

オンラインセミナー Advance/OF-DFT 紹介セミナー

2025年 6月25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/OF-DFT のご紹介 5
– 深層学習を用いた Orbital-Free DFT の最新手法 –
 3. 価格および関連サービスのご紹介 30
-



アドバンスソフト株式会社のご紹介

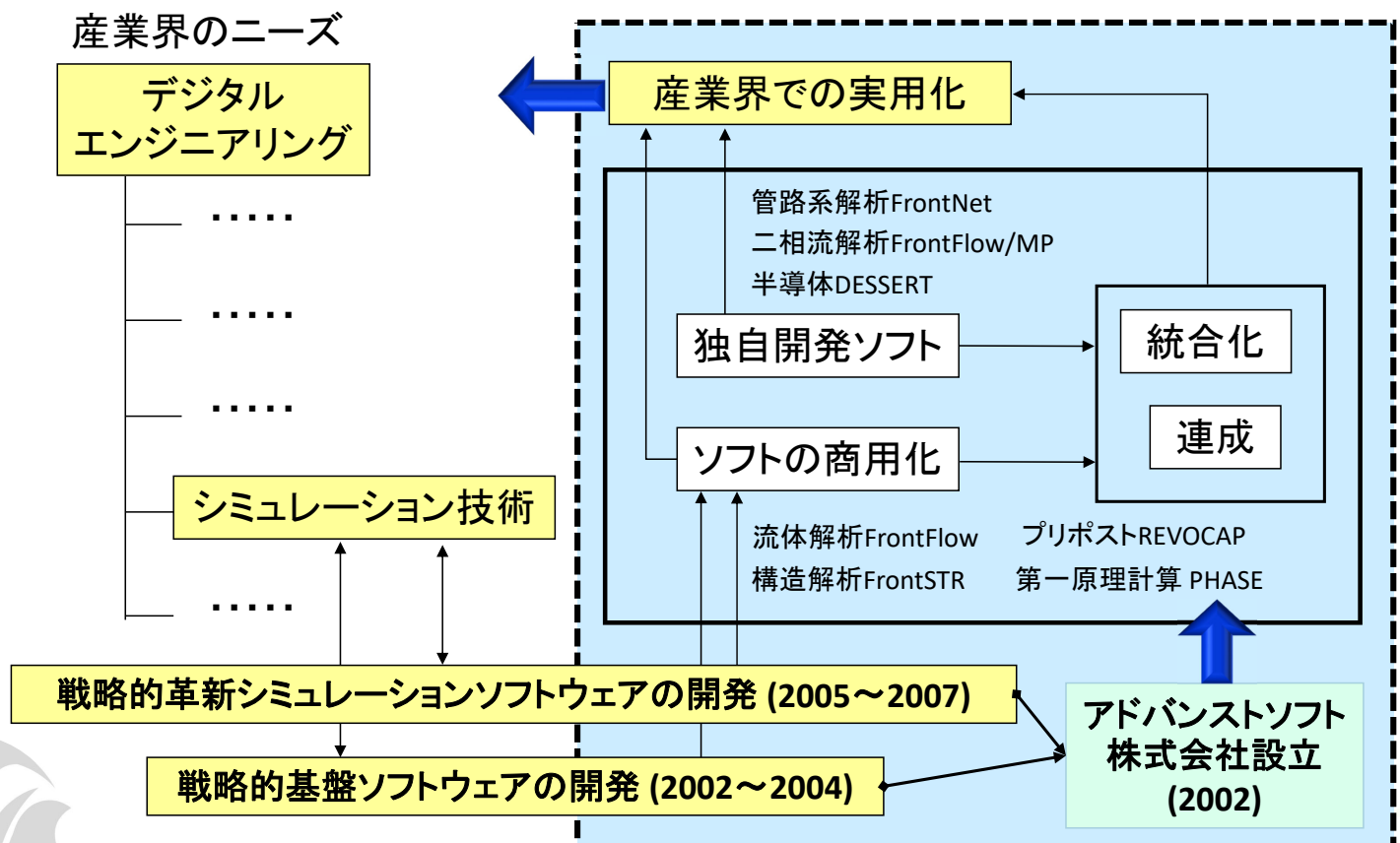
Advance/OF-DFT 紹介セミナー
2025年6月25日（水）
アドバンスソフト株式会社

Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

1



アドバンスソフトとは

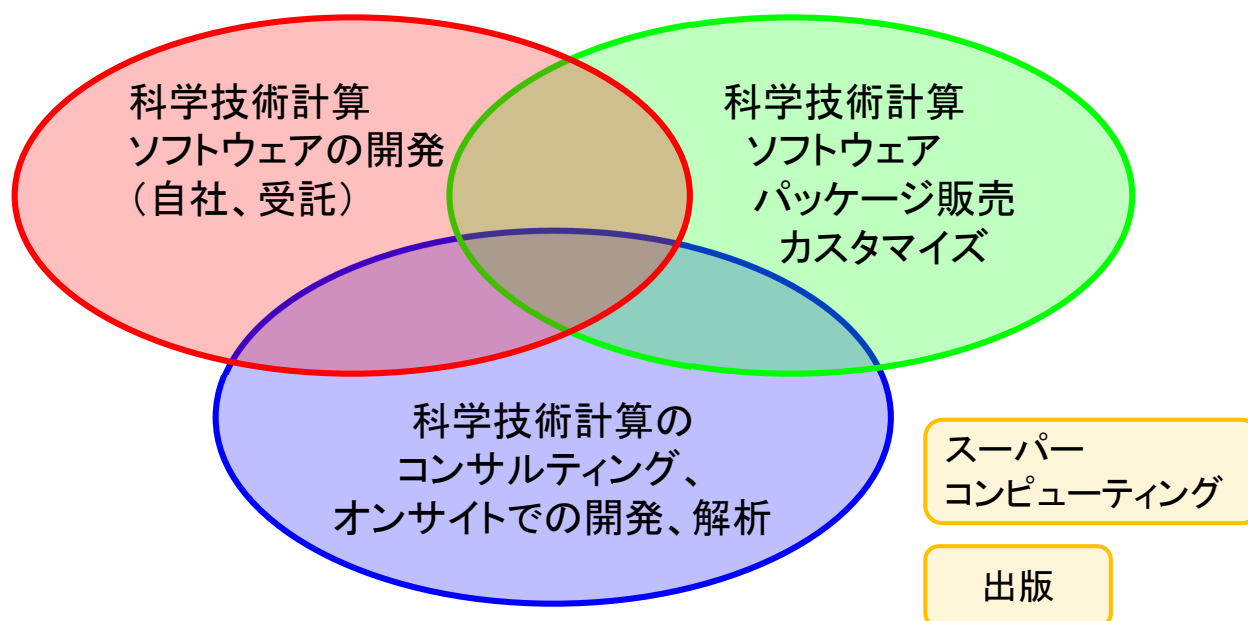


Copyright ©2025 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



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。



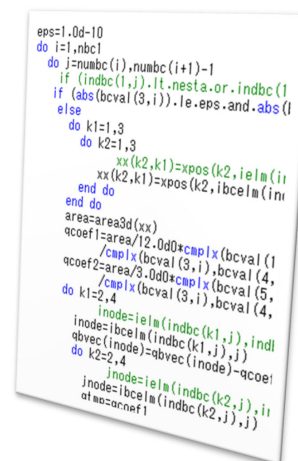
アドバンスソフトの特徴

- ・ シミュレーションソフトウェアの開発力
 - 自社でソースコードを所有し、事業化
 - ニーズに対し自社でカスタマイズが可能
 - 計算原理とその限界を熟知した技術者

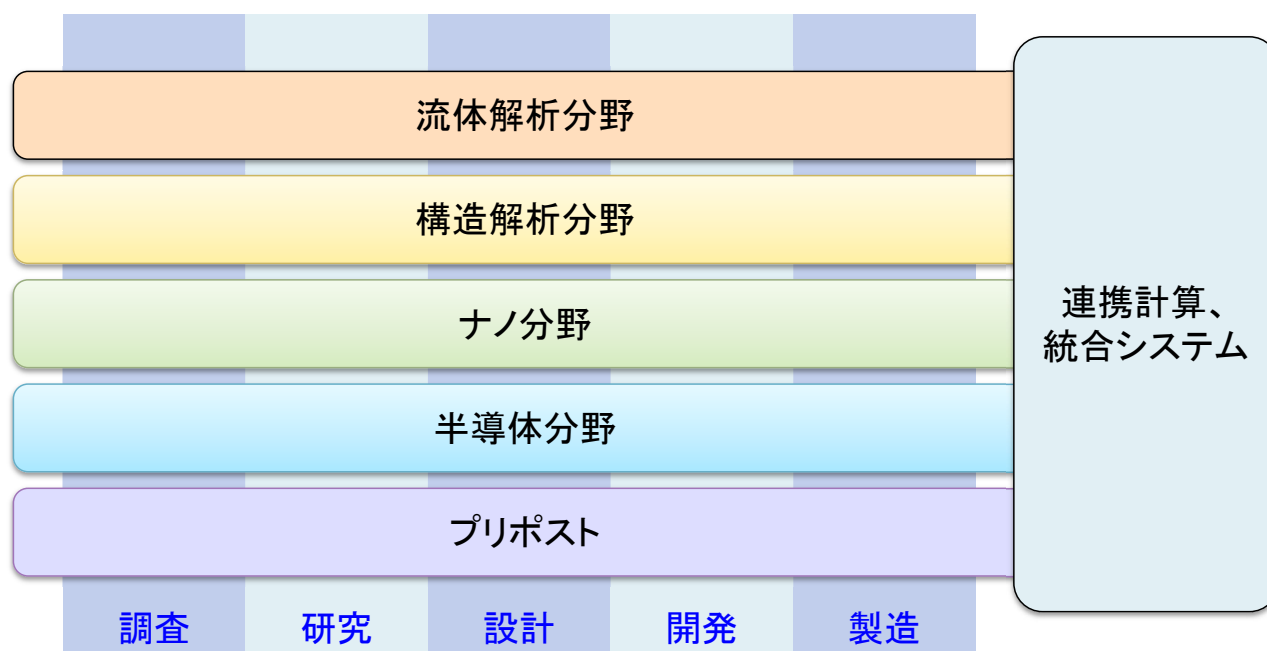


✓ 幅広い分野

- ナノから構造・流体分野の幅広い技術
- 製造業・原子力から材料・半導体産業までの幅広いニーズに対応
- お客様に多種多様な提案が可能



事業分野



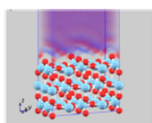
産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

