



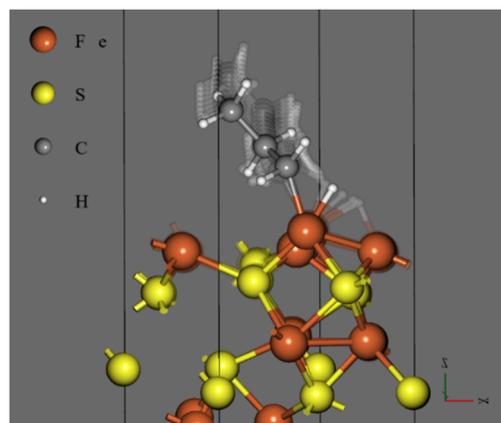
オンラインセミナー

NanoLabo/NeuralMD 新機能 および今後の開発計画のご紹介

2023年10月18日(水)開催

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
2.	Advance/NanoLabo Ver.2.9 のご紹介	5
3.	Advance/ NeuralMD Ver.1.9 のご紹介	21
4.	今後の開発のご紹介	39
5.	汎用 GNN カ場のファインチューニング	43
6.	価格および関連サービスのご紹介	59

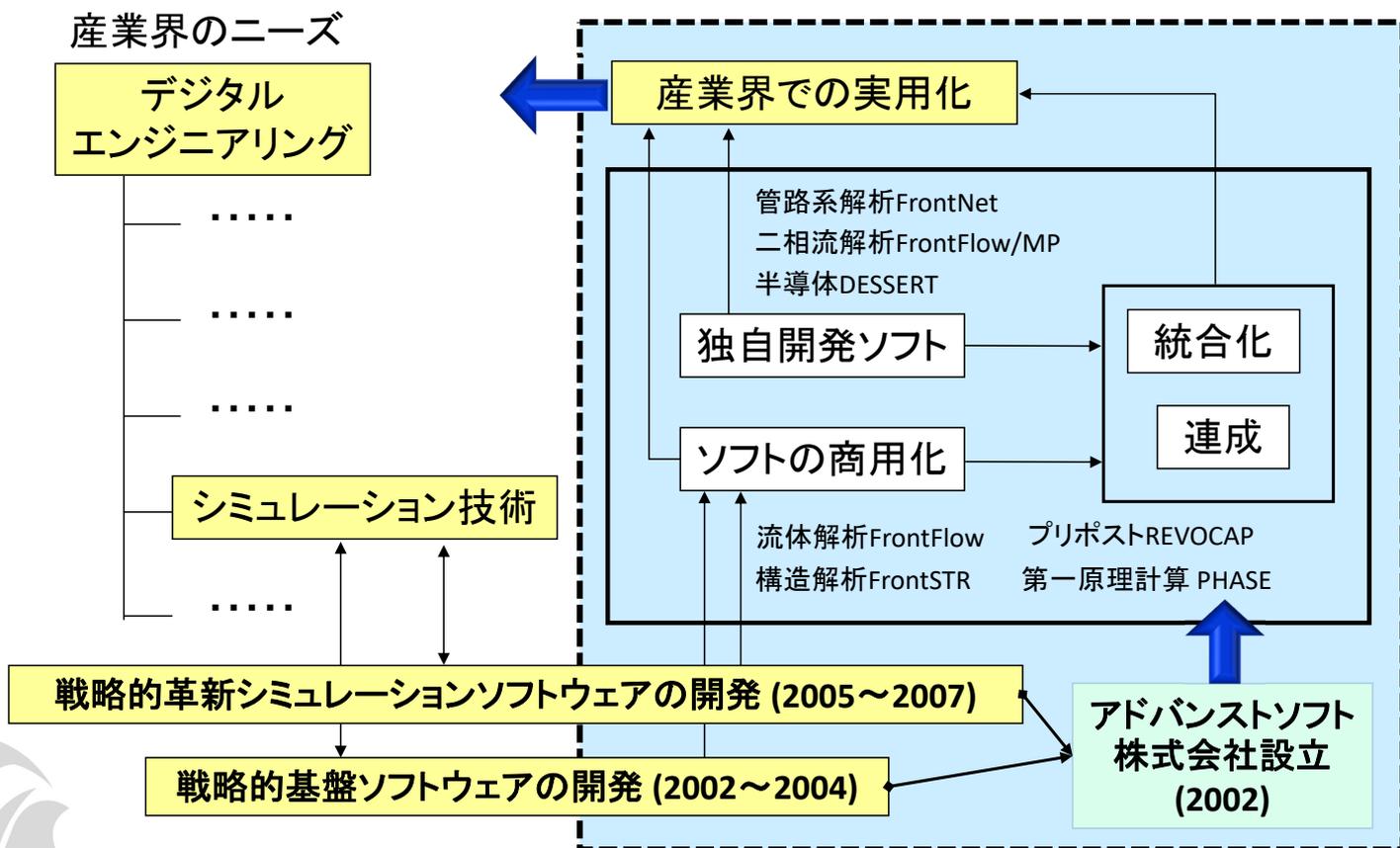


アドバンスソフト株式会社のご紹介

NanoLabo/NeuralMD 新機能および今後の開発計画

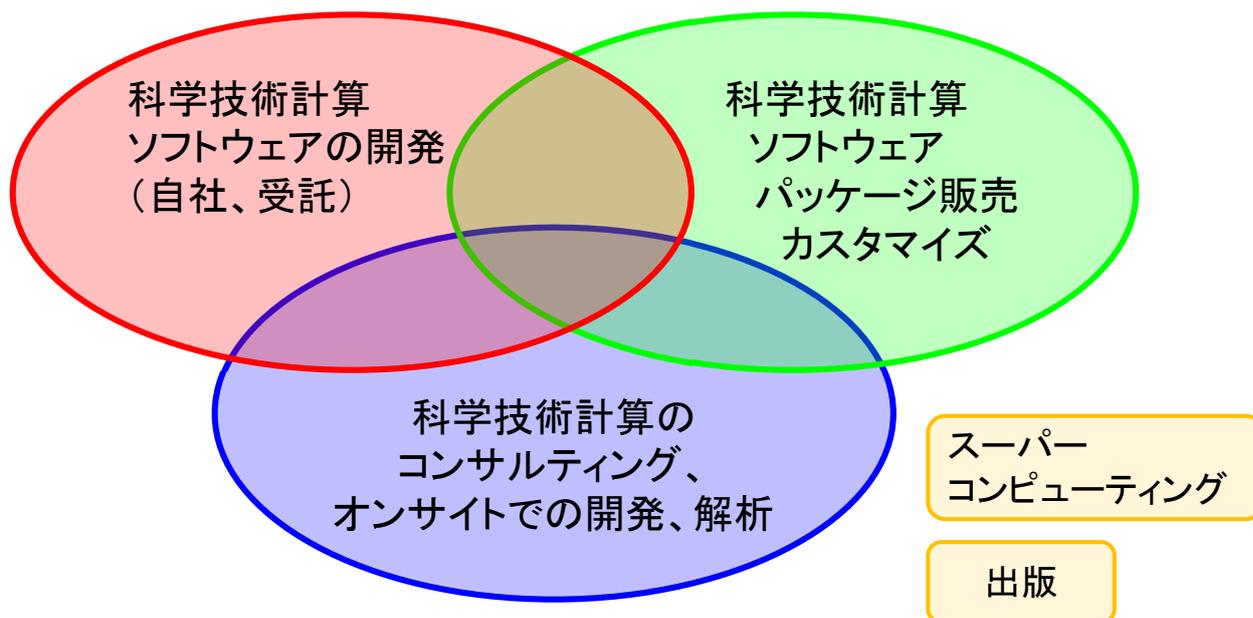
2023年10月18日（水）開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



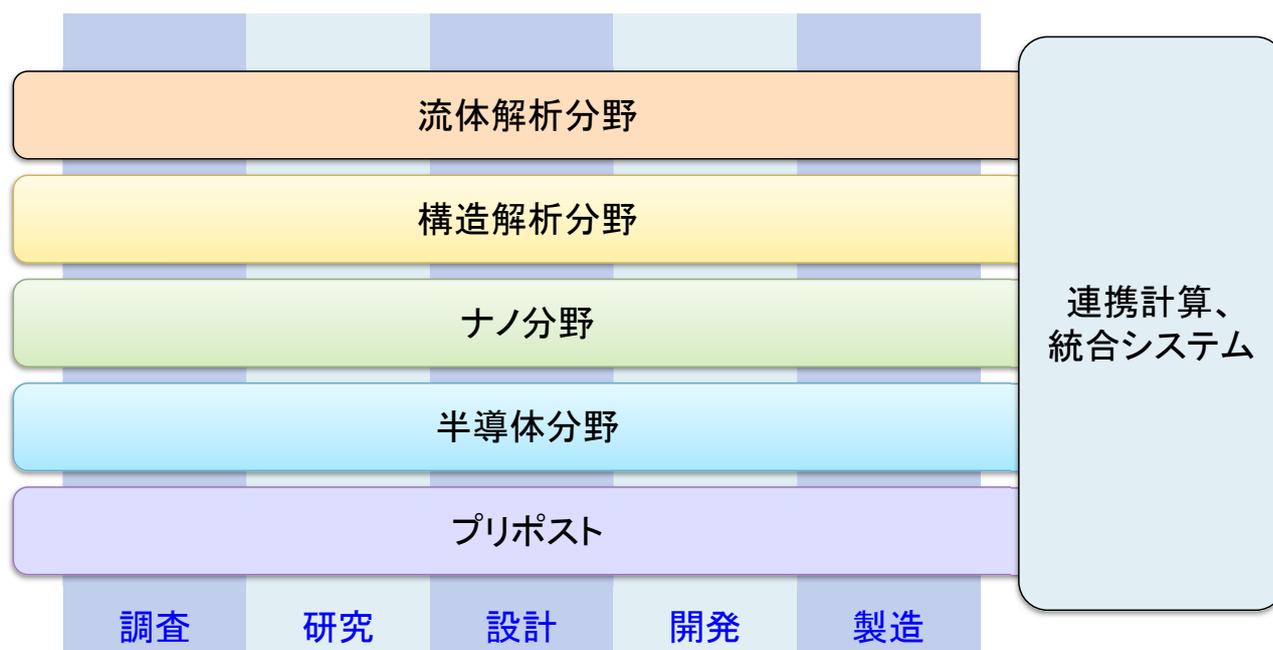
事業内容

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。

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 に対応した総合 GUI です。</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>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。特に遷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>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>気液二相流解析ソフトウェア 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>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>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>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込んだ比較的軽いツールです。</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>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>	

ソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをご覧ください。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

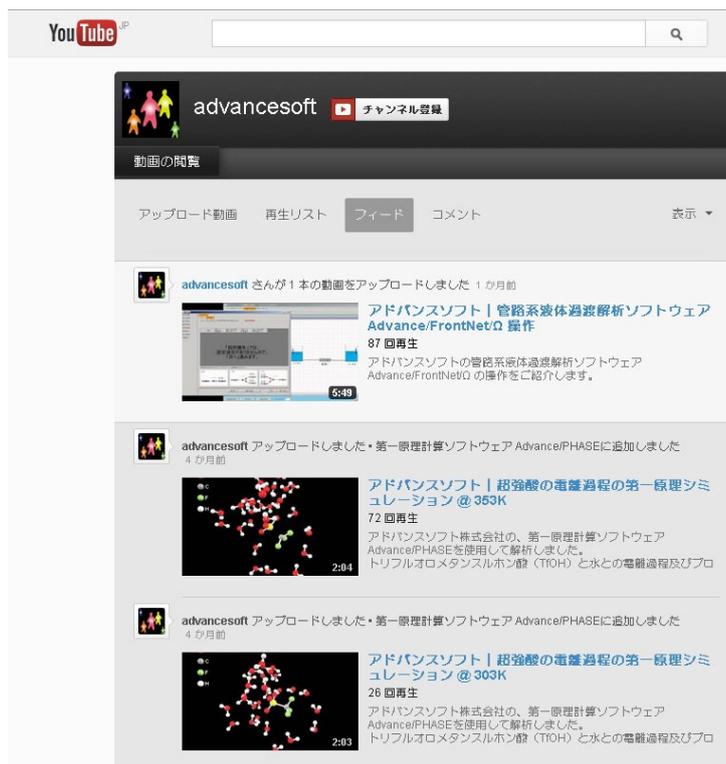
- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介します。

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>



Advance/NanoLabo



Ver.2.9 のご紹介

アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD新機能および今後の開発計画のご紹介
[14:05~14:55]

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

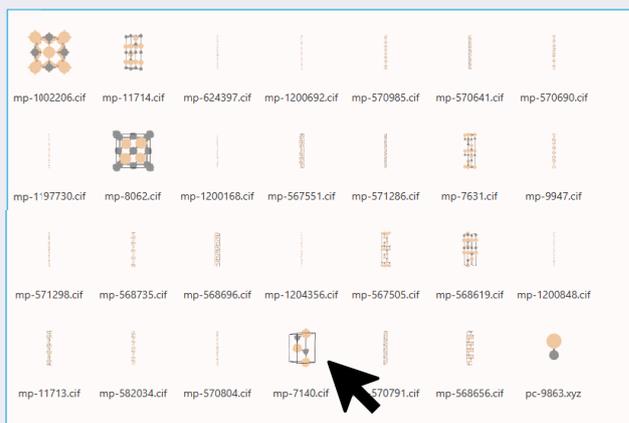
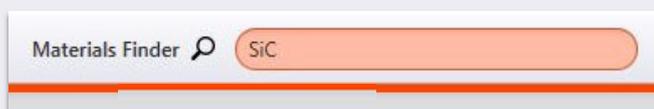
Advance/NanoLabo

- ✓ 第一原理計算と分子動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。
- ✓ 2023年3月、Ver.2.7をリリース。
2023年4月、Ver.2.8をリリース。Jupyter Interfaceを搭載。
2023年8月、Ver.2.9をリリース。（新機能の詳細は後程）
- ✓ ユーザーの行うべき作業を極限まで最小化。
⇒ **化学式を入力するだけでバンド計算が出来ます。**

