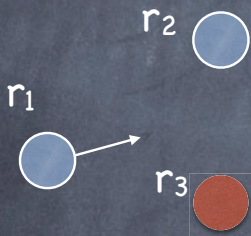
典型的には、1fsごとにDFT計算を行う

f -> p -> n -> μ -> m -> 1s ニューラルネットに置き換えよう

MDにおける機械学習

インプット

原子位置 $\{r_i\}$



第一原理計算etc.

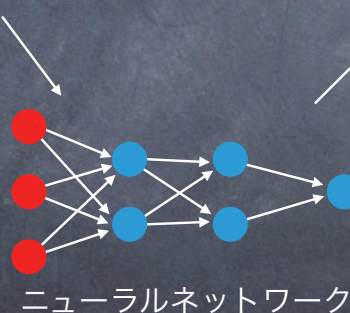


アウトプット

ポテンシャルエネルギー $E(\{r_i\})$

原子間に働く力

$$F_1 = \frac{\partial E(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_1}$$



インプットを入れるとアウトプットを返すようなニューラルネットを作りさえすれば良い?

そんなに簡単ではない

MDにおける機械学習

機械学習MDをしたい時はどのような時か



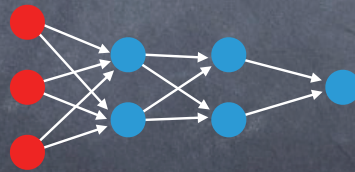
第一原理MD(DFT-MD)ができないような大きな系を扱いたい時

教師データが得られるような原子数が少ない系で学習してNN(ニューラルネットワーク)を作り、DFT-MDができないような原子数が多い系を取り扱いたい。

例えば: 32 H₂O でNNを訓練する-> 1000 H₂Oのシミュレーションがしたい

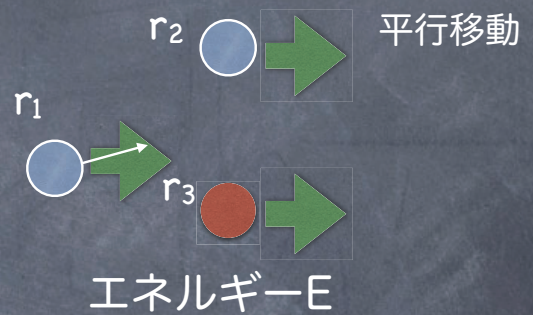
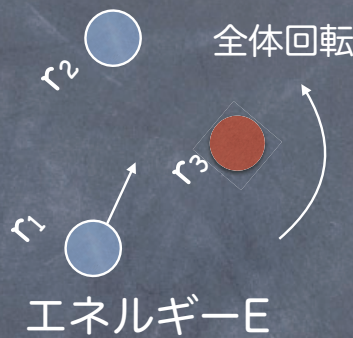
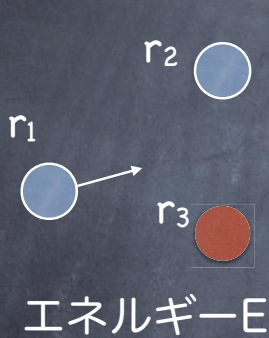
インプット

アウトプット



どんな形のニューラルネットワークが良いのか? (原子数の変化に対応したい)

どのようなニューラルネットワークが必要か



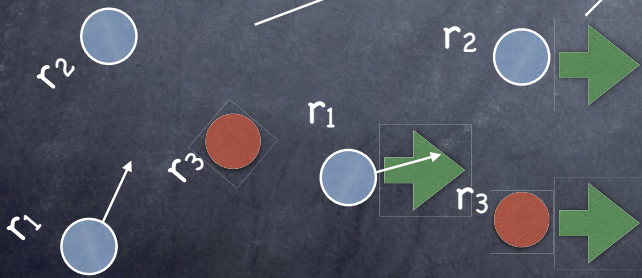
エネルギーは等しくなるべき

- 回転対称性
 - 並進対称性
 - 置換対称性
- を持つべき

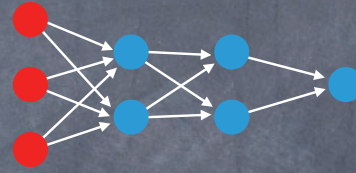
どのようなニューラルネットワークが必要か

エネルギーは等しくなるべき

回転対称性
並進対称性
置換対称性
を持つべき



インプット アウトプット



どれも同じインプットになるようにすれば良い

$x_1 \rightarrow X \rightarrow E$
 $x_2 \rightarrow X \rightarrow E$

どんなネットワークが良いか？

どのようなニューラルネットワークが必要か

さらに

シミュレーションの高速化に使いたいなら

エネルギーは等しくなるべき

回転対称性
並進対称性
置換対称性
を持つべき

1. 粒子数の変化に対応できるべき

32 H₂O でNNを訓練する-> 1000 H₂O
のシミュレーションがしたい

2. 推論も高速であるべき

何百万回も計算するので、一回あたりの
計算時間は小さくなるべき

深すぎるニューラルネットワークは良くなさそう

どんなネットワークが良いか？

Behler-Parrinello型ニューラルネットワーク

第一原理計算 -> 高精度な力の評価 とても重たい -> ニューラルネットワークでフィット

“Neural network models of potential energy surfaces”
T. B. Blank et al., J. Chem. Phys. **103**, 4129 (1995)

2007年 革新的な論文が登場

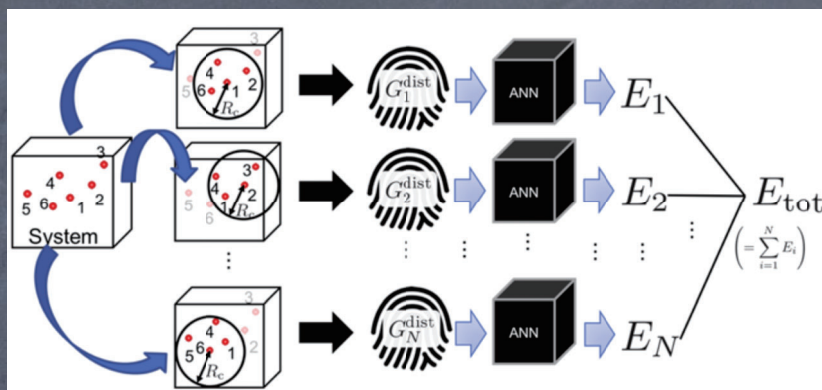
“Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces”, J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007)



1000倍以上高速に

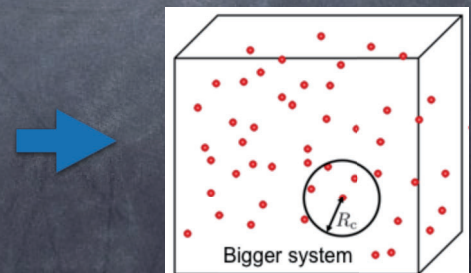
どんなネットワークなのか？

Behler-Parrinello型ニューラルネットワーク



基本的なアイデア

1. ニューラルネットワークはある原子周りの周辺環境に対応して構築される複数のNNからなる
2. 原子種が同じ場合、ニューラルネットワークの重みは同じとする

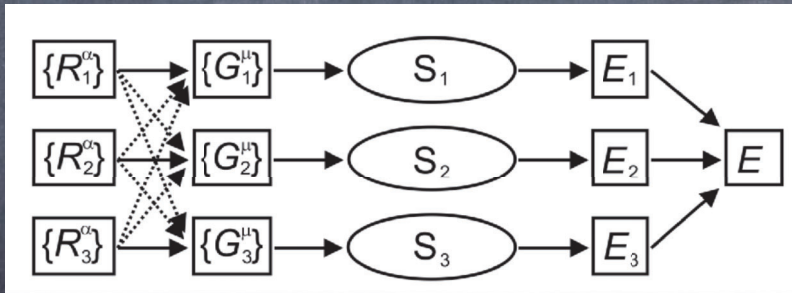


Behler-Parrinello型ニューラルネットワーク

原子位置を直接入力とする代わりに、 $(G_1(r_1, r_2, r_3), \dots, G_3(r_1, r_2, r_3))$ という関数の集団を入力とする

$$G_i^1 = \sum_{j \neq i}^{\text{all}} e^{-\eta(R_{ij} - R_s)^2} f_c(R_{ij}), \quad (2)$$

$$G_i^2 = 2^{1-\zeta} \sum_{j, k \neq i}^{\text{all}} (1 + \lambda \cos \theta_{ijk})^\zeta e^{-\eta(R_{ij}^2 + R_{ik}^2 + R_{jk}^2)} f_c(R_{ij}) f_c(R_{ik}) f_c(R_{jk}), \quad (3)$$