第一原理計算ソフトウェア

Advance/PHASE

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。



ナノ材料

GUI 付属

ナノ材料解析統合 GUI

Advance/NanoLabo

材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。



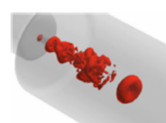
ナノ材料

プリポスト

流体解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/red

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。

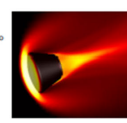


流体

圧縮性流体解析ソルバー

Advance/FOCUS-i

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。

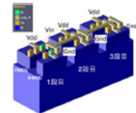


流体

大規模 3 次元 TCAD システム

Advance/TCAD

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。



半導体デバイス

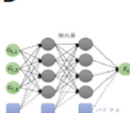
GUI 付属

ニューラルネットワーク

分子動力学システム

Advance/NeuralMD

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。



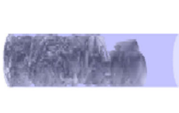
ナノ材料

AI・機械学習

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

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。

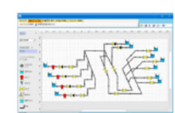


流体

管路系流体過渡解析ソフトウェア

Advance/FrontNet

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。



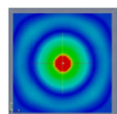
流体

GUI 付属

大規模電磁波解析ソフトウェア

Advance/ParallelWave

マクスウェル方程式を FDTD 法で 3 次元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。

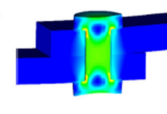


光波・電磁波

構造解析ソフトウェア

Advance/FrontSTR

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。

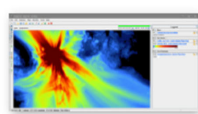


構造

大気拡散影響予測システム

Advance/Emerg

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。



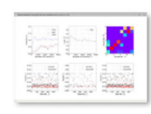
流体

GUI 付属

深層学習用ツール

Advance/iMacle

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、最小限の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。

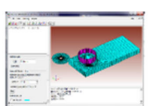


AI・機械学習

汎用プリポストプロセッサ

Advance/REVOCAP

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。

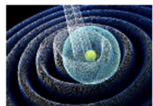


プリポスト

音響解析ソフトウェア

Advance/FrontNoise

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。



音響

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）

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/OF-DFTのご紹介

－ 深層学習を用いたOrbital-Free DFTの最新手法 －

アドバンスソフト株式会社
新製品Advance/OF-DFT紹介セミナー
[14:50～16:15]

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

講演内容

1. 深層学習運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25
2. 機械学習DFTソフトウェア **Advance/OF-DFT**
3. 今後の開発ロードマップ

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

1. 深層学習運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

Density Functional Theory (DFT)

密度汎関数理論 (Density Functional Theory; DFT) の起源

- Hohenberg Kohn DFT (HK-DFT)
 - Phys. Rev. 136 B864 (1964)
 - 基底状態のエネルギー E_0 は電子密度 ρ の汎関数で表現可能である。
 - 電子密度 ρ に対して変分原理が成り立つ：

$$E_0 = \min_{\rho} \{E[\rho]\}$$

- ただし、エネルギー汎関数 $E[\rho]$ の具体的な形は未知である。
- $E[\rho]$ を成分ごとに分離[†] (運動エネルギー、イオンコア-電子、古典クーロン、交換相関)：

$$E[\rho] = T[\rho] + \int d\mathbf{r} v_{\text{ion}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \tilde{E}_{\text{xc}}[\rho]$$

- Thomas Fermiなどの黎明期の運動エネルギー汎関数 $T[\rho]$ では精度が担保できず、実用化に至らず。

[†] 本来のHK-DFTはこのようにエネルギー項を分離できないが、分かり易くするための便宜上の記法。

4

Density Functional Theory (DFT)

密度汎関数理論の改良

- Kohn Sham DFT (KS-DFT)

- Phys. Rev. 140 A1133 (1965)
- HK-DFTで精度の悪い運動エネルギー汎関数を、直接計算することを諦める。
- 相互作用のない参照系の波動関数(KS軌道; ψ_i)を導入して、運動エネルギーの計算を代替する。

$$E[\rho] = -\frac{1}{2} \sum_i \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} v_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{xc}}[\rho]$$

- 電子密度に対する変分法は、波動関数に対する固有値問題へと代わり、旧来のHartree-Fockなどと同様のアルゴリズムが適用できる。
- HK-DFTに比べて大幅な精度向上を実現し、今日に至るまで DFTおよび第一原理計算のデファクトスタンダードとして活用され続けている。
- VASP, Gaussianなどの現代の第一原理計算ソフトウェアの標準機能。
- 波動関数を導入したことで、計算コストが $O(N^3)$ に増大。 N は原子数。

5

Orbital-Free DFT

密度汎関数理論の原点回帰

- Orbital-Free DFT (OF-DFT)

- KS-DFTにおける軌道(波動関数)による運動エネルギーの表現を回避して、オリジナルのHK-DFTの再現を目指す。ただし、KS-DFT同様に相互作用のない参照系で $T_s[\rho]$ を定義。