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

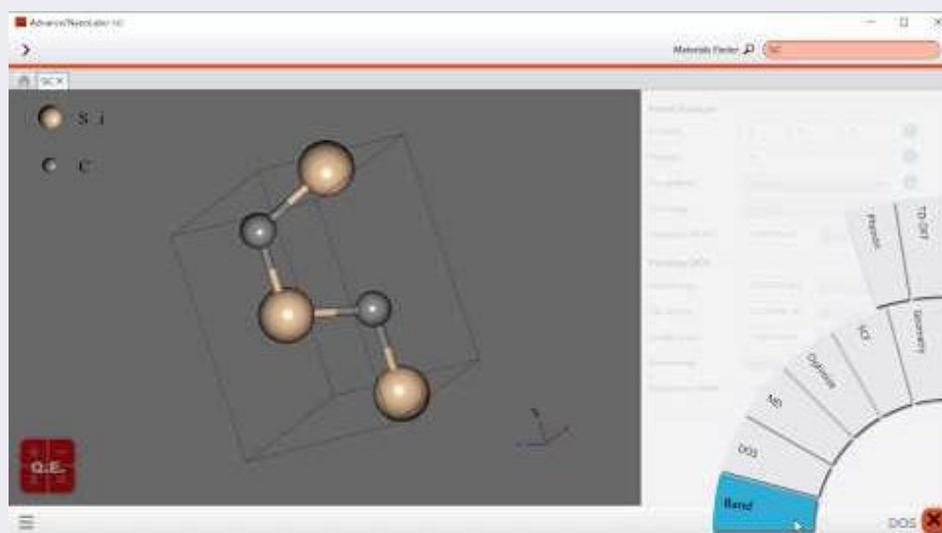
化学式 ⇒ バンド構造



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

化学式 ⇒ バンド構造



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

主な機能

1. モデリング
2. 計算実行
3. 計算結果の可視化

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

1. モデリング

- 材料データベース検索
 - Materials Project (無機結晶) <<https://materialsproject.org>>
 - PubChem (分子系) <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>>
- モデルの加工
 - セル平行移動
 - スーパーセル
 - 不純物置換モデル
 - 格子欠陥モデル
 - 表面/界面モデル
 - 有機分子の描画
 - 表面への小分子吸着モデル
 - 溶媒分子充填
 - Primitive Cell ⇔ Standard Cell
 - 空間群の判定
 - 高分子モデリング など

6

2. 計算実行

- 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、分子動力学) <<https://lammps.sandia.gov>>
- 計算機能
SCF計算、構造最適化、バンド構造、状態密度、TD-DFT、Phonon、NEB法、仕事関数、XAFS、NMR、第一原理MD、Car-Parrinello MD、古典MD、拡散係数、熱伝導率、など
- 計算制御
 - ジョブスケジューラ (PBS、SLURM、PJMに対応)
 - Pythonスクリプト (APIを公開: <https://nanolabo-doc.readthedocs.io/ja/latest/python.html>)
- リソース
 - ローカルマシンでのジョブ実行 (Windows10, CentOS7, AlmaLinux8, macOS)
 - 計算サーバーへのジョブ投入 (SSH接続)
 - クラウドシステム (Exabyte.io社など)

7

3. 計算結果の可視化

- ログファイル表示
- 収束状況チェック
- 構造の動画表示 (構造最適化、分子動力学、Metropolis法)
- バンド構造
- 状態密度
- 各種スペクトル表示 など

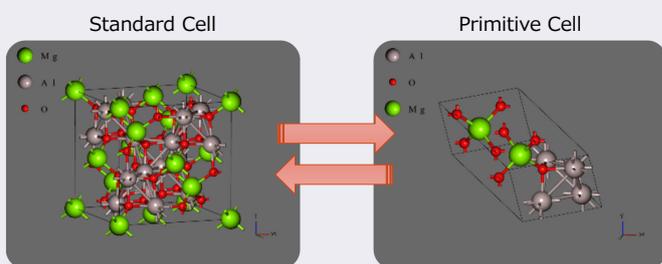
モデリング機能の詳細

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

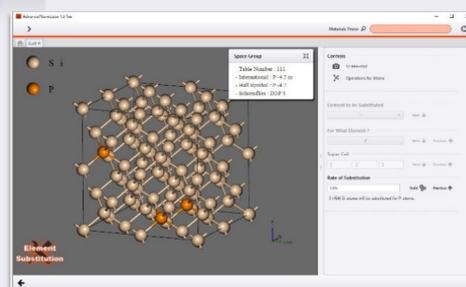
9

1. 結晶系

セル変換



不純物置換

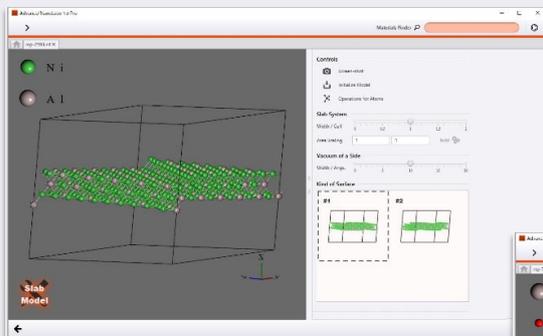


Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

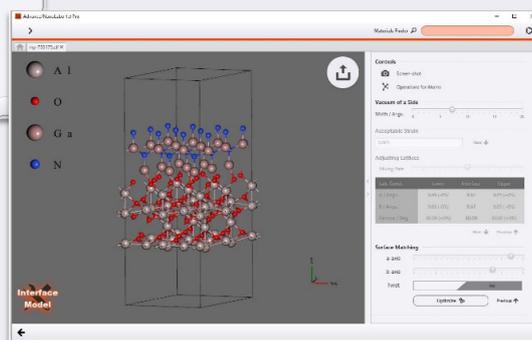
10

2. 表面・界面系

表面モデル



界面モデル

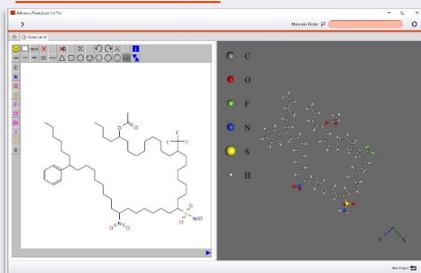


Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

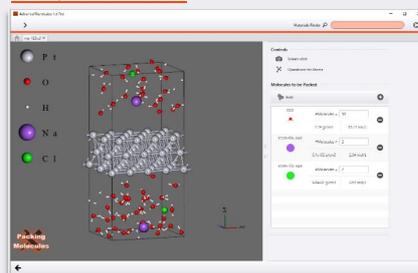
11

3. 分子系

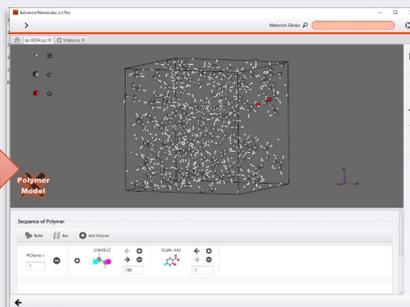
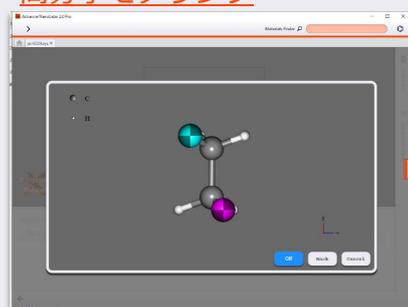
有機分子の描画



溶媒分子充填



高分子モデリング



12

計算機能の詳細

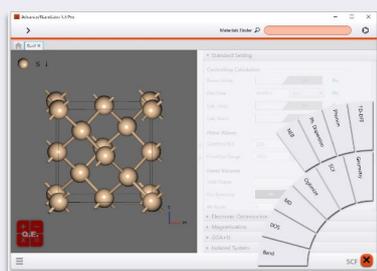
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

13

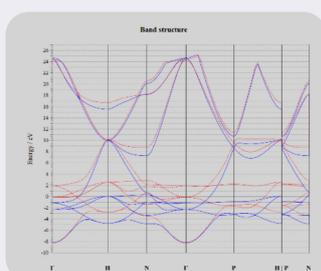
1. Quantum ESPRESSO

- ✓ 結晶構造から直ちに、適切な入力ファイルを自動生成。
- ✓ ユーザー自身が面倒な計算条件の設定を行う事なく、各種計算を実行可能。
- ✓ 計算の進捗状況および結果を可視化。(種々のポスト処理が利用可能)

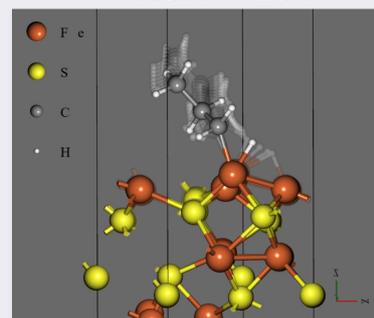
Quantum ESPRESSO入力画面



バンド構造図のプロット



NEB反応経路の残像表示



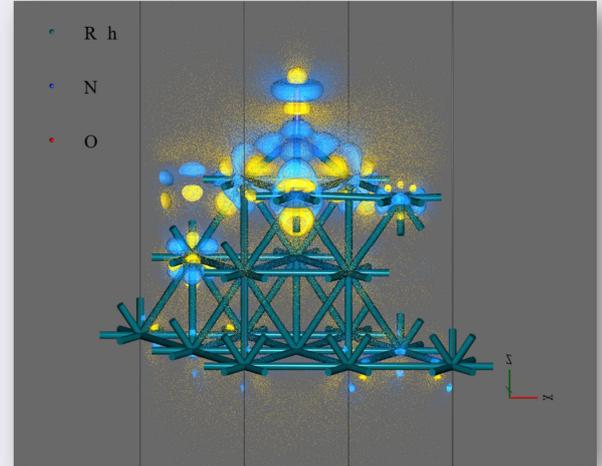
※静岡大学 波部先生よりご提供頂いたデータ。
FeS表面でのプロパン分子の脱水素反応。

14

1. Quantum ESPRESSO

利用可能な計算手法一覧

SCF計算	構造最適化
Hybrid汎関数	vdW補正 (vdW-DF、rVV10、DFT-D)
バンド構造	状態密度 (PDOS電卓)
電荷密度などの可視化	第一原理MD
Car-Parrinello MD	TD-DFT
XAFS/EELS	Phonon (バンド構造、状態密度、IR)
化学反応パス (NEB法)	仕事関数 (ESM法)
GIPAW法 (NMR、EPR、超微細)	など



差分電荷密度の可視化 (Rh111面へのNO分子吸着)

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

15

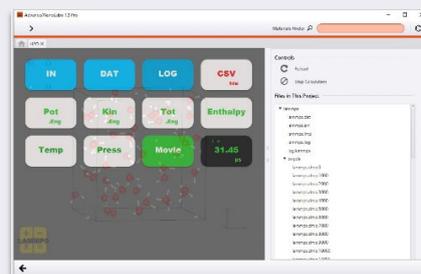
2. LAMMPS

- ✓ Lennard-Jones、Charge、OPLS-AA、ReaxFF、EAM、MEAM、Tersoff、**Neural Network力場**に対応。
- ✓ 有機分子に対して、OPLS-AAの力場パラメータを自動的にアサイン。
- ✓ 多段階での計算スキームが設定可能。(e.g. NVTアンサンブルで100ps運動させたのち、NPTアンサンブルに切り替え)
- ✓ 計算実行の最中であっても、動力学の様子をアニメーション表示可能。
- ✓ 拡散係数、熱伝導率、粘性係数、動径分布関数の解析も可能。

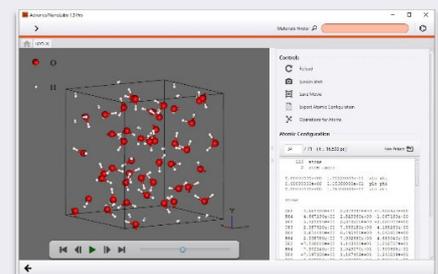
多段階計算スキーム設定画面



計算項目の一覧表示



アニメーション表示



16

2. LAMMPS

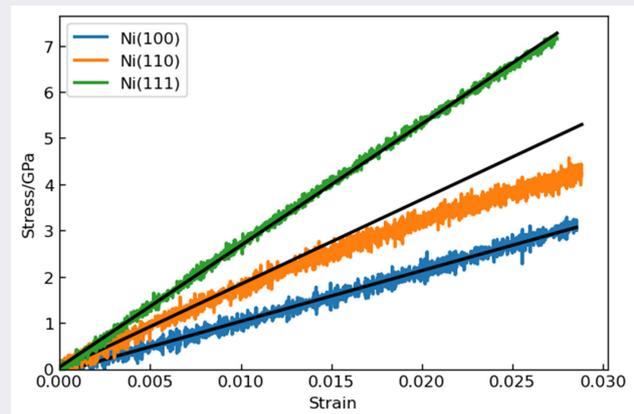
- ✓ 外部電場、指定原子に対する外力および並進移動、セル変形。
- ✓ 原子グループの視覚的な定義。
- ✓ ユーザー定義コマンドの追加。任意の変数のグラフ化。

【Ni結晶のセル変形】

Stress-Strain曲線の傾きからヤング率を評価

面方位	計算値	実験値 [†]
(100)	110.0 GPa	121.3 GPa
(110)	184.0 GPa	203.8 GPa
(111)	263.5 GPa	262.2 GPa

[†] ニッケル単結晶のヤング率の結晶異方性と温度変化. 日本金属学会誌, 1968, 32.6: 525-528.



17

Ver.2.7 ~ 2.9 の新機能

Ver.2.7 ~ Ver.2.9 の新機能

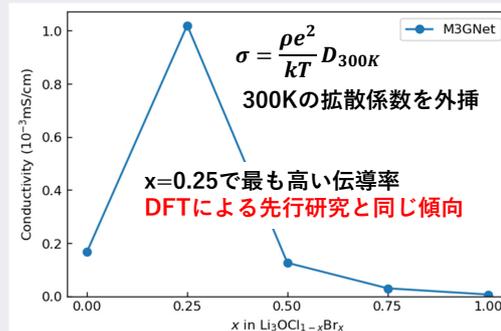
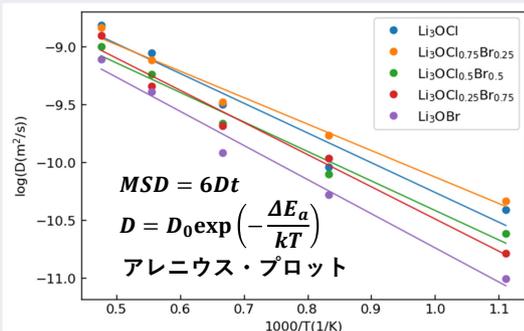
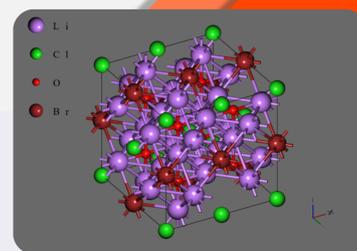
バージョン	リリース時期	実装された新機能
2.7	2023年3月	<ul style="list-style-type: none"> 無機固体用のグラフィニューラルネットワーク力場 M3GNet に対応 Open Catalyst 2022 (GemNet-dTのみ)に対応 リモートジョブ投入後にローカルのプロジェクトフォルダを移動しても結果を取得できるように対応 .nanolabo/以外の場所にあるプロジェクトからのジョブ投入ができるように対応 PJMジョブ管理システムに対応 (富岳などでのpjsubコマンド)
2.8	2023年4月	<ul style="list-style-type: none"> Jupyter Interface for NanoLabo を搭載 Java実行環境をJRE8からJRE17に変更
2.9	2023年8月	<ul style="list-style-type: none"> 汎用タイトバインディングソフトウェア ThreeBodyTB に対応 グランドプロジェクトの機能強化 <ul style="list-style-type: none"> SCF計算条件を各プロジェクト間で共有する機能 教師データを生成する方法にSLHMCを追加 Quantum ESPRESSOでの教師データ生成の継続計算に対応 リモートサーバー実行した計算結果のファイルダウンロードを抑制できる機能 ファイルダウンロードの高速化 など PDFファイルの可視化機能 など