同じ原子種の場合同じニューラルネットワークを使用 (weight-sharing)

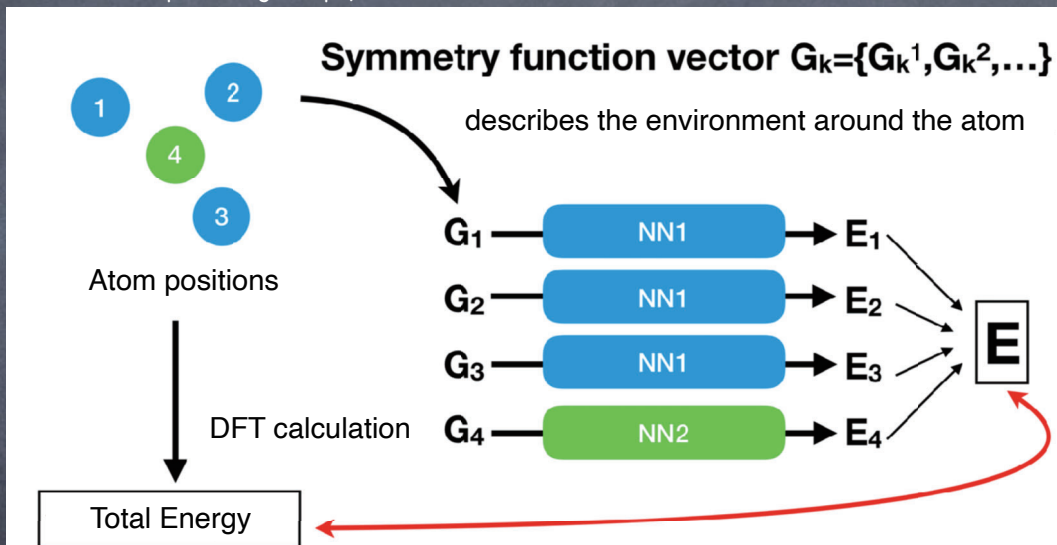
ベクトルGの長さは原子数に依存しない
-> 容易に原子数を変えることができる

S_1 : ある原子周りでのニューラルネットワーク

原子に関する回転対称性や並進対称性は自動的に満たされている

Behler-Parrinello neural networks

Schematic figure from Y. Ando, Deep-learning and physics 2018 @Osaka Univ.



同じ原子種の場合同じニューラルネットワークを使用 (weight-sharing)


ベクトルGの長さは原子数に依存しない -> 容易に原子数を変えることができる

やってみたい！そんな時には

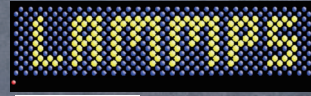
原子・分子シミュレーション用の
ニューラルネットワークを作るソフトウェア

MDを行うソフトウェア

オープンソースソフトウェア

 The Atomic Energy Network (aenet)

A neural network potential package (n2p2)



LAMMPS



PIMD：我々（原子力機構）が開発

市販ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD

汎用原子レベルシミュレータMatlantis


**新たなプログラミングなしに機械学習分子シミュレーションが
できる環境が整っている**

やってみたい！そんな時には

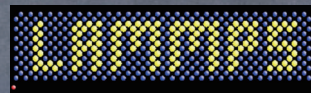
原子・分子シミュレーション用の
ニューラルネットワークを作るソフトウェア

MDを行うソフトウェア

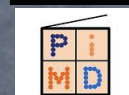
オープンソースソフトウェア

 The Atomic Energy Network (aenet)

A neural network potential package (n2p2)



LAMMPS



PIMD：我々（原子力機構）が開発

市販ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD

汎用原子レベルシミュレータMatlantis

**新たなプログラミングなしに機械学習分子シミュレーションが
できる環境が整っている**

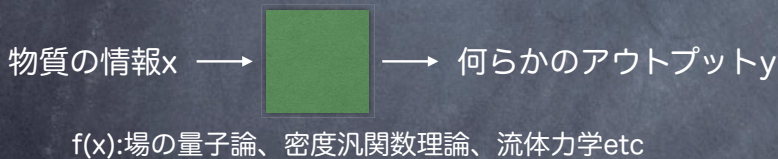
機械学習シミュレーションの問題点と解決策： 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

機械学習の(本質的な?)問題点

機械学習は何かを模倣する $g(x) \sim f(x)$

与えられたインプットから、オリジナルによく似たアウトプットを出力する

機械学習をシミュレーションに使う場合



ちゃんと計算できる部分を機械学習に置き換えた事による誤差は？

機械学習を使ったシミュレーションの妥当性はどう検証するのか？

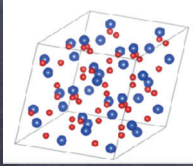
完全に一致することはないが、どこまで精度を高めれば良いのか？

機械学習MDの問題点について

訓練データはどうやって集めるのか？

1. 圧縮したり引き伸ばしたり歪めたりして作った色々な構造のデータを集める

様々な構造で第一原理計算を行う → 訓練データが集まる



問題点 1: どんな構造を入れるべき？ (構造候補は無限にある)

問題点 2: どのくらいの数の訓練データを集めれば、やりたいシミュレーションを再現するに足る十分な数だと結論づけられるのか？ 1000? 10000? 100000?

2. 第一原理MDを行なって得られる構造データを集める

毎ステップごとに新しい構造データが得られる

問題点 1: どのくらいの長さのMDを行えばいいのか？ どのくらいの数の訓練データを集めればやりたいシミュレーションを再現するに足る十分な数だと結論づけられるのか？

1000steps? 10000steps? 100000steps?

問題点 2: そもそも第一原理MDの計算コストが大きいために機械学習MDを使いたいわけで

第一原理MDでデータを集めていたら時間がかかってしまう

機械学習MDの問題点について

構築したニューラルネットワークの精度はどうやって評価するのか

機械学習ポテンシャルはDFTポテンシャルの近似
悪いニューラルネットワークは悪い力を生む

大きな系を取り扱いたい

大きな系は教師データがないが、使っているNNの精度をどうやって知ればいいのか？
(第一原理MDができないような大きな系で使いたいので、教師データがない)

機械学習MDは原子種の数が増える (4原子種以上) と不安定になりがち

複雑なインプットから作ったニューラルネットワークの精度は悪くなりがち

機械学習MDの問題点について

構築したニューラルネットワークの精度はどうやって評価するのか

機械学習ポテンシャルはDFTポテンシャルの近似
悪いニューラルネットワークは悪い力を生む

大きな系を取り扱いたい

大きな系は教師データがないが、使っているNNの精度をどうやって知ればいいのか？
(第一原理MDができないような大きな系で使いたいの、教師データがない)

機械学習MDは原子種の数が増える（4原子種以上）と不安定になりがち

複雑なインプットから作ったニューラルネットワークの精度は悪くなりがち

**ニューラルネットワークの精度の良し
悪しにに振り回されたくない！**

->自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を使おう

モンテカルロ法

MDで計算したいのは、何らかの期待値: エネルギー、比熱etc..

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \dots \int dr_1 \dots dr_N dp_1 \dots dp_N A(\{r\}, \{p\}) e^{-\beta H(\{r\}, \{p\})}$$

シミュレーションの時間平均で計算する

モンテカルロ法

MDで計算したいのは、何らかの期待値: エネルギー、比熱etc..