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int d\mathbf{r} v_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{xc}}[\rho]$$

- KS-DFTの計算コストが $O(N^3)$ であるのに対して、OF-DFTは $O(N)$ で計算できる。
- 大規模系の電子状態計算が容易 → ワークステーション1台で、数千原子系の計算も可能。
- 長年に亘り運動エネルギー汎関数の研究がなされるも、十分な性能の汎関数の開発には至らず。
- 昨今流行りの機械学習を応用した運動エネルギー汎関数が、中国の研究グループを中心に開発されつつある。
- 当社でも独自の深層学習アルゴリズムを適用した運動エネルギー汎関数を開発。

→ **AdvanceSoft25**：運動エネルギー汎関数の大幅な性能改善を実現

6

KS-DFT vs OF-DFT

	KS-DFT	OF-DFT	力場法
電子密度	有り	有り	無し
軌道(波動関数)	有り	無し	無し
運動エネルギー	軌道で明示的に計算	深層学習汎関数 AdvanceSoft25	-
計算精度	高い	汎関数に依存	力場に依存
計算コスト	$O(N^3)$	$O(N)$	$O(N)$
汎用性	全元素に適用可能	擬ポテンシャルの拡充が課題	GNN力場などで汎用性を担保

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

7

OF-DFT vs GNN力場

Graph Neural Network(GNN)力場との比較

	OF-DFT	GNN力場
計算コスト	$O(N)$	$O(N)$
原子電荷	Bader電荷など	不可 or 近似
外部電場	可能	不可 or 近似
電子/ホールドーパ	可能	不可
仕事関数/フェルミ準位	可能 (dE/dN)	不可
交換相関汎関数	SCF時に選択可能 (vdW-DF, rVV10など)	学習時に固定

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

8

運動エネルギー汎関数

Kohn-Sham法（相互作用のない参照系の運動エネルギーの定義）

$$T_s[\rho] \equiv T_{KS}[\rho] = -\frac{1}{2} \sum_i \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_i \int d\mathbf{r} |\nabla \psi_i(\mathbf{r})|^2$$

Thomas Fermiモデル（一様電子ガスの場合にのみ正しい → 局所密度近似LDA）

$$T_{TF}[\rho] = \int d\mathbf{r} \tau_{TF}(\mathbf{r}) = \frac{3}{10(3\pi^2)^{2/3}} \int d\mathbf{r} \rho^{5/3}(\mathbf{r}) \quad \leftarrow T_s[\rho] \text{の近似式の基本形}$$

von Weizsackerモデル（1電子系の場合にのみ正しい）

$$T_{vW}[\rho] = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sqrt{\rho(\mathbf{r})} \nabla^2 \sqrt{\rho(\mathbf{r})} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\nabla \sqrt{\rho(\mathbf{r})}|^2$$

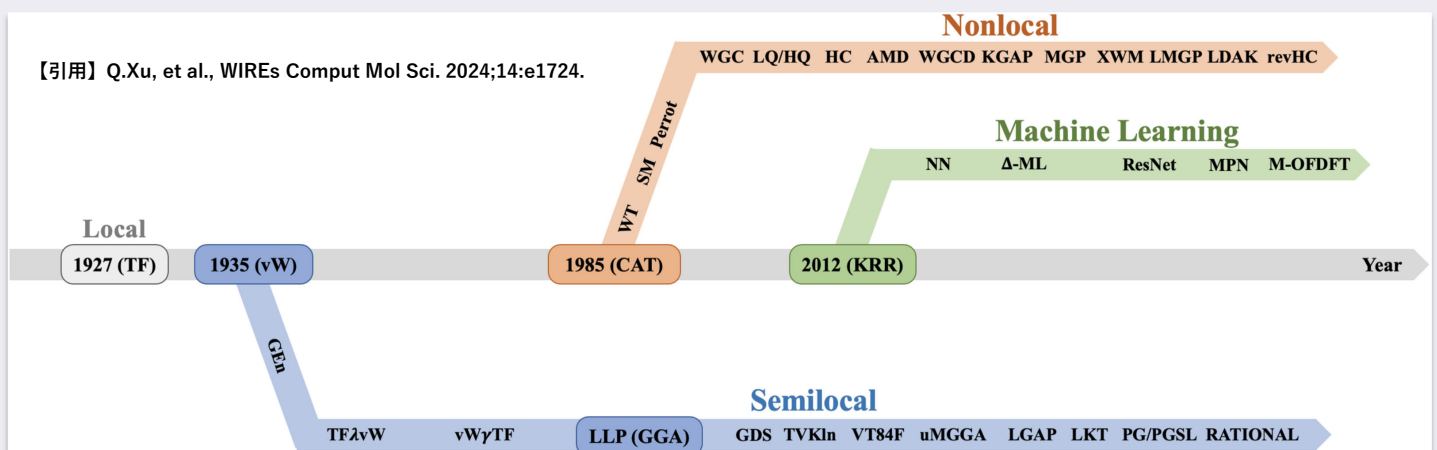
Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

9

運動エネルギー汎関数

- TFモデル、vWモデルを基にして種々の汎関数モデルが開発されている。
- 近年では、GGA近似（準局所：Semilocal）に加えて、非局所近似（Nonlocal）も発展
- 実用レベルの精度が担保された汎関数は未だ開発中である。

【引用】 Q.Xu, et al., WIREs Comput Mol Sci. 2024;14:e1724.