19

[v2.7] M3GNet / 解析事例①

リチウムイオン伝導体 $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$ の室温における **イオン伝導率**

- Li₃OCl(mp-985585)の2×2×2スーパーセルをもとに、Clの一部をBrに置換
- 最後に各モデルからLi原子を一つ取り除くことでLi空孔を導入
- 0 barの条件下で異方的な変形を許して1fsの時間幅で構造最適化
- NVTアンサンブルで20 K/psで一定の温度まで昇温したのち、5000ステップ(10ps)の計算を実行
- さらに各温度のモデルについて150000ステップ(300ps)のMSD(Mean Square Displacement)の計算を実行



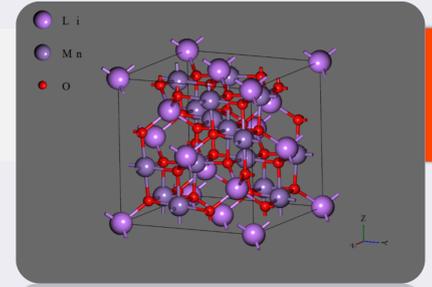
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

20

[v2.7] M3GNet / 解析事例②

Li二次電池正極材料LiZn_xMn_{2-x}O₄の構造相転移

- LiMn₂O₄の立方晶(mp-22584)と斜方晶(mp-1199729)のスーパーセルを作成
- 各素性比になるようにランダムにMnをZnに置換
- 立方晶を等方的に、斜方晶を異方的にセル変形させながら構造最適化



$$\Delta E (= E^{aniso} - E^{iso})$$

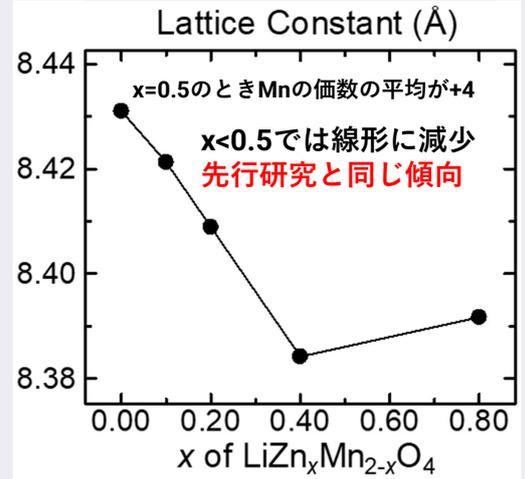
x	ΔE (meV/atom)
0	-11.06
0.1	-5.777
0.2	-3.251
0.4	0.3868
0.8	0.2132

斜方晶の格子ベクトルの比

x	a	b	c
0	1.0000	1.0090	1.0094
0.1	1.0000	1.0061	1.0078
0.2	1.0016	1.0000	1.0074
0.4	1.0000	1.0013	1.0018
0.8	1.0018	1.0001	1.0000

◆ 置換により立方晶が安定化

◆ 置換により斜方晶の異方性が低下



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

[v2.7] M3GNet / 解析事例③

界面エネルギーの計算

- バルク構造に最適化されているM3GNetを界面モデルに適用できるか検証
- 上下の真空層を取り除いた界面構造について異方的にセル変形させながら構造最適化
- M3GNetとDFTでエネルギーを計算し、バルクのエネルギーを原子数分差し引いて界面エネルギーを計算

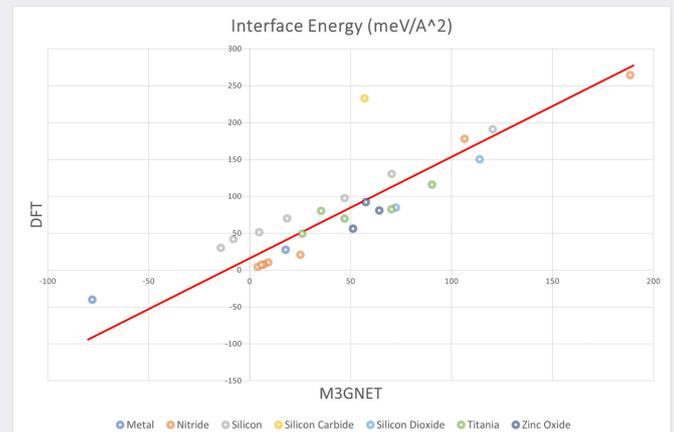
金属/金属, 金属/半導体, 金属/絶縁体, 半導体/半導体, 半導体/絶縁体, 絶縁体/絶縁体の様々な界面を作成

それぞれのグループごとに線形回帰を行った結果

Group	a	b	s
All	1.38	15.85	25.47
Silicon	1.18	47.30	2.93
Nitride	1.55	-4.97	12.47
Oxide	1.02	22.40	12.40

$$E_{DFT} = a E_{M3GNet} + b \text{ (meV/Å}^2\text{)}$$

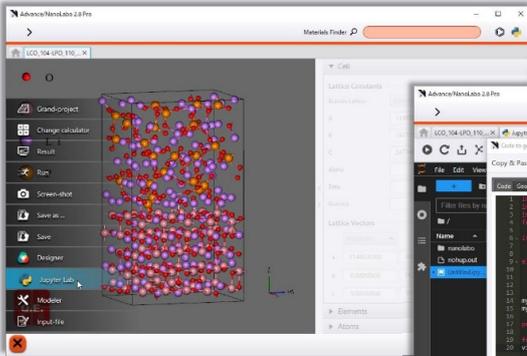
s: 不偏分散 **材料候補のスクリーニングが可能**



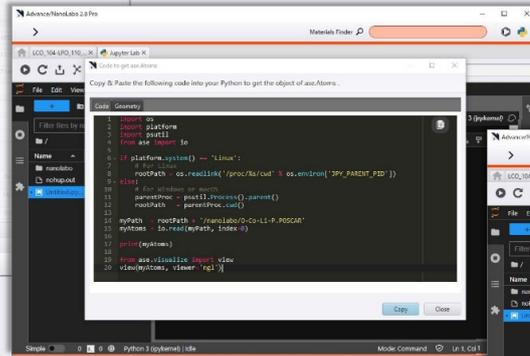
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

[v2.8] Jupyter Interface for NanoLabo

- 自社サーバーやクラウド上のJupyter LabをNanoLaboの画面で操作
- NanoLaboでモデリングした構造をJupyter Labに転送

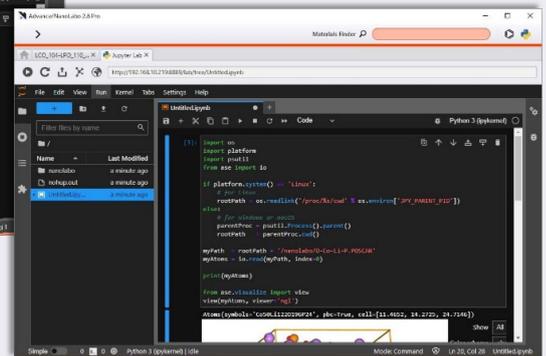


1. NanoLaboでモデル構造を作成



2. Jupyter Labにモデル構造を転送

3. Atomsオブジェクトを生成するPythonコードをコピー&ペースト



[v2.9] ThreeBodyTB

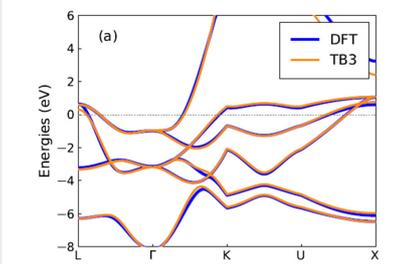
ThreeBodyTB

- NISTが開発した汎用タイトバインディング法。ハミルトニアン定義に3体項(ThreeBody)まで考慮している。
- 一般に、タイトバインディング法は第一原理計算よりも精度が低く、計算速度が速い (DFTの廉価版のようなもの)。
 - ⇒ 比較的大きい系に対しても電子状態計算が適用できる。
 - ⇒ 系に応じてハミルトニアンなどを定義するパラメータを用意する必要があるため、汎用的な運用が困難
- ThreeBodyTB では 65 種の元素について事前にパラメータが最適化されており、多くの無機材料に対して汎用的な運用が可能に。
- パラメータのフィッティングには、DFTで計算された全エネルギーおよびバンドエネルギーを使用。DFT計算のデータとしては、65種の1元素、2080種の2元素の無機結晶が用いられている。s, p, d 軌道にのみ対応(f軌道には非対応)。DFTはPBEsol/スピン分極無し条件にてQEで実行。
- Juliaで実装されており、ユーザーがスクリプトを作成。⇒ Advance/NanoLaboでは画面から直接実行できます。

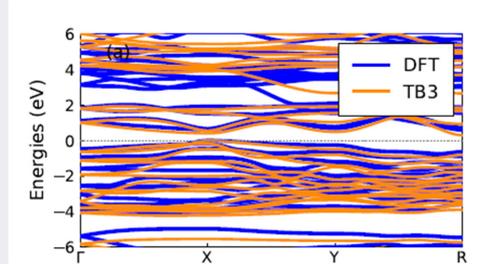
H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

ThreeBodyTB / バンド構造のベンチマーク

Rh in the fcc structure



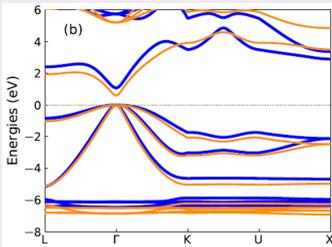
Ga₄Te₆



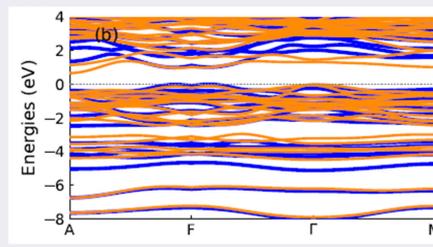
2元系であれば、定性的にバンド構造の概形を議論するには十分に使える。

※ただし、3元系以上の場合には精度が大きく低下する可能性あり。

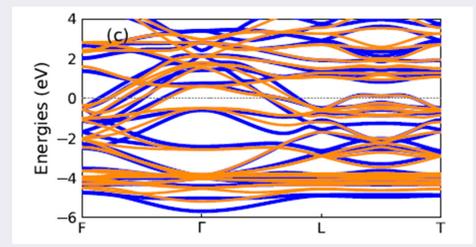
ZnSe in the zinc blende structure



Ca₅P₈



Au₂Bi₈

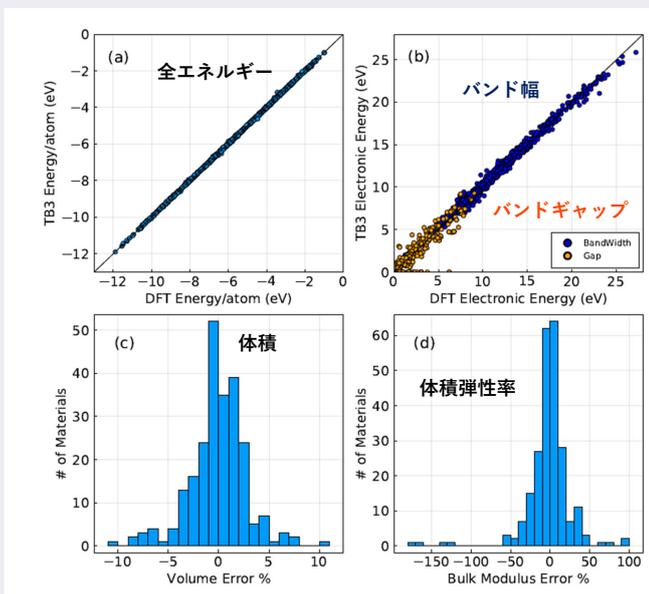


arXiv:2112.11585v3 より引用

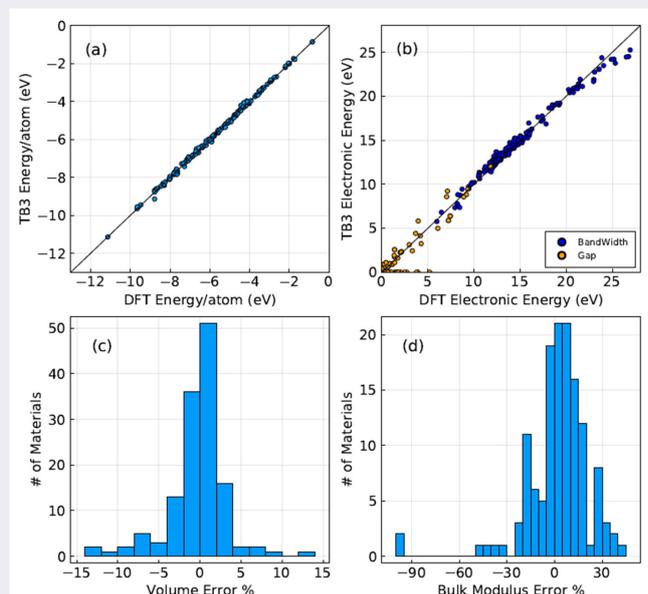
25

ThreeBodyTB / 結晶でのベンチマーク

教師データの範囲内



教師データの範囲外



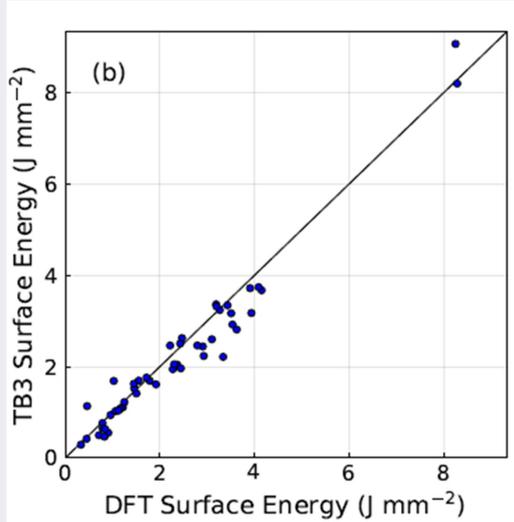
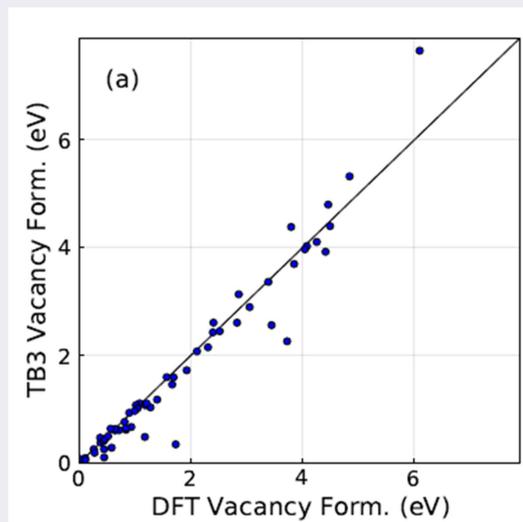
arXiv:2112.11585v3 より引用