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \dots \int dr_1 \dots dr_N dp_1 \dots dp_N A(\{r\}, \{p\}) e^{-\beta H(\{r\}, \{p\})}$$

シミュレーションの時間平均で計算する

期待値を直接計算しても良い

$$\langle A \rangle = \int \dots \int dr_1 \dots dr_N dp_1 \dots dp_N A(\{r\}, \{p\}) P(\{r\}, \{p\})$$

重みつきモンテカルロ法(偏ったサイコロを投げる)

エネルギーを計算できればモンテカルロ法で物理量が計算できる

ハイブリッドモンテカルロ法

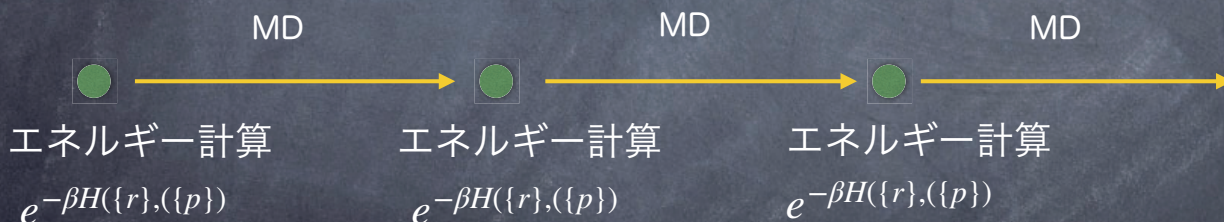
ハイブリッドモンテカルロ法 格子QCD (量子色力学) で使われている手法

S. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, and R. L. Sugar, Hybrid-molecular-dynamics algorithms for the numerical simulation of quantum chromodynamics, Phys. Rev. D 35, 2531 (1987).

かなり早いうちに物性物理分野に導入されている

B. Mehlig, D. W. Heermann, and B. M. Forrest, Hybrid Monte Carlo method for condensed-matter systems, Phys. Rev. B 45, 679 (1992).

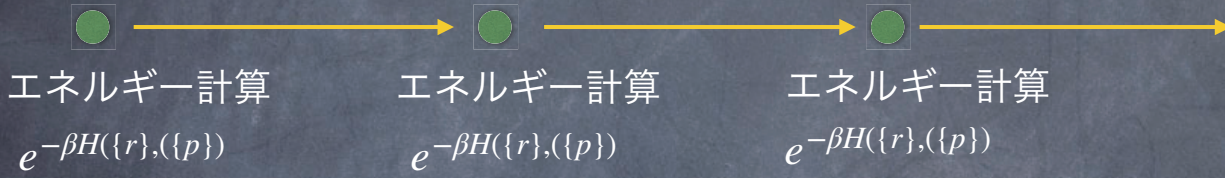
しかし、MDと比べてそれほど知名度がない



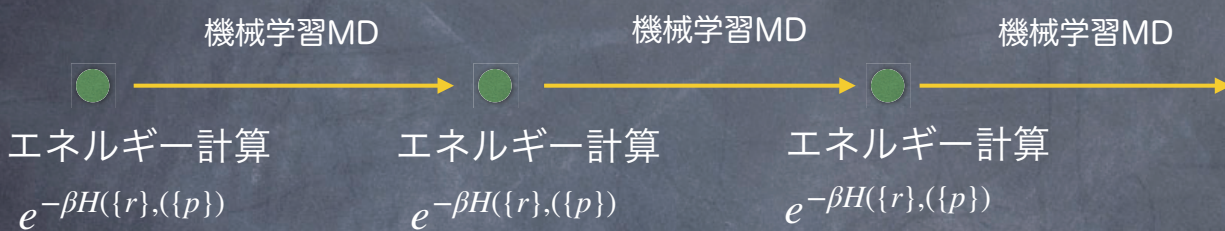
MDとMCを合わせた手法 サイコロとしてMDを使う

第一原理HMCの計算精度は第一原理MDと等しい

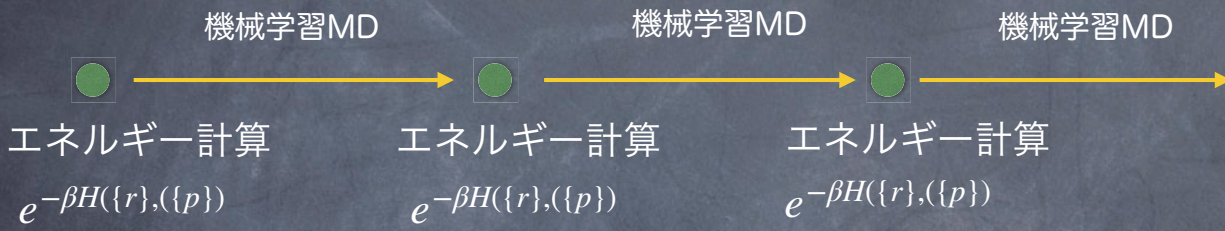
自己学習ハイブリッドモンテカルロ法



自己学習ハイブリッドモンテカルロ法



自己学習ハイブリッドモンテカルロ法



従来のHMC: MD部分は第一原理MD

自己学習HMC: MD部分を機械学習MDに置き換えておく

MLMDとMCを合わせた手法 自己学習HMCの計算精度は第一原理MDと等しい

ニューラルネットワークを使っているのに、計算精度が元の手法と同じになっている！

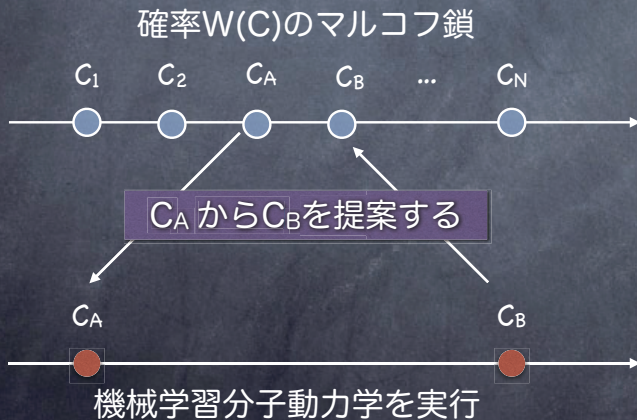
ニューラルネットワークの置き換えによる高速化と、第一原理計算の精度を両立

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

自己学習HMC: MD部分を機械学習MDに置き換えておく

MLMDとMCを合わせた手法 自己学習HMCの計算精度は第一原理MDと等しい

ニューラルネットワークを使っているのに、計算精度が元の手法と同じになっている！



モンテカルロ法のアクセプト/リジェクトには、第一原理計算で得られるエネルギーを用いる

モンテカルロ法における「次の候補」を機械学習MDを用いて求める

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法 (SLHMC)

1. 厳密: 第一原理MDと同じ精度を持つが高速に計算ができる
2. On-the-fly: 機械学習ポテンシャルはシミュレーションの最中に自動的に改善される

1. The trial configuration is generated by the machine-learning MD

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial V_{\text{ML}}(\{\mathbf{r}\}, t)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i},$$

2. The trial configuration is accepted by the following probability

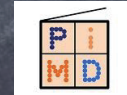
$$P_{\text{acc}}(\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{p}', \mathbf{r}'\}) = \min\left(1, e^{-\beta(H_{\text{DFT}}(\{\mathbf{p}', \mathbf{r}'\}) - H_{\text{DFT}}(\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\}))}\right)$$

$$H_{\text{DFT}} = \sum_i^N \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m_i} + V_{\text{DFT}}(\{\mathbf{r}\}).$$

DFTポテンシャルに対するメトロポリス-ヘイスティングス法

ハイブリッドモンテカルロ法の一つ
統計的に厳密な結果
 以後の計算には我々が開発したPIMDを使用

PIMD



<https://ccse.jaea.go.jp/software/PIMD/index.en.html>

ニューラルネットにはaenetを使用

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法 (SLHMC)