10

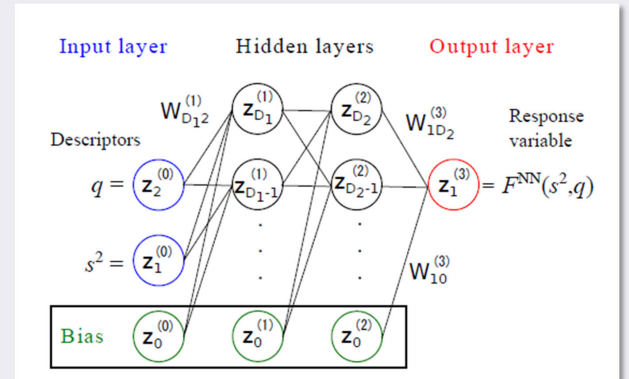
機械学習運動エネルギー汎関数

- 近年発展の著しい機械学習のアルゴリズムを汎関数に応用する試み。
 - 交換相関汎関数 $E_{xc}[\rho]$ に対するDeepMind21などが有名
- 運動エネルギー汎関数については2020年代から研究開発が行われる。

例) F.Imoto, et al., Phys. Rev. Research 3, 033198 (2021)

- TFモデルの運動エネルギー密度 $\tau_{TF}(\mathbf{r})$ に補強因子 $F_{NN}(\mathbf{r})$ を掛けて、運動エネルギー密度を表現。
- $F_{NN}(\mathbf{r})$ を機械学習(Neural Network)で予測する。
- Neural Networkの入力には、規格化された勾配 $s(\mathbf{r})$ およびラプラシアン $q(\mathbf{r})$ を用いる。

$$T_{NN}[\rho] = \int d\mathbf{r} \tau_{TF}(\mathbf{r}) F_{NN}(\mathbf{r})$$



【引用】 Phys. Rev. Research 3, 033198

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

11

機械学習運動エネルギー汎関数

準局所特徴ベクトル

- 座標 $\mathbf{r}$ における特徴ベクトルには勾配 $s(\mathbf{r})$ およびラプラシアン $q(\mathbf{r})$ を用いる。
- 座標 $\mathbf{r}$ のごく近傍の情報しか含まないため、幅広い範囲の材料を同時に学習するのは困難。
- 特定の系に特化した汎関数を作ることは可能。
- 数式が単純であるため、SCF計算は安定する傾向がある。
- 先行事例：F.Imoto, et al., Phys. Rev. Research 3, 033198 (2021)
J.Luder, et al., Electron. Struct. 6 045002 (2024)

$$s(\mathbf{r}) = \frac{|\nabla\rho|}{2(3\pi^2)^{1/3}\rho^{4/3}} \quad q(\mathbf{r}) = \frac{\nabla^2\rho}{4(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}}$$

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

12

機械学習運動エネルギー汎関数

AdvanceSoft

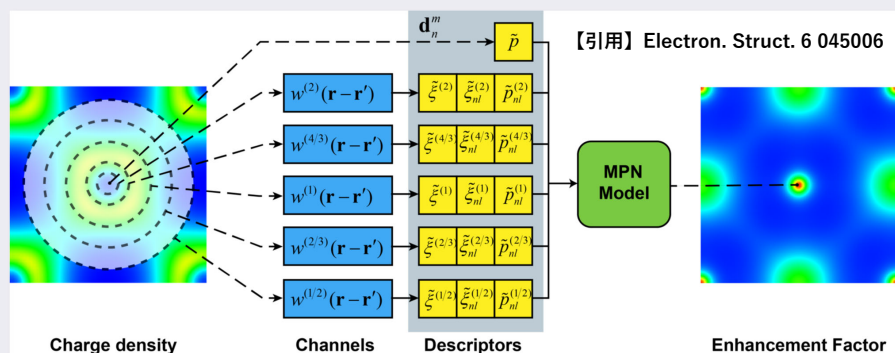
非局所特徴ベクトル

- 勾配 $s(\mathbf{r})$ およびラプラシアン $q(\mathbf{r})$ に、非局所カーネル $w(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ を掛けて積分したものを座標 $\mathbf{r}$ における特長ベクトルに加える。
- 準局所特徴ベクトルの場合よりも精度が改善。
- 汎関数の性能は非局所カーネルの定義に依存するところが大きい。
- 幅広い範囲の材料を同時に学習させるのは、未だ難しい。

先行事例：

L.Sun et al., Phys. Rev. B 109, 115135 (2024)

L.Sun et al., Electron. Struct. 6 045006 (2024)



13

機械学習運動エネルギー汎関数

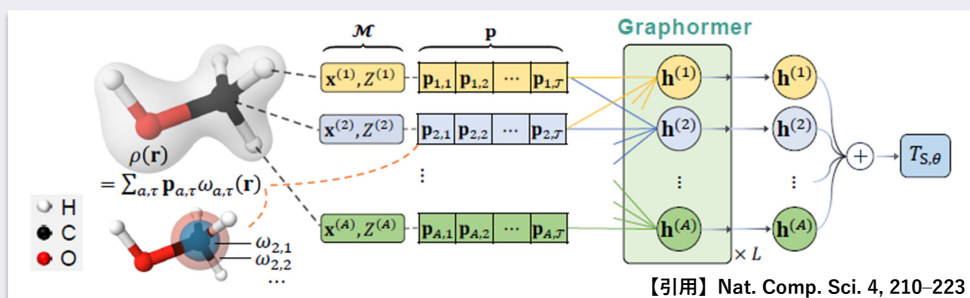
AdvanceSoft

原子座標に依存したモデル (汎関数の定義を外れる)