26

ThreeBodyTB / 欠陥・表面エネルギー

欠陥生成エネルギー

表面エネルギー



欠陥や表面は教師データには含まれていないものの、比較的精度よく再現できている。

arXiv:2112.11585v3より引用

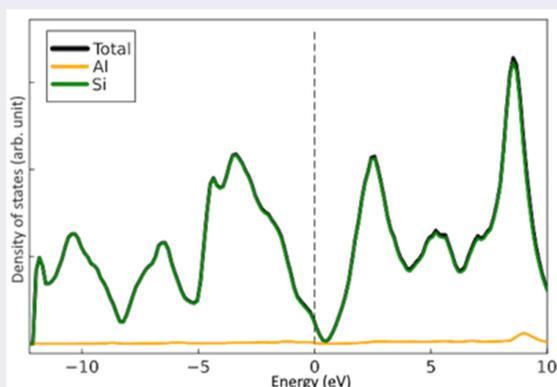
27

Si₆₄へのAl/P元素置換

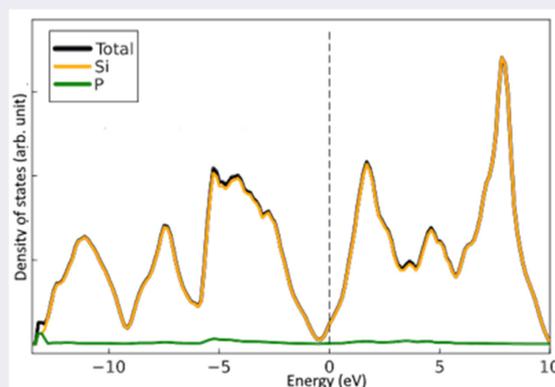
- Si結晶のスーパーセル(64原子系)にAlおよびP原子を1つだけ置換して、状態密度を計算
- 不純物ドーピングによるフェルミ準位のシフトが正しく再現されることを確認

<http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/ThreeBodyTB-dos/index.html>

Si₆₃Alの状態密度図



Si₆₃Pの状態密度図

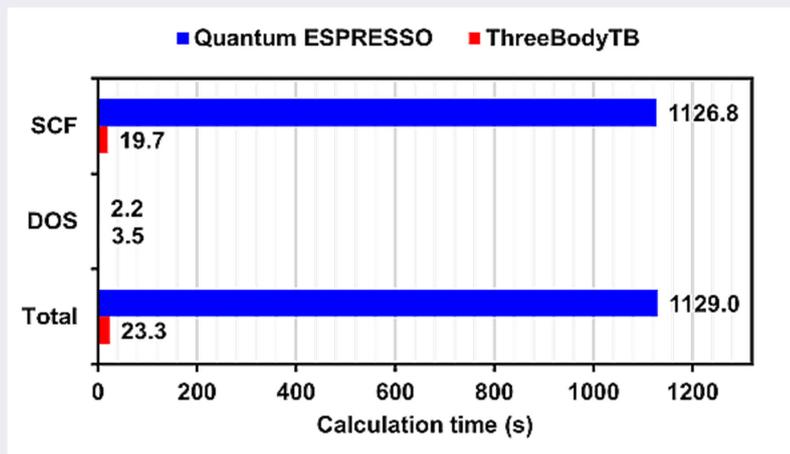


28

Si₆₄へのAI/P元素置換

- Si結晶のスーパーセル(64原子系)にAlおよびP原子を1つだけ置換して、状態密度を計算
- 不純物ドーピングによるフェルミ準位のシフトが正しく再現されることを確認

<http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/ThreeBodyTB-dos/index.html>

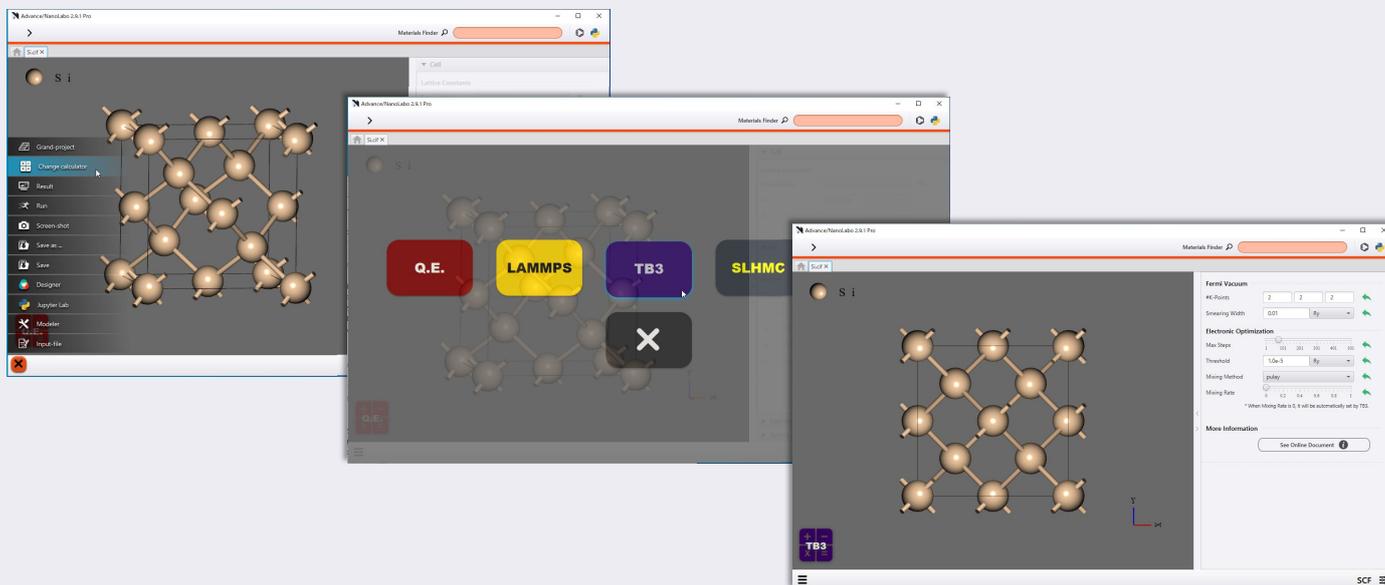


第一原理計算(QE)と比較すると50倍以上高速化されている。

⇒ 不純物や欠陥などを含む半導体など比較的にサイズが大きく第一原理では計算時間の掛かる系に対して、電子状態などの簡易的な計算を実施するのに有効。

NanoLaboからの操作方法

計算エンジンをTB3に切り替えて、SCF、Optimize、DOS、Bandを実行



Advance/NeuralMD



Ver.1.9 のご紹介

アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD新機能および今後の開発計画のご紹介
[14:55~15:45]

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

アウトライン



1. Advance/NeuralMDについて
2. Ver.1.9の新機能
3. 材料シミュレーションにおけるNN力場の位置付け

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

1. Advance/NeuralMDについて

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

Advance/NeuralMD

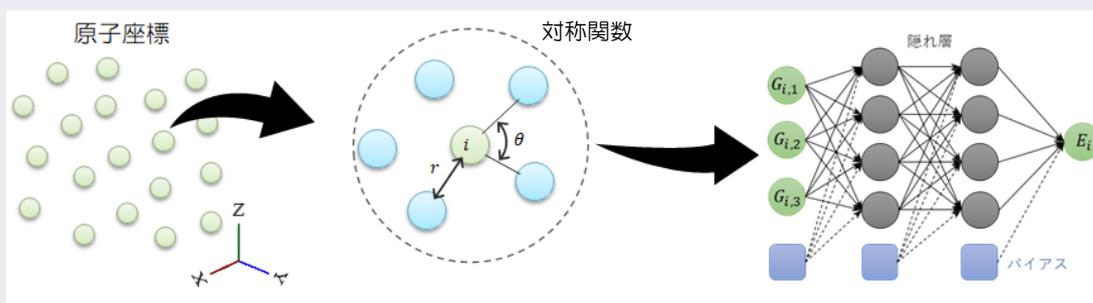
- Advance/NeuralMDは、Neural Network力場を作成して運用するためのソフトウェア。
現バージョンは、Ver.1.9。
- Advance/NeuralMD自体はコマンドラインから操作する実行体のみで構成されているが、Advance/NanoLabo(GUI)からの操作も可能。
- 計算エンジンを自社開発しており、種々の特徴的な機能を搭載。
 1. Δ -NNP法による効率的な学習
 2. Metropolis法による未知教師データの生成
 3. 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

Neural Network力場について

- 分子動力学計算にて使用する分子力場をNeural Networkで表現したもの。
- 第一原理計算(DFT)の結果を教師データとしてNeural Networkを学習させる。
- 既存の分子力場(OPLS-AA、ReaxFF、 Tersoffなど)に比べて高精度(ただし計算コストも高い)。
- 原子座標から各原子の化学環境を表現した対称関数を生成して多層パーセプトロンに入力、エネルギーを出力する。逆方向の伝搬で力(エネルギーの微分)も計算できる。



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

Neural Network力場について

長所

- 第一原理の精度を再現しつつ、数千原子系での数ns以上の分子動力学計算が可能。
- 既存の分子力場が存在しない系に対しても、ユーザーが自ら力場を作成できる。

短所

- 既存の分子力場よりも計算コストが高く(ReaxFFの5倍~)、一般的な計算サーバーでは数千原子系の計算が限界。
⇒ GPU化により大幅に高速化され、数万~数十万原子系での計算も可能に！
- 力場の性能や精度が、教師データの品質・作成手順・ユーザーの練度などに依存する。
⇒ 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法により前バージョンにて解決済み！

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6

【特徴機能①】

Δ-NNP法

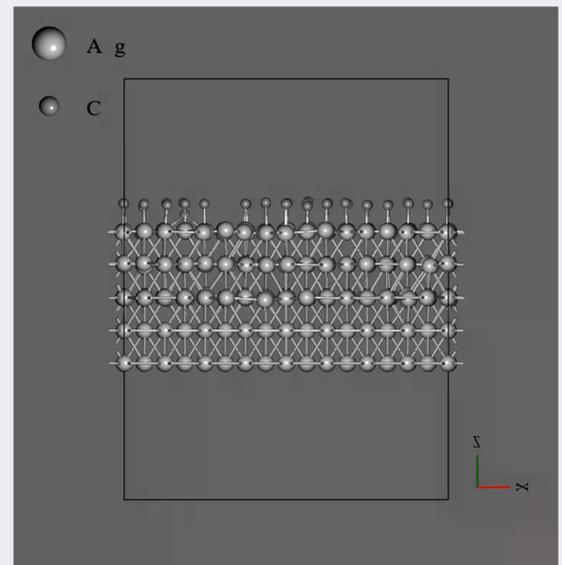
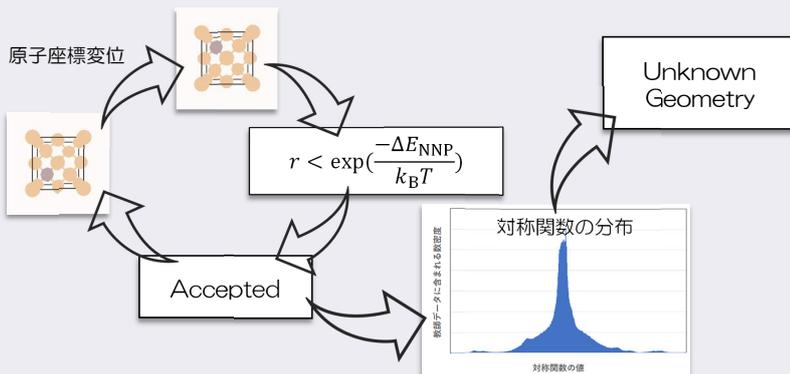
- 通常のNeural Network力場(NNP)法では、系の全エネルギー E_{tot} をNNPにて計算されたエネルギー E_{NNP} にて表現する： $E_{\text{tot}} = E_{\text{NNP}}$
- 当社ではNNP法を改良した差分NNP法(Δ-NNP法)を独自に開発し、自社製品であるNeuralMDに実装した。Δ-NNP法では、全エネルギー E_{tot} を古典力場にて計算されたエネルギー E_{C} とNNPにて計算されたエネルギー E_{NNP} の和で表現する： $E_{\text{tot}} = E_{\text{C}} + E_{\text{NNP}}$
- 古典力場としては、Lennard-Jones-likeの2体ポテンシャルを使用する：
$$E_{\text{C}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{A}{r_{ij}^{12}} + \frac{B}{r_{ij}^{10}} + \frac{C}{r_{ij}^8} + \frac{D}{r_{ij}^6}$$
- Neural Networkの教師データにはDFTで計算されたエネルギー E_{DFT} そのものではなく、DFTと古典力場の差分 $E_{\text{DFT}} - E_{\text{C}}$ を使用する。
- 無機結晶においては、Lennard-JonesやBuckinghamなどの2体関数にてポテンシャル地形の概ねの構造を表現できることが知られている。当社はこれに着目してポテンシャル地形の第0近似として2体関数を適用し、2体関数で表現しきれない余剰の部分をNNP法で補完するというアプローチを採用した。その結果、NNPは凹凸の少ない地形のみを表現することになり、Neural Networkの真価を十分に発揮することなく結晶系を取り扱ることが出来る。つまり、結晶系という平時においては、Neural Networkは余力を十分に残した状態にある。逆に、欠陥や不純物、表面や界面、イオンが激しく運動するといった特殊な状況においては、このNeural Networkの余力が機能する。
- また、Δ-NNP法の適用により、(1)Neural Network学習過程の収束性が向上し、且つ、(2)少ない教師データでも有用な力場を作成できるという大きなメリットを得ることに成功した。
- 有機分子系に対しては、古典力場としてReaxFFを適用することも可能。

7

【特徴機能②】

Metropolis法による未知教師データの生成

- 作成済みのNeural Network力場を利用して、Metropolis法によるモンテカルロ・シミュレーションが実施可能。
 - 原子の並進移動、原子種の入れ替え、空孔位置の入れ替えの操作が利用可能。
- シミュレーションの過程で生成された多数の構造を教師データに追加して、Neural Networkの再学習に使用できる。
 - 対称関数の分布(ヒストグラム)を利用して、未知の構造のみを再学習用に抽出する。



※京都大学、黒川先生よりご提供頂いたデータ。
Ag表面でのC原子の拡散・成長過程。

8

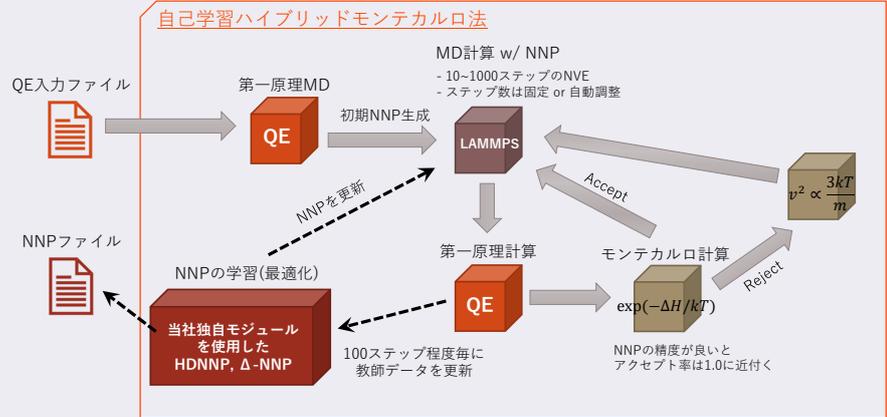
【特徴機能③】

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

“Self-learning hybrid Monte Carlo: A first-principles approach”, Y.Nagai, et al., Phys. Rev. B 102 (2020) 041124