1. The trial configuration is generated by the machine-learning MD

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial V_{\text{ML}}(\{\mathbf{r}\}, t)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i},$$

2. The trial configuration is accepted by the following probability

$$P_{\text{acc}}(\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\} \rightarrow \{\mathbf{p}', \mathbf{r}'\}) = \min\left(1, e^{-\beta(H_{\text{DFT}}(\{\mathbf{p}', \mathbf{r}'\}) - H_{\text{DFT}}(\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\}))}\right)$$

$$H_{\text{DFT}} = \sum_i^N \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m_i} + V_{\text{DFT}}(\{\mathbf{r}\}).$$

参考: MDタイムステップ無限小の極限 ($\Delta t \rightarrow 0$) で

$$P_{\text{acc}}(\mathbf{p}, \mathbf{r} \rightarrow \{\mathbf{p}', \mathbf{r}'\}) \sim \min\left(1, \exp\left[-\beta\left(\frac{V_{\text{DFT}}(\{\mathbf{r}'\}) - V_{\text{ML}}(\{\mathbf{r}'\})}{\text{ポテンシャルの差}} - \frac{V_{\text{DFT}}(\{\mathbf{r}\}) - V_{\text{ML}}(\{\mathbf{r}\})}{\text{ポテンシャルの差}}\right)\right]\right)$$

ポテンシャルの差

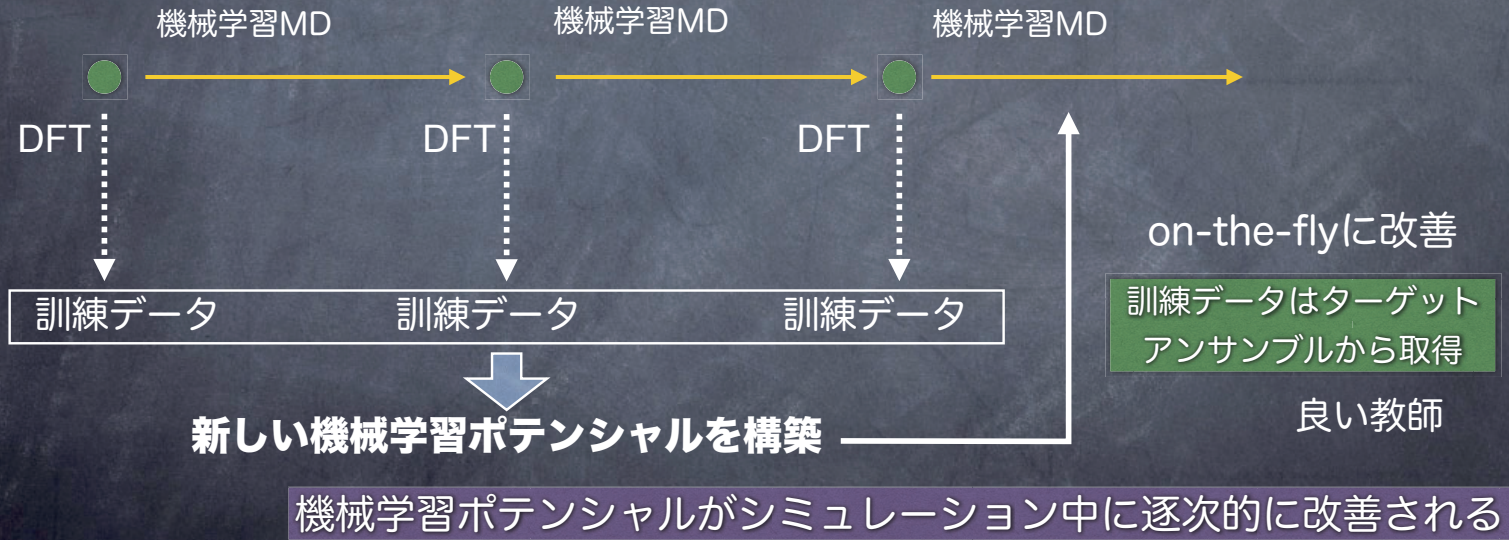
ポテンシャルの差

機械学習ポテンシャルが厳密にDFTポテンシャルに等しい時、アクセプト率は100%

SLHMC法の計算について

機械学習MD: 近似されたポテンシャルを利用 -> 厳密ではない

SLHMC: 近似されたポテンシャルを利用-> それでも厳密! Metropolis-Hastings法の一様なので



様々な分子シミュレーション手法

	Accuracy	Computational cost
Classical MD	low	very low
First-principles MD	very high	very high
Machine-learning MD	high	low
Self-learning Hybrid Monte Carlo	very high	middle

SLHMCを使うと嬉しい時:

1. DFTレベルの精度の計算をしたいがDFT-MDの計算コストが大きすぎて断念してしまっている時
2. 機械学習MDのための高精度なニューラルネットワークを構築したい時

どちらの場合でも、ニューラルネットワークは自動的に改善される

適用例: SiO₂とYNi₂B₂C

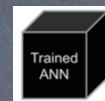
逐次的訓練と厳密な結果

α-quartz (SiO₂)

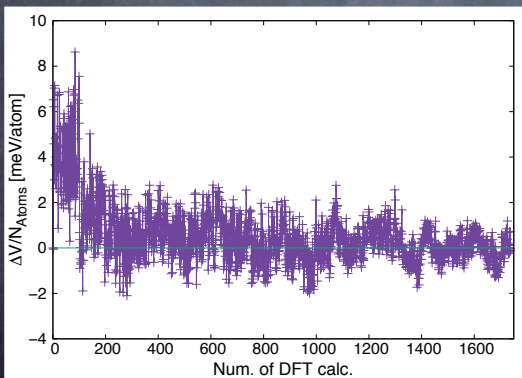
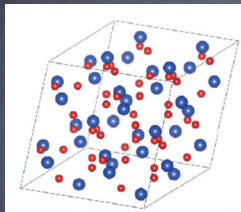
2x2x2 スーパーセル 300K NVT

DFT : VASP

ニューラルネットワーク : 隠れ層2層、各15ユニット

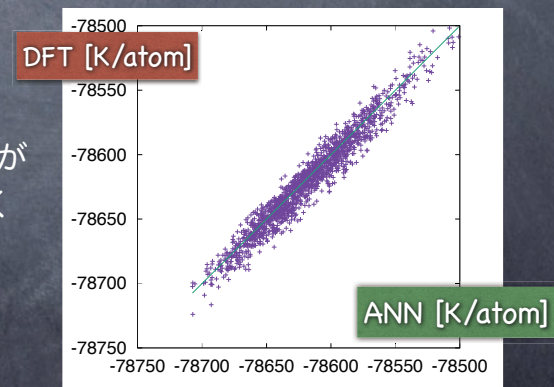


PIMD with aenetを使用



1meV/atomの精度

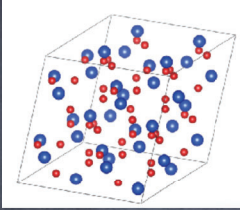
ニューラルネットワークが自動的に改善されていく



逐次的訓練と厳密な結果

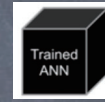
α -quartz (SiO_2)

2x2x2 スーパーセル 300K NVT

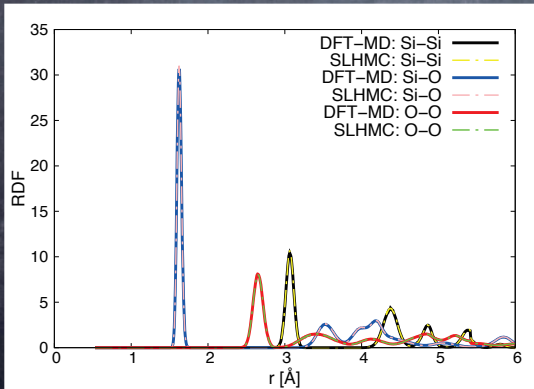


DFT : VASP

ニューラルネットワーク : 隠れ層2層、各15ユニット



PIMD with aenetを使用



動径分布関数

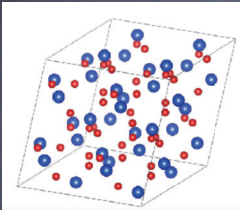
SLHMCはDFTポテンシャルに対する
Metropolis-Hastings法

1. 訓練データ: 対象とするアンサンブルそのもの
効率的なサンプリングと訓練が可能
2. ニューラルネットワークの精度に依らず、常に厳密
結果の精度が保証されている!