- 有機分子に特化して、元素種類や原子座標の情報も運動エネルギーに組み込んだモデル。
 - 原子座標の情報を含むため、ポテンシャル地形の精度が向上する。
 - 密度汎関数の定義から外れるため、汎用性が無く、有機分子系以外には適用不可。
- ⇒ 純粋な汎関数モデルではなく、用途も異なるので、我々のモデルとの比較対象外とする。

例) He.Zhang, et al., Nature Computational Science 4, 210–223 (2024)

M-OFDFT



14

機械学習汎関数の改良

- 既報の研究ではいずれも、座標 $\mathbf{r}$ における特徴ベクトルを予め定義して、それらを多層パーセプトロンなどの全結合層に入力する。
- この方法では、十分な精度や汎用性が担保できない。
- 機械学習力場の分野では、グラフ理論を応用して隣接原子間の相互作用を模した学習可能な特徴ベクトルを使用することで上手くいっている。

⇒ GNN力場

- GNN力場のように、学習可能な特徴ベクトルを機械学習汎関数にも応用できないか？

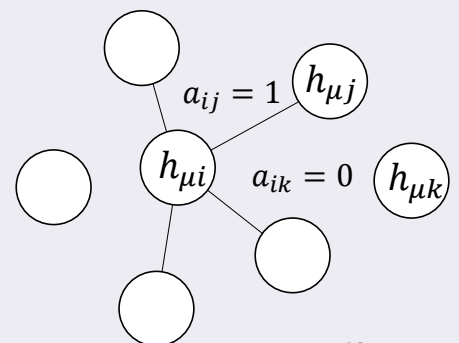
⇒ グラフ(Graph)を連続多変数空間に拡張した汎グラフ(Graphical)を開発

グラフ畳み込みネットワーク(GCN)

- 先ずは、旧来の離散化されたデータに対するグラフ畳み込みネットワーク(Graph Convolutional Network; GCN)を観察。
- ノード i 上の特長ベクトル $h_{\mu i}$ は、隣接行列 a_{ij} でつながれたノード j の特長ベクトル $h_{\mu j}$ の畳み込みでアップデートされる。 $w_{\mu\nu}$ は学習可能な重み。

$$h_{\nu i} \rightarrow \sigma \left(\sum_{j\mu} a_{ij} h_{\mu j} w_{\mu\nu} \right)$$

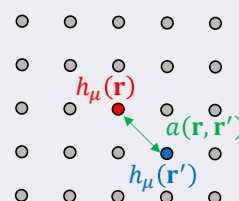
- ノード i や j は離散化されているが、これらを連続多変数の座標 $\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}'$ にできないか？



グラフ畳み込みネットワーク(GCN)

AdvanceSoft

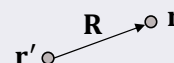
- 仮に空間が有限個のメッシュで離散化されているなら可能だ。
- このとき、隣接行列 $a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は何を意味するか？
- 座標 $\mathbf{r}$ から見た座標 $\mathbf{r}'$ の“存在”を意味するだろう...
- 1D-RISM(溶液論)における分子内相関関数と同じ！
例) H_2O 分子内のO原子から見たH原子の相対座標



$$\omega_{\text{OH}}(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \delta(r - R_{\text{OH}})$$

- 離散化された $a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は0,1の値を取るが、 $\omega_{\text{OH}}(r)$ は連続多変数空間で定義されており、デルタ関数である。
- GCNを連続多変数空間に拡張すれば、 $a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は $\mathbf{R}$ をエッジとしたデルタ関数となる(隣接相関)。

$$a(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R})$$



17

GCNの連続多変数化

AdvanceSoft

- 任意の $\mathbf{R}$ について、 $a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を保持するのは数値計算上は不可。
- デルタ関数を有限の幅を持つガウス関数で置き換えることで、一定の範囲をカバーする隣接相関となる。

$$a(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\kappa)^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}|^2}{2\kappa^2}\right)$$

- 距離が同じなら相関も同じだろうと仮定して、球平均を取る。

$$\begin{aligned} a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) &= \int d\Omega \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\kappa)^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}|^2}{2\kappa^2}\right) \\ &= \frac{1}{2^{5/2}\pi^{3/2}\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|R} \left\{ \exp\left[-\frac{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - R)^2}{2\kappa^2}\right] - \exp\left[-\frac{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + R)^2}{2\kappa^2}\right] \right\} \end{aligned}$$