Advance/NeuralMDにおける実装

- 第一原理計算には、Quantum ESPRESSO (オープンソース)を使用
- 分子動力学計算には、LAMMPS (オープンソース)を使用
- Neural Networkの学習については、当社独自実装のモジュールを使用
- モンテカルロ法におけるアンサンブルには、NVTおよびNPTに対応
- アクセプト率に応じて、MD計算のステップ数を自動調整する機能を搭載
- 全ての機能をAdvance/NanoLabo(GUI)から操作可能

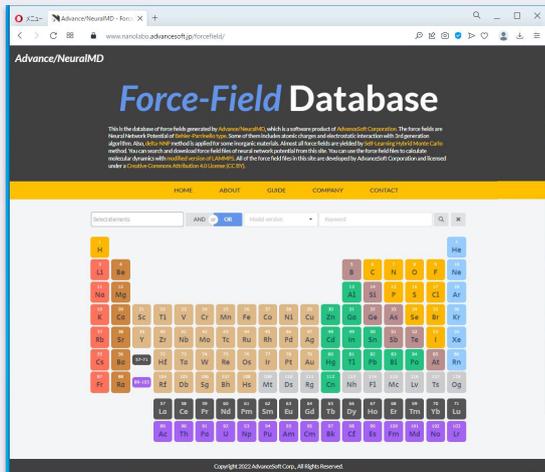


自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の計算スキーム。ユーザーは、QEの入カファイルを用意するのみでよい。

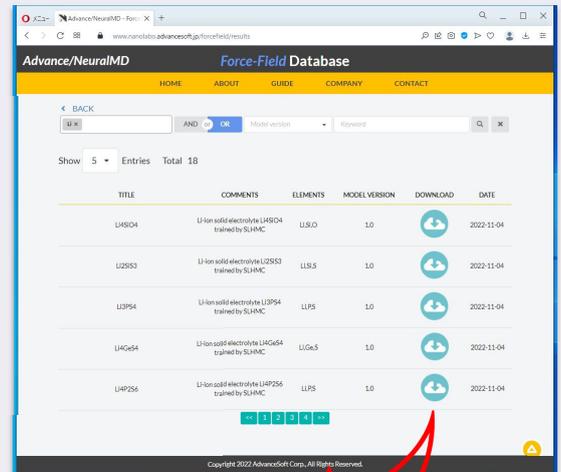
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

9

力場データベース



元素を指定して検索



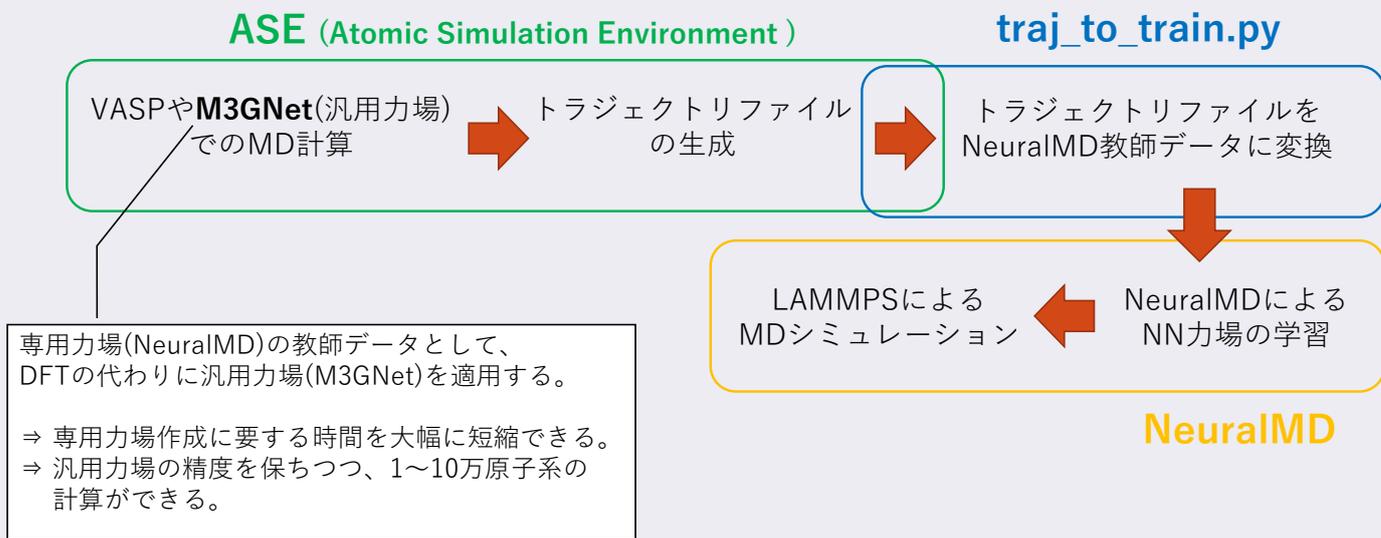
現状では、50種ほどの無機結晶にのみ対応
今後、力場データを拡充予定

力場ファイル、教師データ、テストデータ、
QE入力ファイル、NeuralMDログをダウンロード

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

10

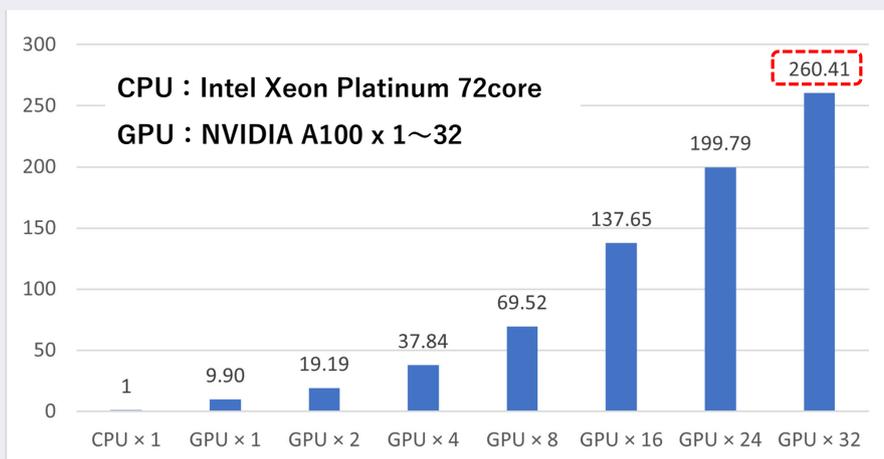
ASEトラジェクトリを教師データに変換



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

大規模GPU環境に対応

- 複数のGPUを搭載したマシン and/or GPUを搭載したマシンが複数ある環境での並列計算に対応
- リチウムイオン伝導体 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ のスーパーセルモデル(98,000原子系)でのベンチマークにて、CPUの260倍の高速化に成功
- GPUを2~4デバイス使うことで、数万原子系のMDも現実的な時間で実施可能



2. Ver.1.9の新機能

Ver.1.9の新機能

1. 複数のNNモデルを用いた力場表現
2. Super Epoch法による学習の高速化
3. 入力データのデフォルト値変更

1. 複数NNモデルを用いた力場表現

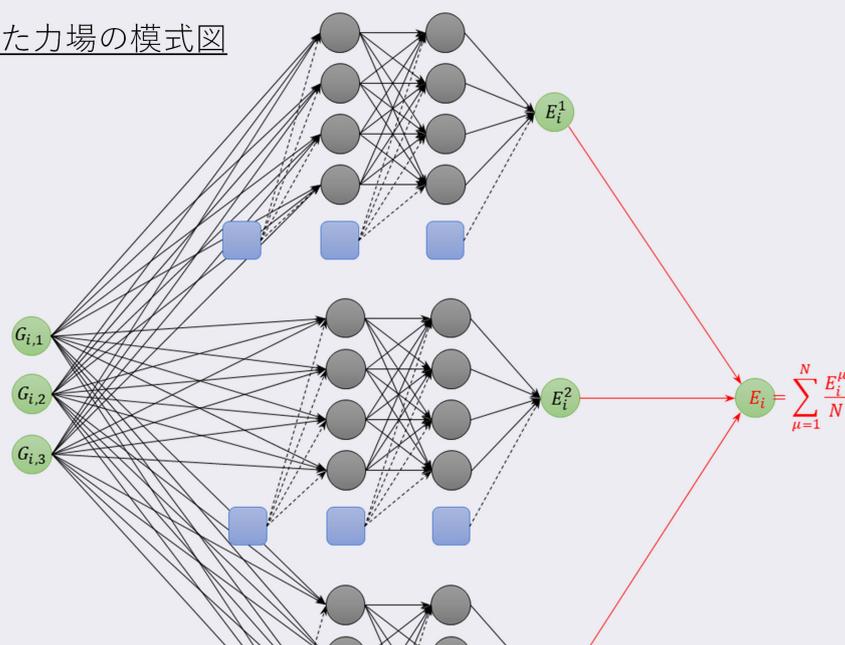
- 複数の多層パーセプトロンを用意してその平均値でエネルギーを表現する
- ANI-2x(<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.ictc.0c00121>)などでも採用されており、分子動力学計算の過程で出現する構造が教師データに含まれないような外挿領域にあっても、単一の多層パーセプトロンを用いる場合に比べて精度よく計算できる
- Neural Network力場の安定性が向上するため、特に、**無機材料が溶融した状態やアモルファス材料に対して有効**
- Δ -NNP法および自己学習ハイブリッドモンテカルロ法と併用することで、比較的少ない数の教師データであっても、安定した力場が容易に作成できる
- 分子動力学計算においては、計算のボトルネックは対称関数およびその微分にあるため、Neural Networkモデルが複数に増えても計算時間への影響は無視できる程度に小さい。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

15

1. 複数NNモデルを用いた力場表現

複数NNモデルを用いた力場の模式図



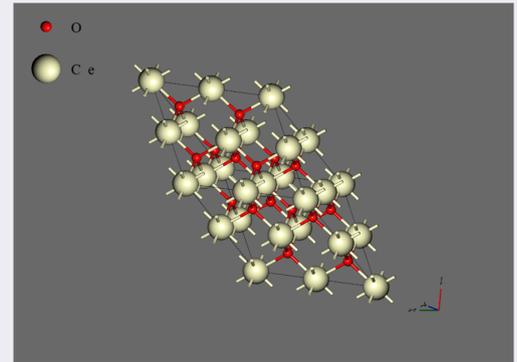
16

CeO₂/UO₂/PuO₂の溶融

- CeO₂、UO₂、PuO₂の溶融状態に対応したNN力場を作成して融点の評価を行う。
- NN力場の作成に当たっては、NPTアンサンブルでの自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を適用
- 温度は4000K、圧力は1.0bar、セル形状の自由度はTriclinic
- 結晶構造は螢石型のプリミティブセルをベースとして、2 x 2 x 2 のスーパーセル(24原子系)。

第一原理計算の条件	設定値
擬ポテンシャル	ウルトラソフト型
カットオフエネルギー	40-93Ry, 360-839Ry
k点サンプリング	2 x 2 x 2
スピン分極	無し
交換相関汎関数	GGA-PBE

NN力場の条件	設定値
Δ-NNP法	Lennerd-Jones-likeポテンシャルを適用
対称関数	Chebyshev多項式 (70個、6.0 Å)
NNモデル	32モデル x 2層 x 35ノード



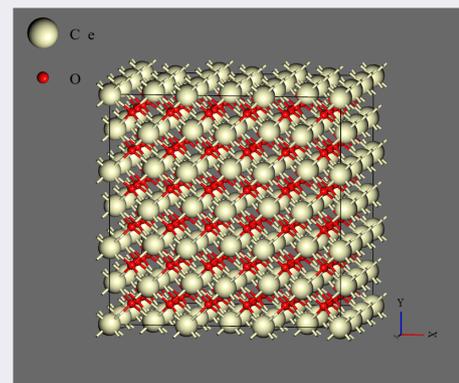
17

CeO₂/UO₂/PuO₂の溶融

- 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法で生成された教師データ数は、600~1600個程度
- 作成したNN力場を使って、324原子系のスーパーセルでMD計算を実施
- NPTアンサンブルにて300K→3500Kに昇温して融点を評価
- 非常に少ない教師データ数でありながら、融点の実験値を正しく再現できている

	教師データ数	エネルギーのRMSE	力のRMSE
CeO ₂	1634	0.020 eV/atom	0.29 eV/Å
UO ₂	650	0.018 eV/atom	0.29 eV/Å
PuO ₂	1078	0.018 eV/atom	0.29 eV/Å

	融点の計算値	融点の実験値
CeO ₂	2299°C	約2400°C
UO ₂	2476°C	約2800°C
PuO ₂	2376°C	約2400°C

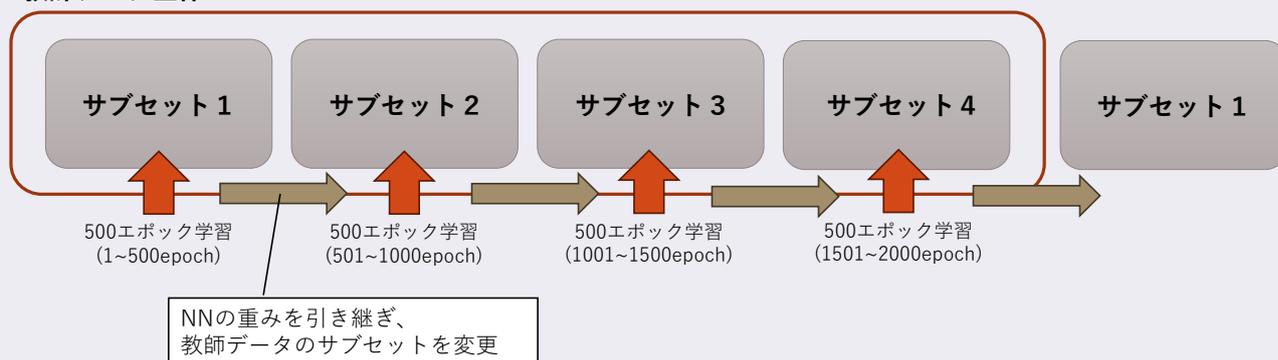


18

2. Super Epoch法による学習の高速化

- 複数NNモデルを適用したことで、NN力場の学習処理に多くの時間が掛かる。そこで、学習処理の高速化を目的として、Super Epoch法を実装
- 教師データを複数のサブセットに分割して、各サブセットを使ったL-BFGS法による学習処理を連続して実行
- 1エポック当たりの計算量を低減させつつ、一つのサブセット内では対称関数およびその微分をメモリー上で共有することでエポック毎の対称関数計算を回避
- メモリー使用量も大幅に低減