逐次的訓練と厳密な結果

α -quartz (SiO_2)

2x2x2 スーパーセル 300K NVT

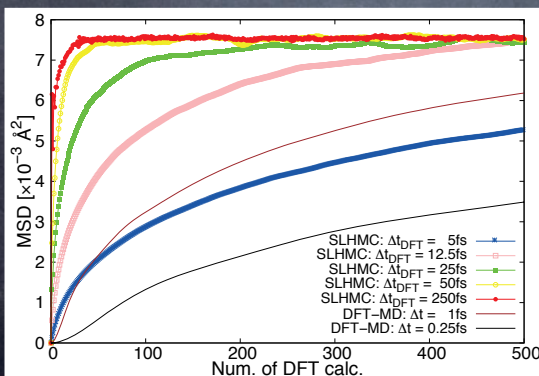


DFT : VASP

ニューラルネットワーク : 隠れ層2層、各15ユニット

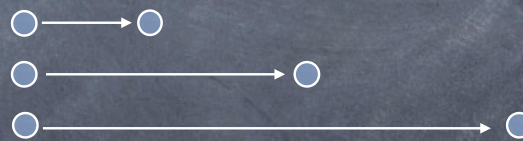


PIMD with aenetを使用



平均二乗変位

計算コストがDFT-MDと比べて劇的に減少

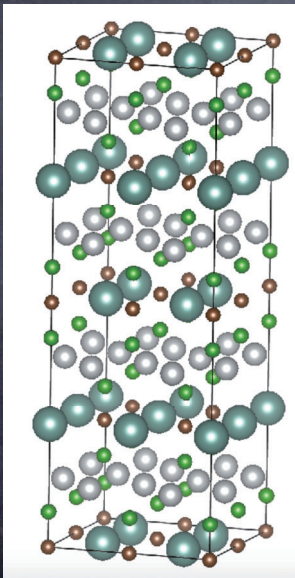


機械学習MD

DFT計算の回数が減っている

高精度な機械学習ポテンシャルによる長時間MD

SLHMCで機械学習ポテンシャルを訓練



2x2x2

YNi₂B₂C:

フォノン由来の非従来型s波超伝導体($T_c \sim 15K$)

DFT: VASP

PIMD with aenetを使用

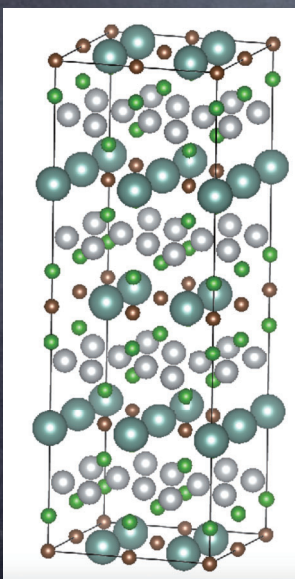
1000K HMC -> 高精度な機械学習ポテンシャルを構築

1fs 間隔で100,000 ステップで MD x 10

通常のDFT-MDではこの長さの計算は大変

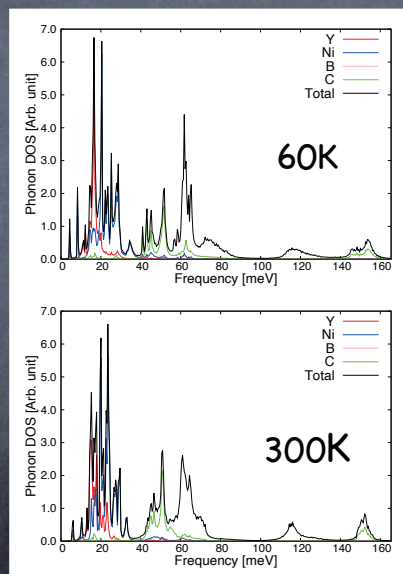
高精度な機械学習ポテンシャルによる長時間MD

SLHMCで機械学習ポテンシャルを訓練



2x2x2

フォノン状態密度



1. SLHMCで訓練
2. ML-MDを実行

1000K HMC -> 高精度な機械学習ポテンシャルを構築

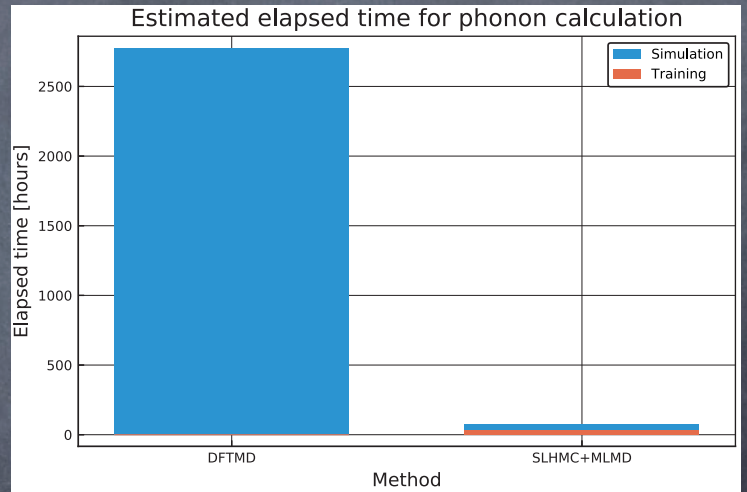
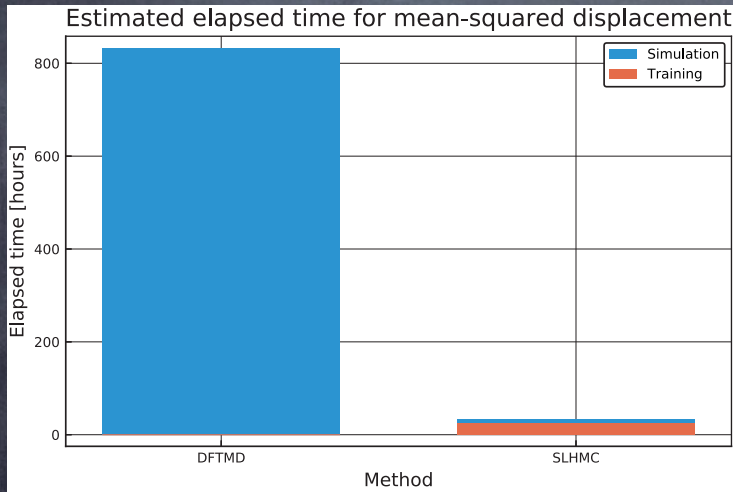
1fs 間隔で100,000 ステップで MD x 10

強い温度依存性を発見

実際の計算時間

SLHMC: SiO₂

SLHMC+MD: YNi₂B₂C



SLHMCは訓練時間込みでも速い！

240CPUコア並列：JAEAスパコンを使用

K. Kobayashi, YN, M. Itakura, and M. Shiga, J. Chem. Phys. 155, 034106 (2021)

液体シリカ

NVTアンサンブル（粒子数、体積、温度一定）以外でも使いたい

NPTアンサンブル（粒子数、圧力、温度一定）の手法を開発

TABLE I. Acceptance ratio P_{ac} and mean MCMC interval dt_m of SLHMC for liquid silica with 72 and 216 atoms. N means the number of atoms. t_{eff} is the product of P_{ac} , dt_m , and the number of MCMC steps (20 000).