- $a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ は波数空間にすると0次の球Bessel関数で簡単に計算できる。

$$a(g) = \frac{\sin(gR)}{gR} \exp\left[-\frac{g^2\kappa^2}{2}\right]$$

18

GCNの連続多変数化

- $a(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ はドーナツ状の重み関数。半径は R 、幅は κ である。
- 種々の $\{R_i, \kappa_i\}$ 対を用意しておくことで、空間全体をカバーする。GCNの連続多変数化に加えて、Multi-Channel化を行ったことになる。
- ただし、 $\{R_i, \kappa_i\}$ 対の数は有限なので、適当なカットオフ関数 f_i を $a_i(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ に乗じて打ち切る。
- 最終的に、連続多変数化 & Multi-Channel化されたGCNモデル：

$$x_{\mu i}^{(n)}(\mathbf{r}) = f_i \int d\mathbf{r}' a_i(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{\mu}^{(n)}(\mathbf{r}')$$

$$h_v^{(n+1)}(\mathbf{r}) = h_v^{(n)}(\mathbf{r}) + \sigma \left(\sum_{\mu i} w_{v, \mu i}^{(n)} x_{\mu i}^{(n)}(\mathbf{r}) \right)$$

※残差接続も実装して、学習の効率化と推論(SCF)の安定化を図る。

19

汎グラフ (Graphical)

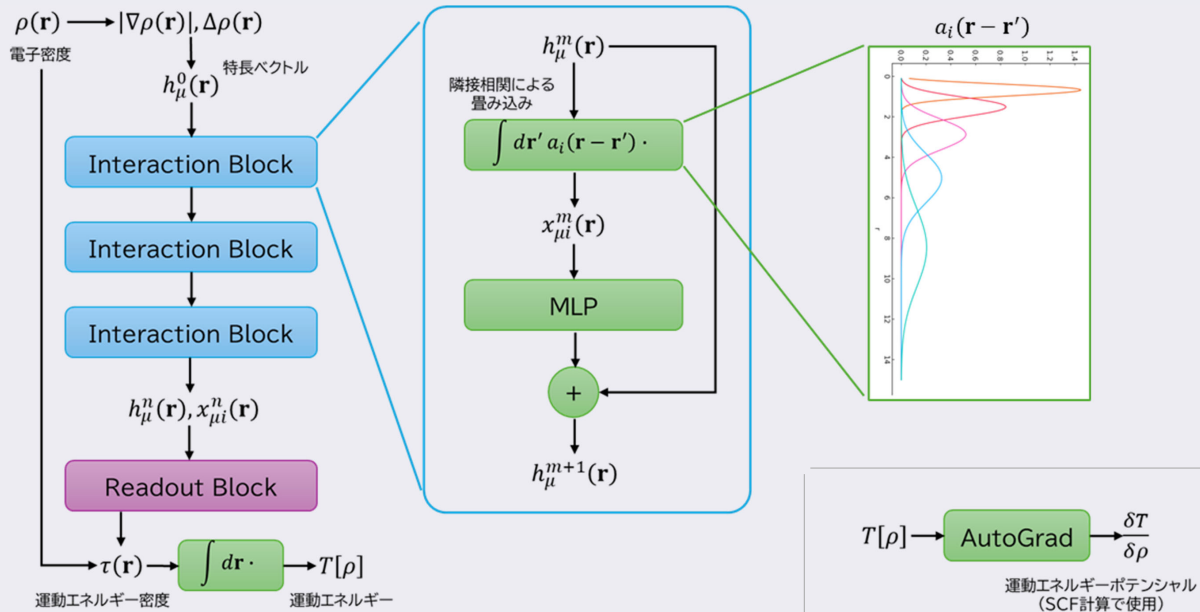
- この連続多変数化されたグラフのことを、**汎グラフ (Graphical)**と呼称する。
 - 関数 (Function) → 汎関数 (Functional)、グラフ (Graph) → 汎グラフ (Graphical)
 - 場のデータはメッシュなどで離散化する必要が無い(メッシュ無依存)。
 - 学習時と推論時で、メッシュや離散化の手続が異なっても良い(Transferability高)。
- グラフ と 汎グラフ のアナロジー

グラフ	汎グラフ
離散的データ	連続的データ
ノード	場
エッジ	積分カーネル
グラフ畳み込み(総和)	畳み込み積分

- 汎グラフの発明により、連続的な場の関数に対してもGNNのような深層学習が適用可能になった。
- GNN力場のように学習可能な特長ベクトル(場)を何回か相互作用させた後に、適当な出力層に入れて目的とする物理量を取り出せばよい。

20

汎グラフのアーキテクチャ



21

AdvanceSoft25 汎関数モデル

汎グラフを使って運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25 を定義

- 汎グラフに入力する特長ベクトル
勾配、ラプラシアン、勾配とラプラシアンの積（ベクトル長：3）

$$h_1^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{|\nabla\rho(\mathbf{r})|^2}{4(3\pi^2)^{2/3}\rho^{8/3}(\mathbf{r})} \quad h_2^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{\nabla^2\rho(\mathbf{r})}{4(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}(\mathbf{r})} \quad h_3^{(0)}(\mathbf{r}) = h_1^{(0)}(\mathbf{r}) h_2^{(0)}(\mathbf{r})$$

- 汎グラフからの出力
TFモデルおよびvWモデルに対する補強因子を出力（ベクトル長：2）

$$T_{\text{AS25}}[\rho] = \int d\mathbf{r} \{ \tau^{\text{TF}}(\mathbf{r}) F_{\text{TF}}^{\text{NN}}[\rho](\mathbf{r}) + \tau^{\text{vW}}(\mathbf{r}) F_{\text{vW}}^{\text{NN}}[\rho](\mathbf{r}) \}$$