教師データ全体



19

3. 入力データのデフォルト値変更

- NN力場の設定(ハイパーパラメータ)のデフォルト値を、3~4元素系の無機材料に適した内容に変更
- 多くの無機材料に対して、デフォルト設定のまま十分な精度の力場が作成可能
- 有機材料が含まれる場合には、設定値の変更が必要

#	設定項目	デフォルト値
1	in-situテスト	yes
2	LJ-likeポテンシャル	yes
3	対称関数	Chebyshev多項式
4	カットオフ関数	$\tanh(1 - r/r_0)^3$
5	動径成分	50個、6.0 Å
6	角度成分	30個、6.0 Å
7	NNモデル	16モデル x 2層 x 40ノード

3. 材料シミュレーションにおける NN力場の位置付け

NN力場の位置付け

- 現在、世界中の研究拠点にて種々のNeural Network力場が開発され、当該分野はここ数年で急速に発展しつつあります。
- Neural Network力場を 既存の第一原理計算の各手法と比較しつつ、材料シミュレーションの中でどのような位置付けの技術となり得るのかを解説します。

密度汎関数理論 (DFT)

- 密度汎関数理論(DFT : Density Functional Theory)とは、基底状態エネルギー E を電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数として定義すること。
多体波動関数を明示的に含まないので、旧来の波動関数理論よりも計算コストが低い

$$E = E[\rho]$$

- 汎関数による記述可能性については理論的に厳密に正しいのだが、汎関数の具体的な関数形が未知である。
- エネルギー汎関数に近似的な関数形を適用する。
局所密度近似LDA、一般化密度勾配近似GGA、ハイブリッド汎関数など

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

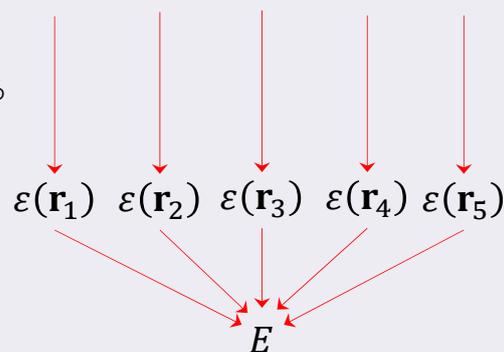
23

密度汎関数理論 (DFT)

- 局所密度近似LDA

$$E = E[\rho] = E(\rho(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_2), \rho(\mathbf{r}_3), \rho(\mathbf{r}_4), \rho(\mathbf{r}_5), \dots)$$

$\rho(\mathbf{r}_1)$ のみから $\varepsilon(\mathbf{r}_1)$ が決まる



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

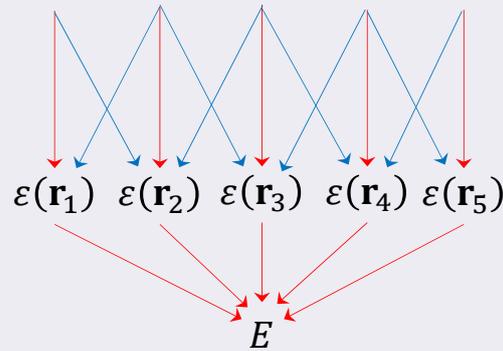
24

密度汎関数理論 (DFT)

- 一般化密度勾配近似GGA

$$E = E[\rho] = E(\rho(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_2), \rho(\mathbf{r}_3), \rho(\mathbf{r}_4), \rho(\mathbf{r}_5), \dots)$$

$\rho(\mathbf{r}_2)$ と隣接する $\rho(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_3)$ のみから $\varepsilon(\mathbf{r}_2)$ が決まる



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

25

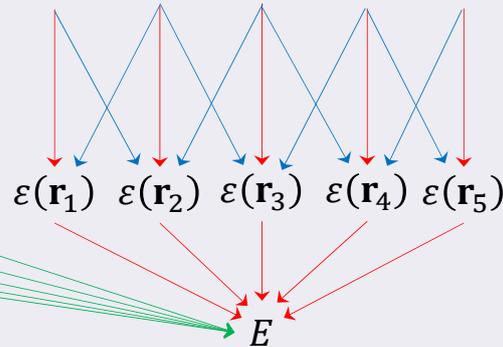
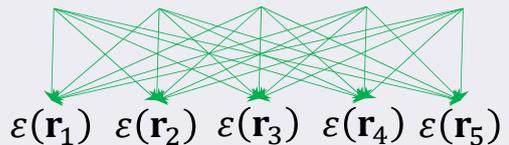
密度汎関数理論 (DFT)

- ハイブリッド汎関数

$$E = E[\rho] = E(\rho(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_2), \rho(\mathbf{r}_3), \rho(\mathbf{r}_4), \rho(\mathbf{r}_5), \dots)$$

Hartree-Fock交換項

$\psi(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_3) \psi(\mathbf{r}_4) \psi(\mathbf{r}_5)$



$\psi(\mathbf{r}_1), \psi(\mathbf{r}_2), \psi(\mathbf{r}_3), \psi(\mathbf{r}_4), \psi(\mathbf{r}_5), \dots$
全てを使って $\varepsilon(\mathbf{r}_1)$ が決まる

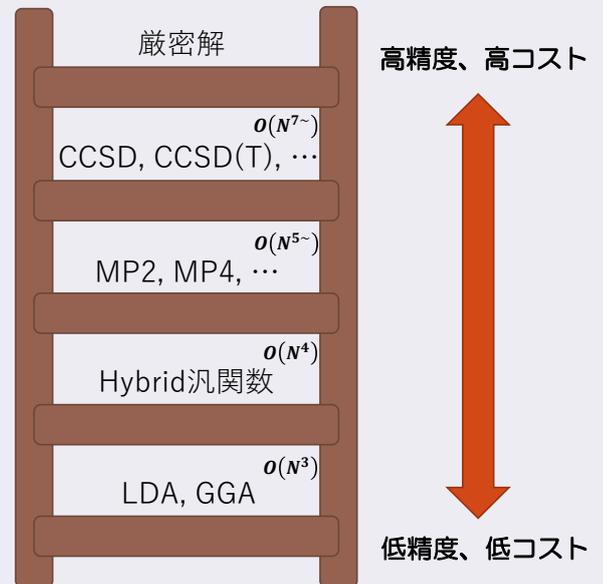
エッジを $1/r$ や erfc/r に固定した
グラフ畳み込みと見なせる。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

26

ヤコビの梯子

- LDAやGGAは計算コストが低い。ただし計算精度も低い(バンドギャップの過小評価など)。
- Hybrid汎関数を適用すると計算精度は向上するものの、計算コストも増大する。
- さらに高精度化しようとする、MP2やCCSDなどの波動関数理論で計算されたエネルギーを混ぜ合わせたDouble-Hybrid汎関数となる。
- DFTの強みは、波動関数理論よりも低コストであることだったはず。しかしながら、精度を追求することで波動関数理論と何ら変わらない計算コストに達する。
- DFTも波動関数理論も計算機上のアルゴリズムの1つである。本来 $O(N!)$ の厳密解を、精度を保ったまま、より低いコストで解くことはできない。
⇒ とどのつまり P≠NP問題



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

27

Neural Network力場の場合

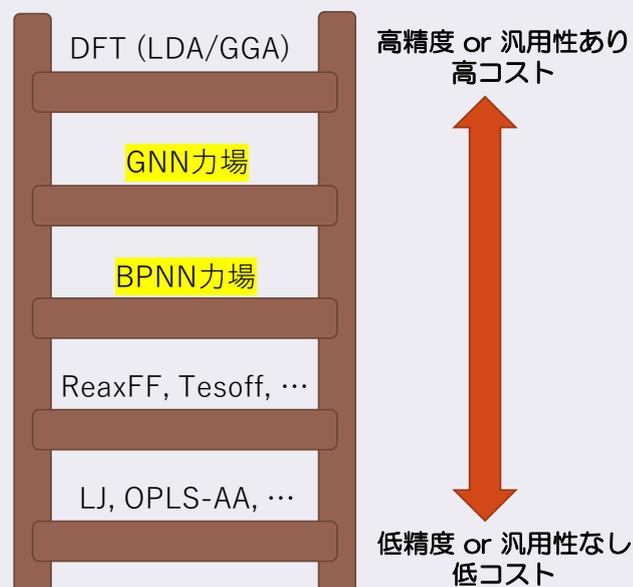
- DFT vs 波動関数理論
 - 高コストな波動関数理論を低コストなDFTで代替しようとした。
 - 計算精度を犠牲にすることで、DFTによる高速化を実現した。
 - Hybrid汎関数で高精度化を図るも、計算コストも上昇。
 - 精度とコストの両立は不可能であった。
- NN力場 vs DFT
 - 高コストなDFTを低コストなNN力場で代替しようとしている。
 - 計算精度または汎用性を犠牲にすることで、NN力場による高速化を実現している。
 - グラフニューラルネットワークを応用することで高性能化を図る手法も登場しているが、その分だけ計算コストも増大している。
 - 機械学習を用いたとしても、精度とコストの両立は不可能か？

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

28

Neural Network力場の場合

- DFTにおけるヤコビの梯子の問題を、力場法まで拡張して解釈してみる。
- これまではDFTと古典力場の間には大きな隔たりがあったが、この状況を補間する手法してNN力場を位置付けることができる。
 - DFT : 1~100原子
 - **NN力場 : 100~10,000原子**
 - 古典力場 : 1,000~1,000,000原子
- 力場の場合には、精度とコストに加えて**汎用性**も重要なファクターとなる。
- BPNN力場とGNN力場で状況が異なる。



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

29

BPNN力場とGNN力場

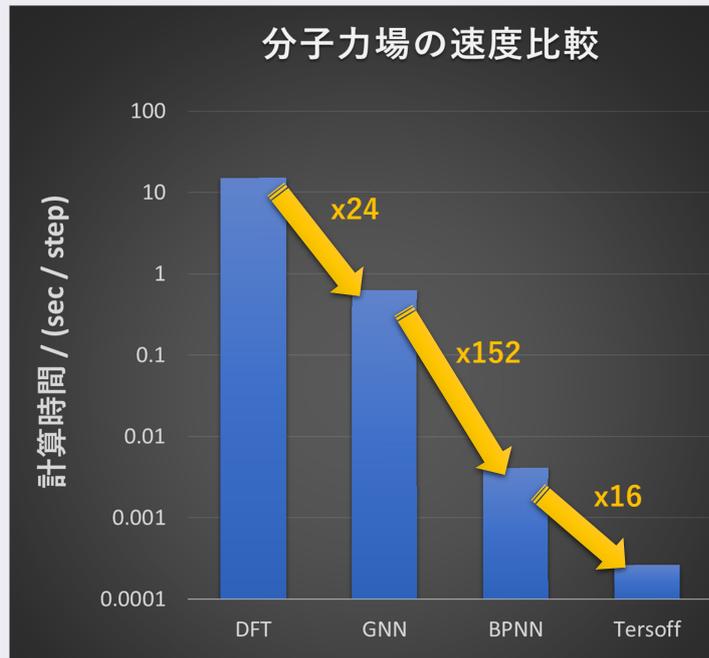
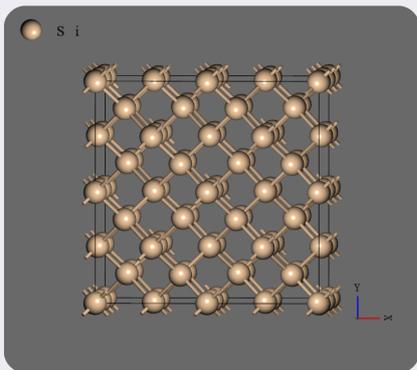
- Behler-Parrinello Neural Network (BPNN)力場
 - 原子の化学環境を表現した対称関数を多層パーセプトロンに入力して、原子エネルギーを出力する。
 - 実装の容易さからC++やFortranで開発されることが多い。
 - MD計算実行時にMPI並列が利用可能で、100~10,000原子系の計算が可能。
 - 個別の系に対してユーザーが力場を適宜作成する必要があり、汎用性はない。
 - **aenet, n2p2, DeepMD, Advance/NeuralMD** など
- Graph Neural Network (GNN)力場
 - 原子間の結合の情報をグラフニューラルネットワークとして表現する。原子エネルギーに加えて、結合エネルギーを露わに表現できるためBPNN力場に比べて非常に高性能。
 - Pythonの自動微分を活用しなければ実装は困難。
 - MD実行時もPythonを使用しており、MPI並列は利用不可。GPU 1 デバイスのみでの高速化。
 - 最新のGPUを使えば 100~1,000原子程度の計算は可能。
 - 事前に大量の教師データ(数百万~数億)で学習済みのものが公開されており、ユーザーが自身で力場を作成する必要がない。⇒ **Open Catalyst, M3GNet** など

30

BPNN力場とGNN力場

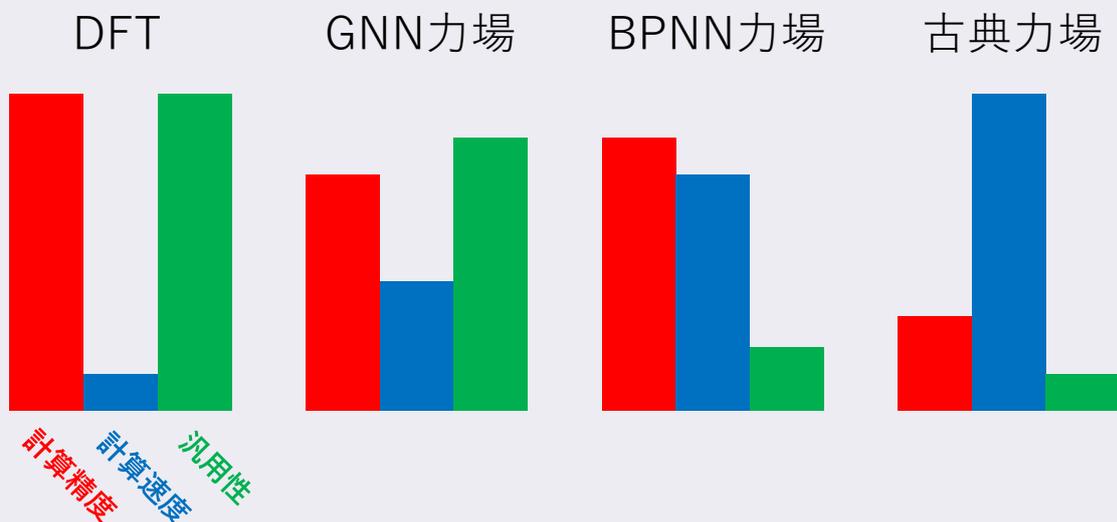
• 計算速度のベンチマーク

- ✓ 計算対象
Siスーパーセルモデル (64原子系)
- ✓ マシンスペック
CPU : Inter® Core™ i7-10700 @ 2.90GHz (8コア)
OS : Windows10