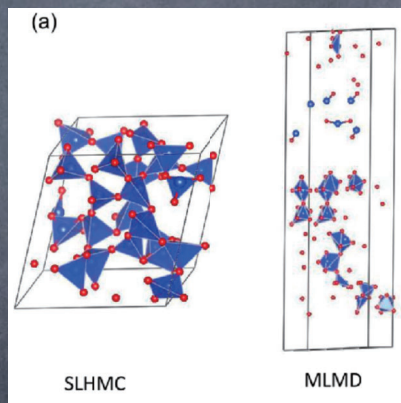
N	Temperature (K)	P_{ac} (%)	dt_m (fs)	t_{eff} (ps)
72	2500	34.1	242	1646
	3000	31.0	217	1343
	3500	33.8	235	1590
216	2373	27.2	210	1142
	3000	23.8	188	893
	3500	17.4	111	388

MD部分を可変にした

約200fsに一回だけ第一原理計算を行う

第一原理計算精度を保った1ns オーダーのシミュレーションが可能に

72原子、4000Kで、50ps後の構造



MLMD

8600構造で学習
->結晶構造が壊れる

SLHMC

悪い構造はreject
しているため安定

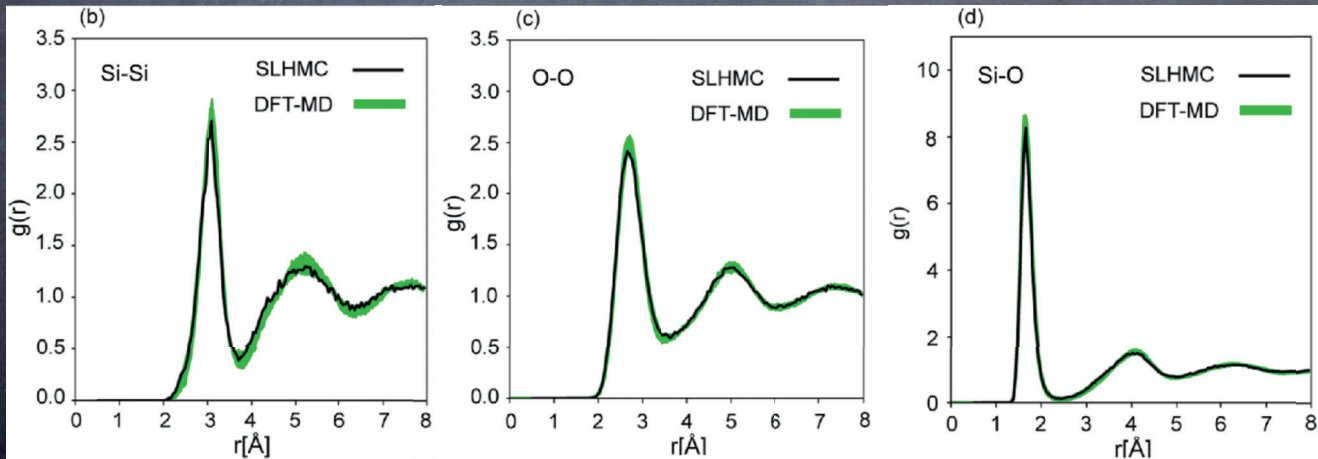
->安定なシミュレーションが可能

液体シリカ

NVTアンサンブル (粒子数、体積、温度一定) 以外でも使いたい

NPTアンサンブル (粒子数、圧力、温度一定) の手法を開発

80 psの第一原理MDの結果との比較 (4000K)



ポテンシャルが完全に一致していなくても、物理量は同じ精度

液体シリカ

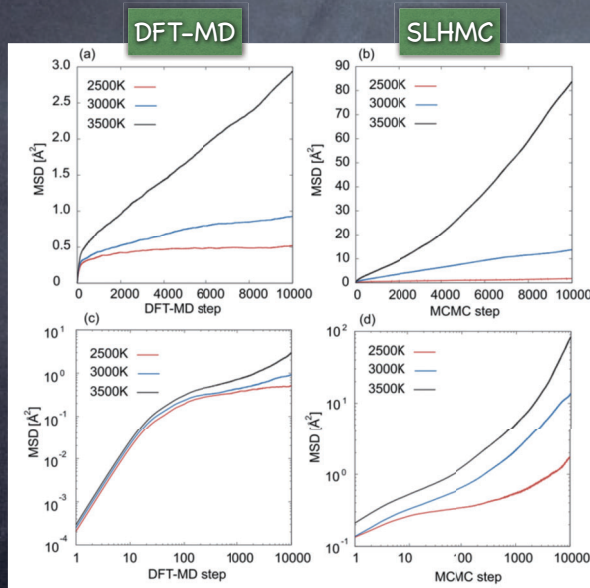
NPTアンサンブル (粒子数、圧力、温度一定) の手法を開発

平均二乗変位: 三つの時間領域がある

ballistic, plateau and diffusive regimes

実験での融点は1983K

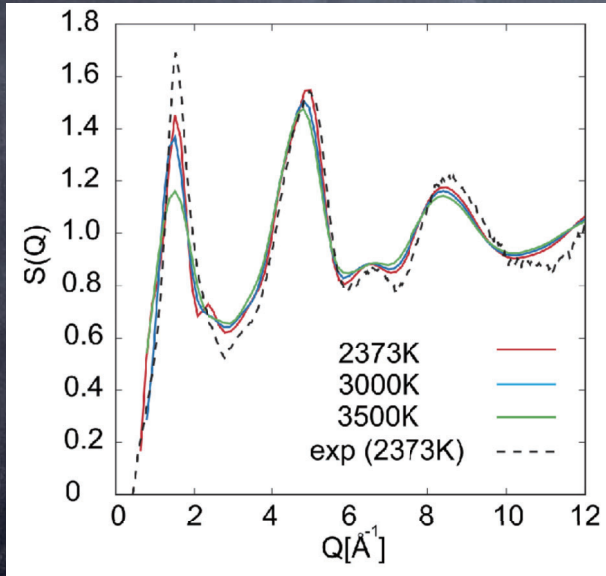
DFT-MDでは3500Kでもdiffusive regime
がよく見えない



**SLHMCだとMDを長くすることで実効的に
長時間平均が計算可能 -> diffusive
regimeが観測できる**

液体シリカ

NPTアンサンブル（粒子数、圧力、温度一定）の手法を開発



x線による構造因子

平均二乗変位：三つの時間領域がある
ballistic, plateau and diffusive regimes

実験での融点は1983K

DFT-MDでは3500Kでもdiffusive regime
がよく見えない

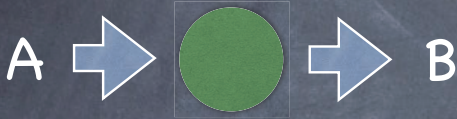
**SLHMCだとMDを長くすることで実行的に
長時間平均が計算可能 -> diffusive
regimeが観測できる**

-> 実験値をよく再現する結果が得られる

まとめ

シミュレーションの高速化に機械学習を用いる

これまで計算が大変だった部分を機械が行う



定式化済みだけど計算コスト大



計算コストの軽い機械

量子力学的効果を取り入れた計算（第一原理計算）を用いた分子動力学シミュレーション

固体、液体、気体、電池、生体、創薬、ウイルスetc.