31

計算精度 / 計算速度 / 汎用性



計算精度／計算速度／汎用性

- BPNN力場は、古典力場の高精度化と見なせる。
 - ⇒ 従来の古典力場では不可能であった定量的な物性値の予測に適している。
- GNN力場は、DFTの高速化と見なせる。
 - ⇒ DFTによる大量のデータ生成が必要なMIにおいて、GNN力場で代替することで大きな高速化が期待できる。

今後の予測

- 最近では電子状態を模倣したNN力場も考案されつつあるが、DFTに匹敵する計算コストになることが予測される。現行のGNN程度に留めておくのがベストである。
- Python(特に自動微分)のおかげで、当該分野の研究開発のスピードが極めて速い。1~2年のうちにGNN力場の決定版的なものが公開されるはず。公開された力場をMIなど活用するためのプラットフォーム作りが重要。
- BPNN力場は、MDシミュレーション技術の一部として定着する。効率的な力場作成の手法、および、力場作成~MD計算までの工程を使い易くしたユーザーインターフェースが重要。
- GNN力場でMD計算を行い、そのトラジェクトリを教師データとしてBPNN力場に焼き直す手法の開発。
- GNN力場とBPNN力場の中間の需要。対象の材料群をある程度絞り込みつつ、材料探索(MI)を行いたい。⇒ GNN力場のファインチューニング・サービス

今後の開発計画のご紹介



アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD新機能および今後の開発計画のご紹介
[15:45~15:55]

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

アウトライン



1. Jupyter Interfaceの開発状況
2. DaaS型クラウドサービス
3. ロードマップ

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

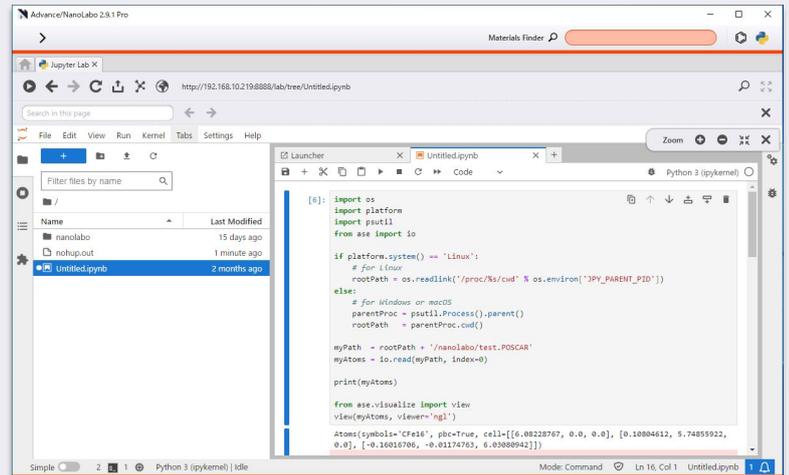
2

1. Jupyter Interfaceの開発状況

- 初版ではログイン方式がTokenのみであったが、パスワード方式、他のアカウントと連携した認証方式など、Jupyter Labの任意の実装に対応

⇒ Jupyter Labで実装された種々のサービスとの連携が可能

- ドラッグ&ドロップの制御を改善
- 拡大縮小、Ctrl+Fキーによる検索機能などに対応



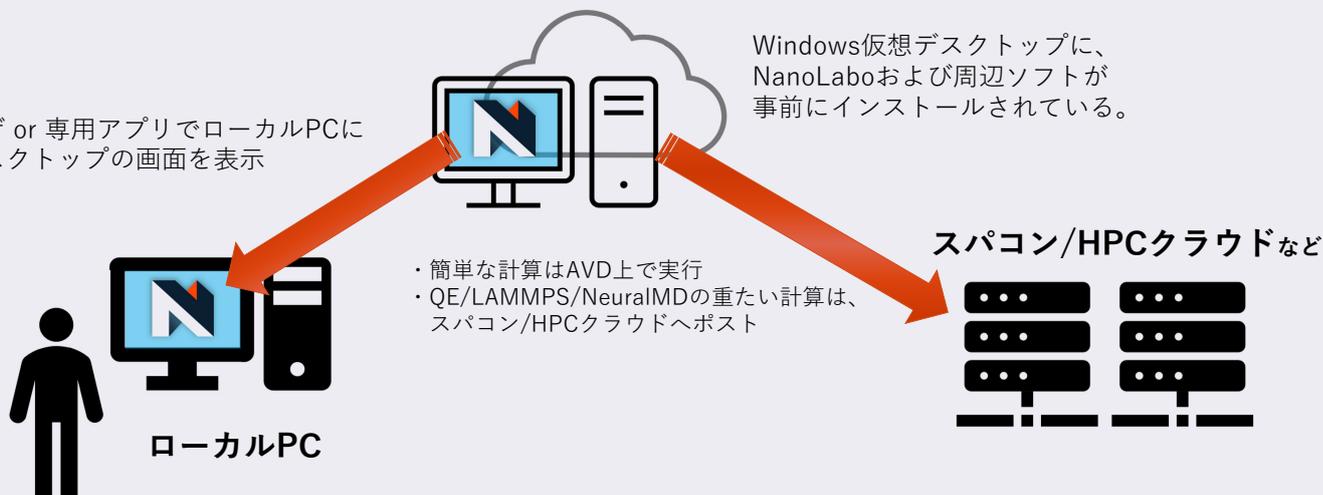
2. DaaS型クラウドサービス

- Desktop as a Service(DaaS)型のクラウドサービスとして、NanoLaboを提供開始します。
- Microsoft社のAzure Virtual Desktopを利用して、クラウド上にNanoLaboがインストールされたWindows仮想デスクトップ環境を用意。
- ユーザーは ウェブブラウザ or 専用アプリ で仮想デスクトップにログインするだけで、NanoLaboが利用可能。
- 仮想デスクトップのマシンスペックは、タワー型ワークステーション相当(16CPUコア~)を予定。
- NanoLaboだけでなく、M3GNet、CHGNet、ThreeBodyTB、PBSジョブ管理システムなどの周辺ソフトも事前に設定済み。

2. DaaS型クラウドサービス

Azure Virtual Desktop (AVD)

ブラウザ or 専用アプリでローカルPCに仮想デスクトップの画面を表示



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

3. ロードマップ

2023年11月

✓ Advance/NanoLabo

- Jupyter Interfaceの機能強化
- M3GNetのMatGL版に対応
- 汎用GNN力場CHGNetに対応

<https://github.com/CederGroupHub/chgnet>

✓ GNN力場ファインチューニング

サービス開始

2023年12月

✓ DaaS型クラウドサービスを開始

2024年冬以降

✓ Advance/NanoLabo

- 3D-RISMおよびESM-RISMに対応 (Pro限定)
- NWChemインターフェースを搭載
- ChatGPTによるFAQ機能
- 大規模分子モデルの可視化機能など

✓ Advance/NeuralMD

- reax- Δ -NNP法を活用した有機/無機の界面系への応用
- 学習処理の高性能化および高速化
- LAMMPSでの外挿判定機能
- Windows版でのMPI並列など

6

汎用GNN力場の ファインチューニング



アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD新機能および今後の開発計画のご紹介
[15:55~16:15]

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

アウトライン

1. M3GNet、CHGNetについて
2. ファインチューニングとは
3. ファインチューニング実施方法
4. ファインチューニング実施結果

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

1. M3GNet、CHGNetについて

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

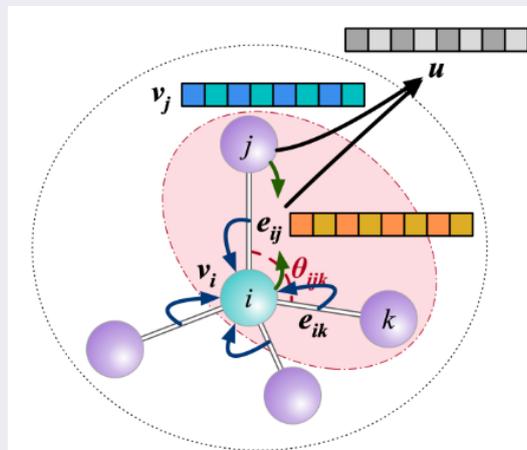
3

M3GNetについて

Chen, C., Ong, S.P. A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. Nature Computational Science, 2023, 2, 718–728. DOI: 10.1038/s43588-022-00349-3.

GitHub: <https://github.com/materialsvirtuallab/matgl>, Official Documentation: <https://matgl.ai/>

- ✓ グラフ構造（多様な化学空間に柔軟に対応可能）を使用する **GNNに、三体相互作用（原子の座標と結晶の3×3格子行列）を組み込んでおり、力や応力などのテンソル量を自動微分可能**
- ✓ 過去10年間にMaterials Projectで行われた大規模な構造緩和データを **訓練データ（構造、エネルギー、力、応力）** としており、**周期表全体で動作するUIP**
- ✓ 多様な化学空間にわたる材料の構造緩和、動的シミュレーション、および物性予測に幅広く適用可能（サロゲートモデル）
- ✓ 元々はTensorFlowで実装されていたが、2023年5月末以降はDGLとPyTorchに基づいて構築されたMatGLの一部として再実装



M3GNetのアーキテクチャの模式図

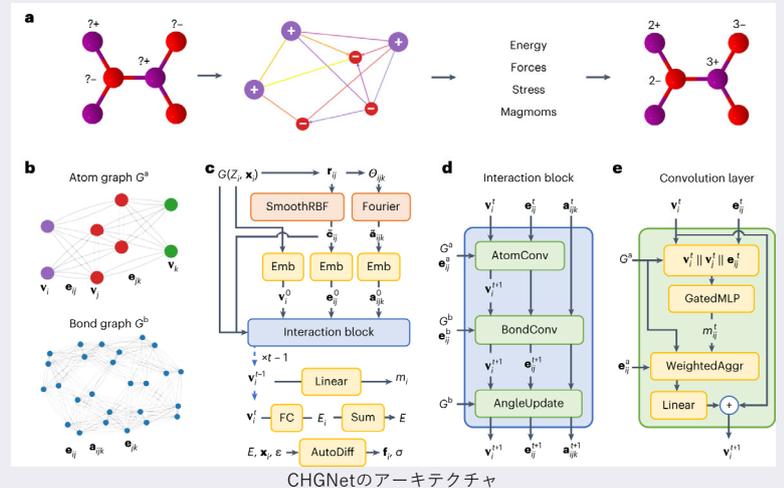
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

CHGNetについて

Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C.J., Ceder, G. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. Nature Machine Intelligence, 2023, 1-11. DOI: 10.1038/s42256-023-00716-3. GitHub: <https://github.com/CederGroupHub/chgnet>, Official Documentation: <https://chgnet.lbl.gov/>

- ✓ GNNに磁気モーメントを用いて電荷情報を明示的に取り込むことで、原子間相互作用と電荷状態を同時に考慮しており（電子の軌道占有を正確に表現）、大規模なシミュレーションと複雑な電子相互作用に対応可能
- ✓ 例えば、異価イオンの複雑な相互作用を正確に捉える能力を持っている（**酸化物への適用性大**）
- ✓ 周期表全体にわたる146,000化合物の150万以上の構造で構成される包括的な**訓練データ（構造、エネルギー、力、応力、磁気モーメント）**である、Materials ProjectのGGA/GGA+U静的及び緩和軌道で事前学習



a. 未知の原子電荷を持つ結晶構造を入力⇒エネルギー・力・応力・磁気モーメントを予測⇒電荷を含む構造取得

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

M3GNet、CHGNetを使用する理由

機械学習による結晶の安定性予測の評価フレームワークMatbench Discovery

J. Riebesell et al., Matbench Discovery: An evaluation framework for machine learning crystal stability prediction, arXiv:2308.14920v1 [cond-mat.mtrl-sci] (2023). GitHub: <https://github.com/janosh/matbench-discovery>

- ✓ 機械学習ポテンシャルを使用して安定な無機結晶を高速に探索することを、DFTの事前フィルターとして機能させるプロジェクト
- ✓ 材料探索プロセスを効率化し、様々なモデルのパフォーマンスを評価し、最適な機械学習手法を識別する目的でフレームワークを設計
- ✓ 熱力学安定性予測のテストデータによるF1スコア（モデルのバランスの取れた性能）に基づいてランク付け
- ✓ **CHGNetが最も精度が高く、次にM3GNet。上位3モデルは全てUIP-GNN**
- ✓ UIP-GNNは、高スループット（高速で多量のデータ処理）DFTにおける計算コストの効果的な割り当てのための優先順位付けツールとして十分有用

Model	F1	DAF	Precision	Accuracy	TPR	TNR	MAE	RMSE	R ²	training size	Model Class
CHGNet	0.58	3.06	0.52	0.84	0.66	0.88	0.07	0.11	0.61	1,580,395	UIP-GNN
M3GNet	0.57	2.67	0.45	0.80	0.77	0.81	0.07	0.11	0.60	188,349	UIP-GNN
MACE	0.57	2.78	0.47	0.81	0.72	0.83	0.07	0.11	0.63	1,580,395	UIP-GNN
ALIGNN	0.56	2.92	0.50	0.83	0.65	0.87	0.09	0.15	0.27	154,719	GNN
MEGNet	0.51	2.70	0.46	0.81	0.57	0.86	0.13	0.20	-0.28	69,239	GNN
CGCNN	0.51	2.63	0.45	0.81	0.59	0.85	0.14	0.23	-0.62	154,719	GNN
CGCNN+P	0.51	2.40	0.41	0.78	0.67	0.80	0.11	0.18	0.03	154,719	GNN
Wrenformer	0.48	2.13	0.36	0.74	0.69	0.75	0.10	0.18	-0.04	154,719	Transformer
BOWSR	0.44	1.91	0.32	0.68	0.74	0.67	0.12	0.16	0.14	69,239	BO-GNN
Voronoi RF	0.34	1.51	0.26	0.67	0.51	0.70	0.14	0.21	-0.31	154,719	Fingerprint
Dummy	0.19	1.00	0.17	0.68	0.23	0.77	0.12	0.18	0.00		

CHGNetは、機械学習による材料発見における現在のSOTA（State Of The Art、最先端の技術）

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6

2. ファインチューニングとは

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

7

ファインチューニングの概要

ファインチューニング：
事前に訓練された機械学習モデルを、特定のタスクに適応させる手法

特徴	
タスク適応性	事前学習済みモデルを、特定のタスクに高精度で適応させることができる。
データ効率	タスク固有の訓練データが少ない場合でも、事前学習済みモデルを用いることで高い性能を達成できる。
計算効率	事前学習済みモデルを再利用することで、計算リソースと時間を大幅に節約できる。
汎用性	事前学習済みモデルを多様なタスクや訓練データに適応させることができる。
パフォーマンス最適化	ハイパーパラメータの調整や訓練データ拡張技術を用いることで、モデルの性能をさらに向上させることができる。

注意点	
計算リソース	ファインチューニングには一定量の計算リソースが必要で、これが制約となる場合がある。
モデルのサイズ	事前学習済みモデルが大規模な場合、そのサイズが問題となる場合がある。
対応の限界	事前学習済みモデルが特定のタスクに適用できない場合は、そもそも精度向上不可。
過学習リスク	ハイパーパラメータの調整が不適切な場合、過学習のリスクが高まる。
検討要素の多さ	訓練データの量と質、ハイパーパラメータの選択など、多くの要素に注意を払う必要がある。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

8

(補足) ファインチューニングと転移学習の違い

項目	ファインチューニング	転移学習
目的	特定のタスクに適用する	別のタスクに適用する
手法	事前学習済みモデルのNN各層の重みを初期値として使用、全層又は一部層の重みを更新	事前学習済みモデルのNNの全層又は一部層を凍結し、非凍結層及び新しい層のみを訓練

■ 共通点

両者ともに、事前学習済みモデルを新しいタスクに適用する。

■ 主な違い

ファインチューニングは、事前学習済みモデルの全て又は一部の重みを新しい訓練データで更新。転移学習は、事前学習済みモデルの一部層を凍結することが一般的で、新しい層を追加して訓練する場合もあり。

3. ファインチューニング実施方法

今回対象とした事例

• 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る。

• 教師データ

Quantum ESPRESSOで生成した、エネルギー、力で構成(温度は1000K)。

4329構造 (Ti-11Al-4V : 1728構造、Ti-9Al-3V : 2601構造)

• ファインチューニングのベースとなる事前学習済みモデル

M3GNet : M3GNet-MP-2021.2.8-PES (GitHubリポジトリで公開)

CHGNet : e30f77s348m32.pth.tar (GitHubリポジトリで公開)

• 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。

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。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

11

主なハイパーパラメータ等

ハイパーパラメータ等	M3GNet	CHGNet	備考
グラフ表現のためのカットオフ半径	5.0	5.0	デフォルト設定 (単位Å)
結合 (三体相互作用) のためのカットオフ距離	4.0	3.0	デフォルト設定 (単位Å)
教師データを訓練、検証、テストデータに分割する割合	8 : 1 : 1	8 : 1 : 1	デフォルト設定
バッチサイズ (GPUで一度に処理されるデータ数)	16	16	今回使用したGPU(12GB)での設定可能上限。 デフォルト設定は両者とも32
学習における損失関数	MSE	MSE	デフォルト設定 (MSE : 平均二乗誤差)
学習における最適化アルゴリズム	Adam	Adam	デフォルト設定 (Adam : Adaptive Moment Estimation)
学習率スケジューラ	CosineAnnealingLR	CosineAnnealingLR	デフォルト設定。学習率をコサイン関数に基づいて減少させる方法。学習率が最小値と最大値の間で振動する周期は10エポックとした (CHGNetでのデフォルト設定)。
初期学習率	0.001	0.001	デフォルト設定
エポック数	50	50	CHGNetでのデフォルト設定。今回使用したGPU(12GB)で処理時間は30分弱。M3GNetはデフォルト無し。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

12

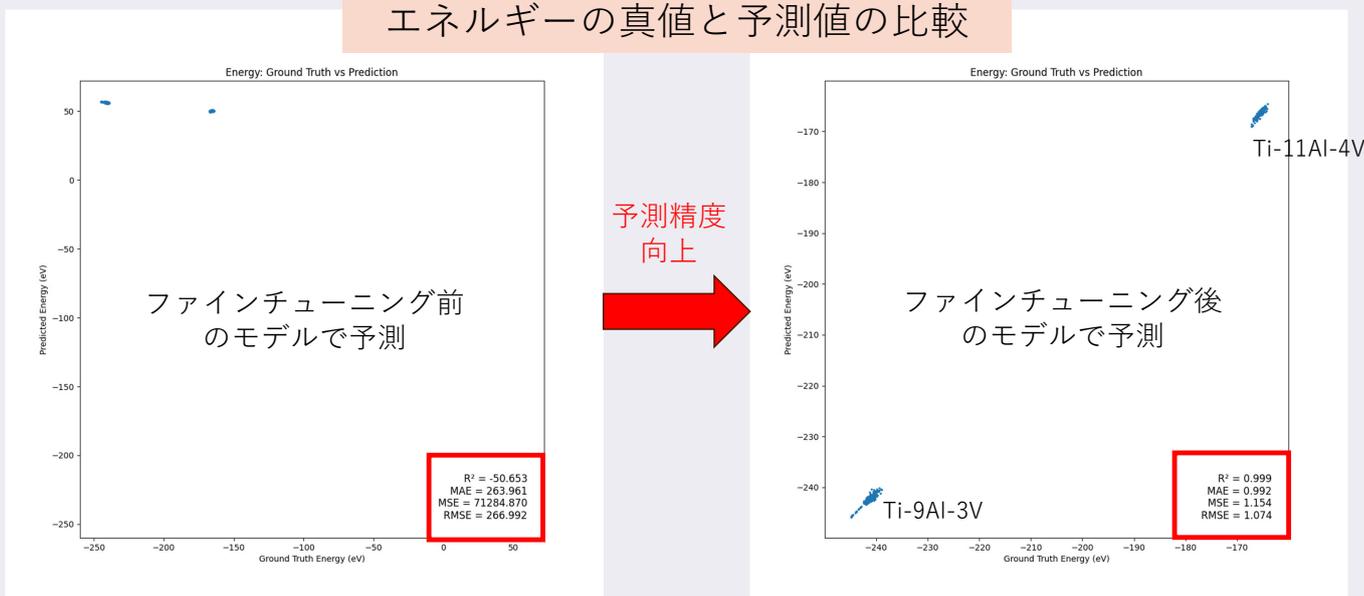
4. ファインチューニング実施結果

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

13

M3GNetでの結果

エネルギーの真値と予測値の比較

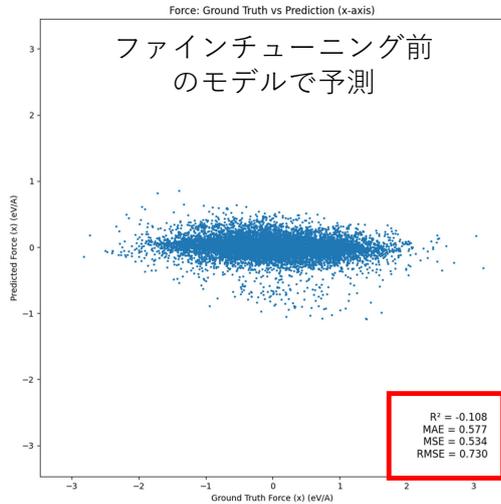


Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

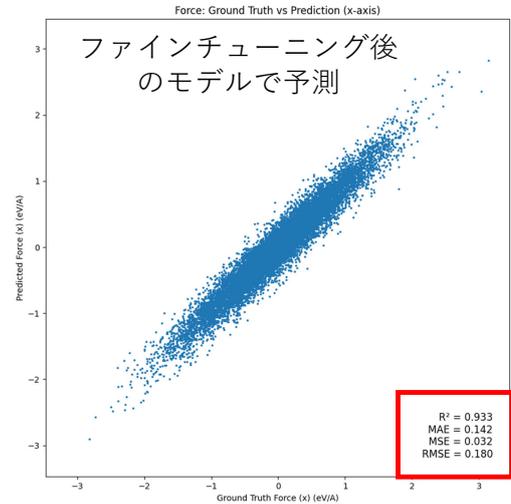
14

M3GNetでの結果

力の真値と予測値の比較



予測精度
向上

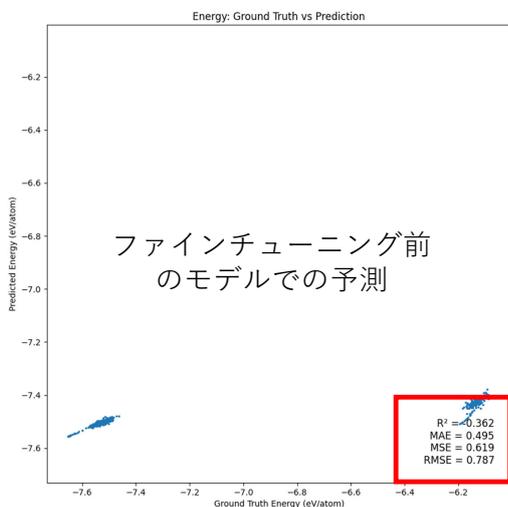


Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

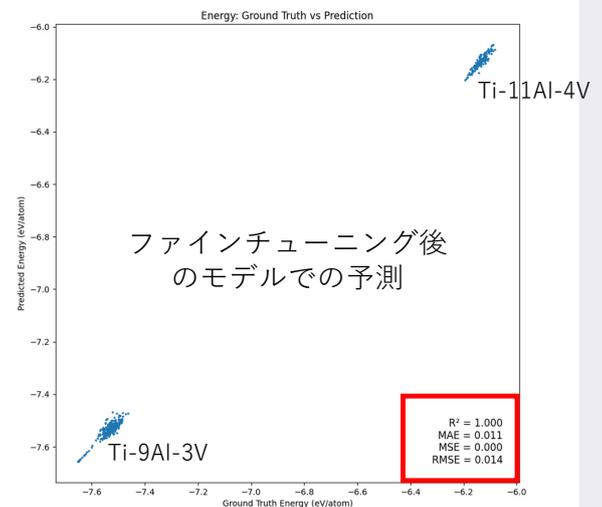
15

CHGNetでの結果

エネルギーの真値と予測値の比較



予測精度
向上

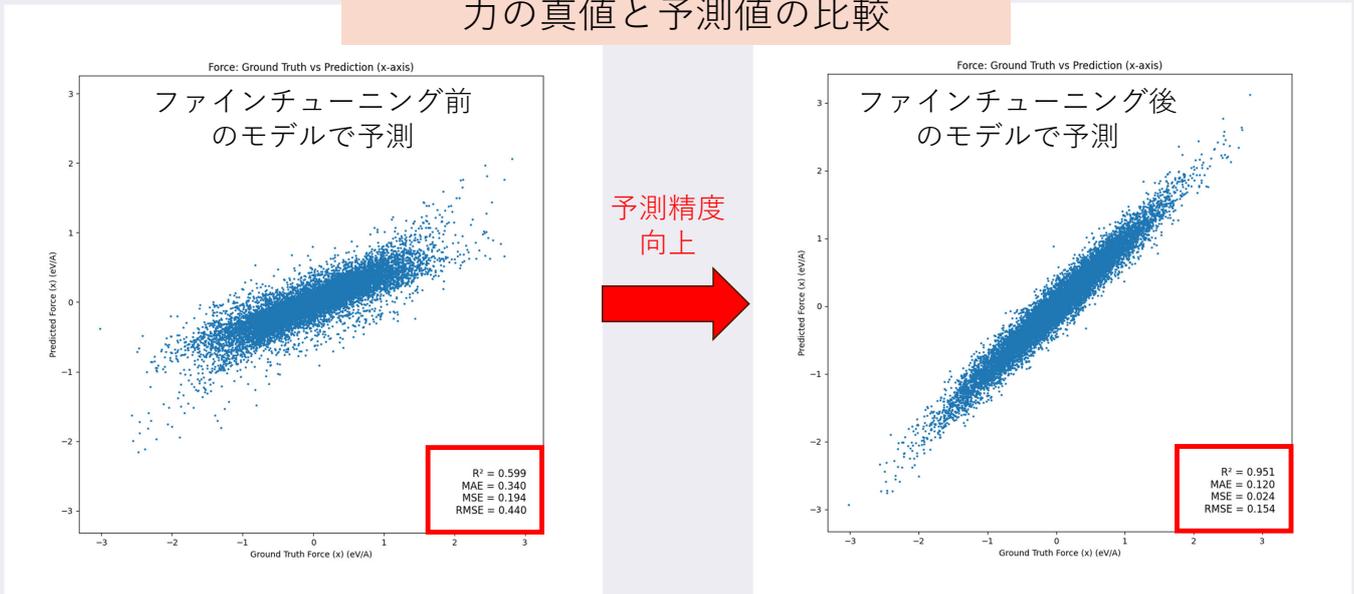


Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

16

CHGNetでの結果

力の真値と予測値の比較



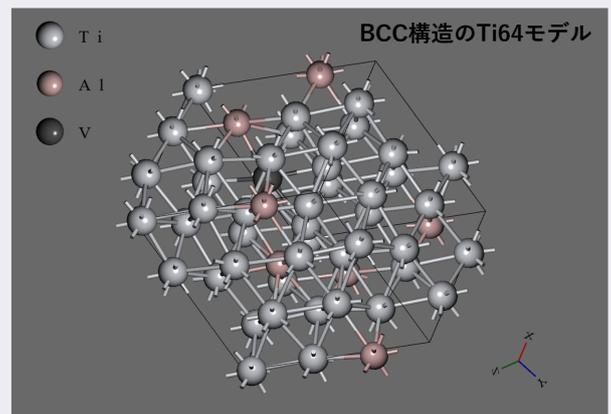
Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

17

体積弾性率の計算

- 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。
- 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。

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



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

18

弊社のフィンチューニングサービスについて

- フィンチューニングサービスを受託解析業務として実施致します。
- 教師データは、お客様にご用意頂く、弊社側で作成する、どちらでも対応致します。
- 作成したフィンチューニング済みモデルは、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。

価格および関連サービス のご紹介



アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD新機能および今後の開発計画のご紹介
[16:15~16:30]

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

価格のご紹介

製品名	年間ライセンス (企業・国研)	買取ライセンス (企業・国研)	年間ライセンス (アカデミック)	買取ライセンス (アカデミック)
Advance/NanoLabo	50万円	150万円	25万円	75万円
Advance/NanoLabo Pro	90万円	270万円	45万円	135万円
Advance/NeuralMD	50万円	150万円	25万円	75万円
Advance/NeuralMD Pro	90万円	270万円	45万円	135万円
Jupyter Interface for NanoLabo	40万円	120万円	20万円	60万円

※価格は全て税抜です。

- 複数ライセンスやサイトライセンスもごさいます。
- NanoLaboとNeuralMDの同時購入割引もごさいます。
- Quantum ESPRESSOとLAMMPSの年間サポートもごさいます。

詳細につきましては、担当営業までお問い合わせください。

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

アドバンスソフトの開発・解析サービス

お客さまのご要望に応じて科学技術計算ソフトウェアの新規開発、機能追加、受託解析等のサービスをおこないます。

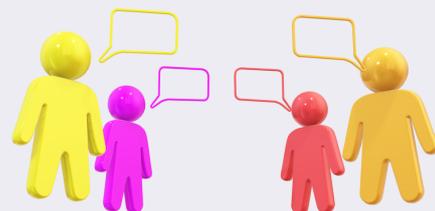


1. 流体・構造・ナノ関連など幅広い分野のソフトウェアを開発し、解析経験がある技術者がお客様のご要望をお伺いいたします。

2. 最適な解析方法をご提案いたします。

3. お客様のご了解が得られましたら、モデリングを行い、解析を実施いたします。

4. 解析結果を可視化し、解析結果の評価や考察を行なって報告書を作成いたします。



Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

ご清聴ありがとうございました。
皆さまのお問い合わせをお待ちしております。

お問い合わせ先： ご担当営業まで
TEL：03-6826-3971 FAX：03-5283-6580
E-mail：office@advancesoft.jp

Copyright 2023 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4



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。