応用先は広いが計算が重すぎる → 機械学習の出番

機械学習をシミュレーションに使う不安

模倣なので結果が正しいか不安 → 自己学習ハイブリッドモンテカルロ(SLHMC)法

YN et al., Phys. Rev. B 102, 041124(R) (2020)

SLHMCを使うと嬉しい時：

1. DFTレベルの精度の計算をしたいがDFT-MDの計算コストが大きすぎて断念してしまっている時
2. 機械学習MDのための高精度なニューラルネットワークを構築したい時

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーション・セミナー
今後の予定
2. 弊社最新情報
3. 弊社ソフトウェアのご案内
4. シミュレーションサービスについて

1. アドバンスシミュレーション・セミナー 今後の予定

第4回 10月14日/金 14:00~15:30 半導体	大阪大学 大学院 工学研究科 電気電子情報通信工学専攻 教授 森 伸也 様 「半導体デバイスシミュレーション技術の進展」 <small>次世代トランジスタ開発では、新しい材料や新しいデバイス構造の導入が検討されています。そのような多くの選択肢のなかから、最適なデバイス構造・チャネル材料を見つけて出すためには、経験的なパラメータを必要としないデバイスシミュレーション環境の構築が望まれます。本セミナーでは、半導体デバイスのモデリング・シミュレーションに関して、従来手法の原理や特徴などをはじめに概観します。そのうち、次世代トランジスタ開発環境の構築に向けて研究が進められている手法などについて紹介します。</small>
第5回 10月28日/金 14:00~15:30 流体・HPC	国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授 高木 亮治 様 「航空機実機実飛行条件における空力特性評価技術の実現に向けて」 <small>数値流体力学（CFD）はものづくりにおける重要な設計・開発ツールとして活用されていますが、複雑な機器形状に対する計算格子作成は依然として困難な状況であります。また実機形状をより忠実に再現する、第一原理的なモデルを用いた高精度解析を実施するためには計算格子も大規模となり、その作成はますます困難となっています。本講演では、大規模計算格子の自動生成を実現すべく研究開発を進めている、階層型等間隔直交格子法と独自の埋め込み境界法を組み合わせた手法について紹介すると同時に、基礎的な形状での検証結果、更にはスーパーコンピュータ「富岳」を利用した解析結果について紹介します。</small>
第6回 11月11日/金 14:00~16:30 特別セミナー[1]	「産業応用を見据えたJAMSTECの研究開発」 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門 数理科学・先端技術研究開発センター 研究員 廣部 紗也子 様 グループリーダー代理 西浦 泰介 様

第7回
11月25日/金
14:00~15:30

ナノ・AI

東京大学 大学院 工学系研究科 マテリアル工学専攻

教授 渡邊 聡 様

「機械学習原子間ポテンシャルを用いた材料研究
: 事例と機能高度化の試み」

第一原理計算に匹敵する予測精度と比較的軽い計算負荷の両立が見込める機械学習原子間ポテンシャルの可能性に我々は以前から注目し、機械学習ポテンシャルの一種であるニューラルネットワークポテンシャルを用いて固体中のイオン伝導や熱伝導特性等の解析に取り組んできました。また、電場中でのイオン挙動や欠陥の荷電状態による振動挙動の違い等、標準的な方法では扱えない問題に適用できるように機械学習ポテンシャルの機能高度化する研究にも取り組んできました。本講演ではこれらの事例について紹介すると共に、他グループの最近の研究にも言及しつつ今後の展望を述べます。

第8回
12月9日/金
14:00~15:30

流体・データ同化

東北大学 流体科学研究所 航空機計算科学センター

教授 大林 茂 様

「流動現象のデジタルツインを実現するデータ同化流体科学」

内閣府の科学技術基本計画において、日本が目指すべき未来社会の姿としてサイバー空間とフィジカル空間を高度に融合させた自律的社会環境がSociety 5.0として提唱されています。その中で、ものづくりの効率化や生産性向上に向けたデジタルツインの開発利用が進んでいます。デジタルツインの実現には、シミュレーションと現実を適切に融合させる技術が重要な鍵となります。その技術として、数値シミュレーションと計測データを使ってベイズ推定を実現するデータ同化が注目されています。この講演では、数値流体力学の発展形としてのデータ同化流体科学の概要といくつかの適用例を紹介します。

第9回
12月23日/金
13:00~17:00
特別セミナー[2]

「JAMSTECの最先端地球科学」

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門

アプリケーションラボ 気候変動予測情報創生グループ

主任研究員 土井 威志 様

地球情報科学技術センター データサイエンス研究グループ

グループリーダー 松岡 大祐 様

数理学・先端技術研究開発センター 応用数理学グループ

主任研究員 宮腰 剛広 様

第10回 2023年
1月20日/金
14:00~15:30

早稲田大学 総合研究機構 グローバル科学知融合研究所

研究院教授 高橋 桂子 様

アドバンスソフト
からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー
今後の予定
2. 弊社最新情報
3. 弊社ソフトウェアのご案内
4. シミュレーションサービスについて

2.弊社最新情報

弊社パッケージソフトご紹介セミナーのご案内

◆2022年10月7日(金)

プラントシミュレーションによるリスク評価/
製品紹介と技術セミナー

◆2022年10月20日(木)

音響解析ソフトウェア
「Advance/FrontNoise Ver6.0」ご紹介セミナー

5

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー
今後の予定
2. 弊社最新情報
3. **弊社ソフトウェアのご案内**
4. ご提供サービス



Advance/NanoLaboは、第一原理計算と分子力学のシミュレーションを行うためのモデリング、計算実行、計算結果の可視化を統合したGUIシステム。

◆計算エンジン

- Advance/PHASE (当社製品)
- Quantum ESPRESSO (オープンソース、第一原理計算)
<<https://www.quantum-espresso.org>>
- LAMMPS (オープンソース、分子力学)
<<https://lammps.sandia.gov>>

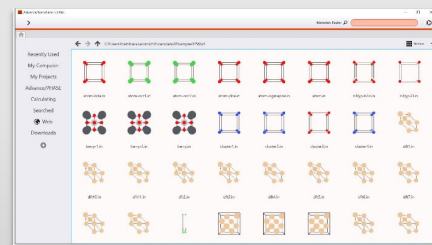
◆モデリング機能

Materials Projectなどのデータベースから化学式入力により材料データベース検索することができます。取得した結晶構造はアイコン表示されます。結晶、表面、界面、分子に対するモデリング機能が備わっており簡単にスラブモデルや不整合界面、高分子モデルを作成できます。

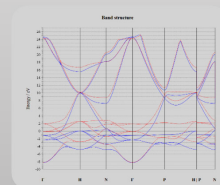
◆可視化機能

バンド構造図のプロット作成、振動モード、分子力学アニメーションなど種々のポスト処理が可能です。NEB反応経路の残存表示などの特徴的な機能を実装しております。

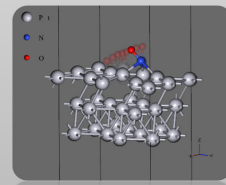
結晶構造のアイコン表示



バンド構造図のプロット



NEB反応経路の残像表示

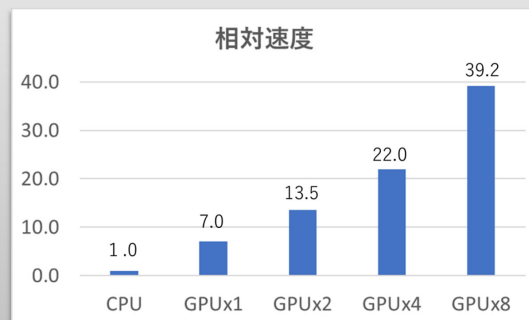
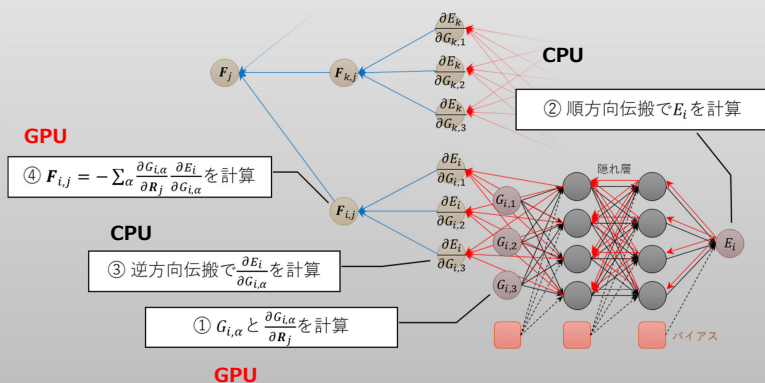


2022年9月、Advance/NeuralMD Proリリース

Neural Network力場がGPUに対応 約40倍の高速化を達成



ニューラルネットワーク分子力学システムAdvance/NeuralMDをGPU化した、**Advance/NeuralMD Pro**をリリースいたします。Advance/NeuralMD Proでは、ニューラルネットワークの学習および分子力学計算がGPU化されています。MPI並列との併用も可能で、複数のGPUを搭載したマシン and/or GPUを搭載した複数のマシンノードにも対応しています。GPU 1 デバイス当たり2~4つのMPIプロセスを起動することで、GPUとCPU双方の稼働率を常に高い状態に保持できるように設計されています。計算コストの高い対称関数および力の計算をGPU化しています(左下図)。詳細は<http://case.advancesoft.jp/NeuralMD/GPU-NNP/>をご覧ください。複数のGPUを搭載したクラウド環境でのベンチマークでは、CPUの約40倍の高速化を達成しています(右下図)。

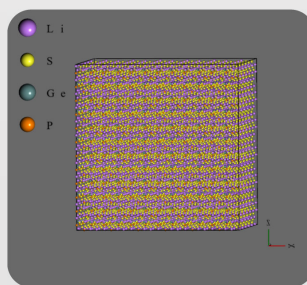


Intel Xeon Platinum 72コア(CPU) と NVIDIA V100 1~8デバイス(GPU)での分子力学計算の速度比較。CPUでの計算速度を1とした相対速度をプロット。計算対象はLGPSスーパーセル(2万原子系)。計算リソースにはMat3ra(<https://mat3ra.com>)を使用。詳細は、<http://case.advancesoft.jp/NeuralMD/GPU-Mat3ra/>。

MPI並列 & マルチGPUで数万原子系での計算が可能に

Advance/NeuralMD Proでは、ニューラルネットワークの学習過程 および LAMMPSによる分子動力学計算 の両方においてMPI並列が利用可能です。且つ、MPIで分割された各プロセスは別個のGPUデバイスへとアクセスすることができます。これにより、複数のGPUを搭載した計算機環境での運用が可能となり、Neural Network力場で数万原子系の本格的な分子動力学シミュレーションが可能となります。

※Pythonで実装されたGraph Neural Network力場などの他社サービスではモデル並列の実現が難しく単一GPUでの計算となり、計算可能な原子数がGPUメモリに依存するため、2000~3000原子系が限界となります。一方、当社製品ではクラウドなどを活用して多数のGPUを確保できれば、原子数は無制限です。



計算条件	設定値
対称関数の種類	Chebyshev多項式
対称関数の動径成分	50個
対称関数の角度成分	30個
カットオフ半径	6.0 Å
Δ-NNP法	適用有り
NNの構造	2層 x 40ノード (twisted tanh)
アンサンブル	NVT (T=500K)
時間刻み	0.5fs
MDステップ数	100

21,600原子系のリチウムイオン伝導体(Li₁₀GeP₆S₁₂)では、NVIDIA V100 x 8を使用して24時間当たり1.2nsの分子動力学シミュレーションを実行できています。

無償アップグレードキャンペーン

Advance/NeuralMD Proリリース時点 ~ 2023年4月末の間、無償アップグレードキャンペーンを実施しております。キャンペーン期間中は、Advance/NeuralMDのライセンスを既にお持ちのお客様は無償でAdvance/NeuralMD Proをお使い頂けます。また、Advance/NeuralMDを新規に購入されるお客様についても、キャンペーン期間中は追加料金無くAdvance/NeuralMD Proがご利用になれます。

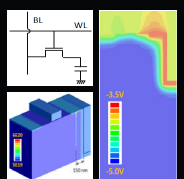
製品	年間(企業・国研)	年間(大学)	買取(企業・国研)	買取(大学)
Advance/NeuralMD	50万円	25万円	150万円	75万円
Advance/NeuralMD Pro	90万円 50万円	45万円 25万円	270万円 150万円	135万円 75万円

アドバンスソフトが開発・販売するソフトウェア

お客様の課題

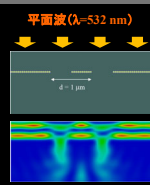
半導体デバイス解析

Advance/TCAD



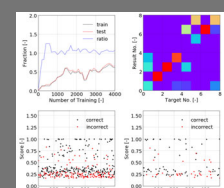
光/電磁波解析

Advance/ParallelWave



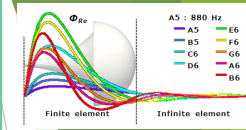
機械学習

Advance/iMacle

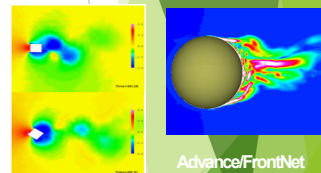


音響解析

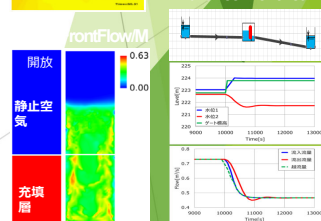
Advance/FrontNoise



Advance/FOCUS-i



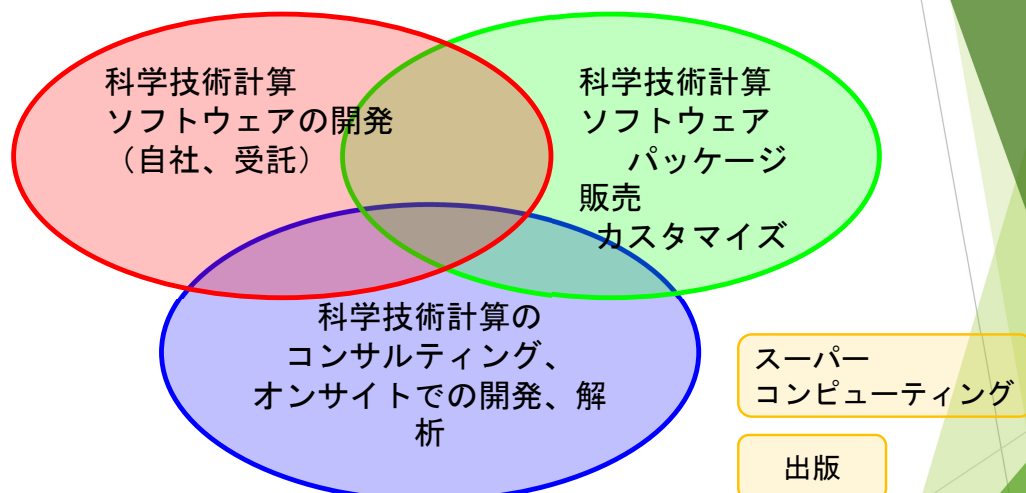
Advance/FrontNet



アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー
今後の予定
2. 弊社最新情報
3. 弊社ソフトウェアのご案内
4. シミュレーションサービスについて

アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

パッケージソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをリニューアルしました。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介していきます。

産業分野別	解析分野別
自動車・運輸	流体
材料・化学	爆発・燃焼
産業機械	構造
航空宇宙	振動音響
エレクトロニクス	ナノ・バイオ
建設土木	プリポスト
原子力	半導体デバイス
エネルギー	光・電磁波
環境・防災	

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>



<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



人材募集について

- アドバンスソフト株式会社では、シミュレーションに興味のある技術者の方を、広く求めています。
 - 修士 / 博士やポスドクの方
 - 既卒 / 新卒(2022秋・2023春・2023秋・2024春) / 中途採用
- ご興味のある方は、ぜひ弊社までお問合せください。
 - <http://www.advancesoft.jp/aboutus/recruit/>
 - TEL: 03-6826-3970
 - E-mail: recruit@advancesoft.jp

閉会

本日はお忙しい中、弊社オンラインセミナーへご参加いただき、誠にありがとうございました。





警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。