※汎グラフに対する入力および出力は、いずれも適切な活性化関数で値の範囲を制限している。

AdvanceSoft25 汎関数の学習

AdvanceSoft

- Quantum ESPRESSOにて計算された運動エネルギーおよび運動エネルギーの汎関数微分(下式)を教師データに使用

$$\frac{\delta T_{KS}}{\delta \rho} = \frac{1}{\rho} \sum_i n_i \left[-\frac{1}{2} \psi_i^* \nabla^2 \psi_i + (\varepsilon_F - \varepsilon_i) \psi_i^* \psi_i \right]$$

- バンドギャップがあると $\delta T_{KS}/\delta \rho$ が不連続になるため、Smearing幅を大きめに設定($\sim 0.05 R_y$)。
- 波動関数のカットオフエネルギーは、 $80 R_y$ 。
- k点サンプリングは、 $0.05 \text{ \AA}^{-1}$ 幅。

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

23

AdvanceSoft25 汎関数の学習

AdvanceSoft

- Materials Project から取得した約3,000個の結晶構造 および 約1,000個のスラブ構造、27種の孤立した中性原子を用いて、データ作成。

	教師データ	テストデータ
KS-DFT計算数	3,612	400
最大メッシュ数	746,496	729,000
総メッシュ数	1,010,137,759	111,516,835

- 学習後の誤差 (比較のために準局所/非局所特徴ベクトルのモデルを併記)

	TのMAE(教師データ, テストデータ)	$\delta T/\delta \rho$ のMAE(教師データ, テストデータ)
AdvanceSoft25	1.9%, 1.5%	6.9%, 7.1%
NonLocal25	2.7%, 2.4%	11.3%, 11.6%
SemiLocal25	4.1%, 3.8%	33.2%, 34.5%

24

Advance/OF-DFT

- AdvanceSoft25運動エネルギー汎関数を運用するためのソフトウェア。
- Python / PyTorch にて実装。
- OpenMP並列 / CUDAに対応。MPI並列には非対応。
- ソフトウェアの構成：
 1. DeepKin → AdvanceSoft25などの機械学習汎関数を扱うモジュール
 2. DFTpy → OF-DFTを計算するためのオープンソースの第3者コード
 3. AOFDFTCalculator → ASEのCalculatorを継承したモジュール
- ユーザーはASEのCalculatorとしてOF-DFTを利用できる。

DFTpy

- Pythonで実装されたオープンソース(MITライセンス)のOF-DFTコード。開発元はRutgers University-Newark。
- ドキュメント：<https://dftpy.rutgers.edu/>
- ソースコード：<https://gitlab.com/pavanello-research-group/dftpy>
- TF, vWや各種GGAモデルだけでなく、HC, revHCなどの最新の非局所運動エネルギー汎関数にも対応。
- 平面波基底、および、擬ポテンシャルを使った実装。
- 数万原子系でも $O(N)$ で計算できる実績有。
- DFTpyに改修を施して、当社の開発したAdvanceSoft25汎関数の推論を搭載。

DFTpy (SCFアルゴリズム改修)

AdvanceSoft

- 一般に、非局所な演算を含む運動エネルギー汎関数を用いたOF-DFTでは、SCF計算(電子密度の最適化)が安定しない(JCTC, 16, 5685-5694(2020))。
- 電子密度を更新する際、高周波成分にノイズが入ることが原因。
- KS-DFTにおけるDavidsonやRMM-DIISのように、Preconditioning演算子 K を $\varphi(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})}$ に作用させることで安定化する。

$$\varphi_{n+1}(\mathbf{g}) = \varphi_n(\mathbf{g}) + K(\mathbf{g})\delta\varphi(\mathbf{g})$$

- 既存のDFTpyコードに、当社にてPreconditioning演算子 K を追加実装した。

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

29

DFTpy (SCFアルゴリズム改修)

AdvanceSoft

1. Gaussian Preconditioner

$$K(\mathbf{g}) = \exp\left[-\frac{g^2\sigma^2}{2}\right]$$

2. Lorentz Preconditioner

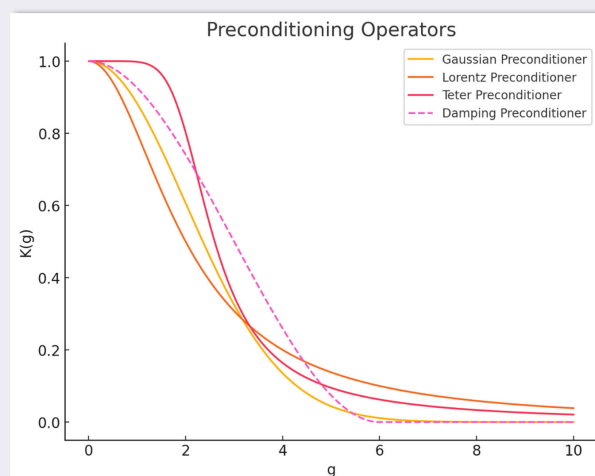
$$K(\mathbf{g}) = \frac{g_0^2}{g_0^2 + g^2}$$

3. Teter Preconditioner (VASPのRMM-DIISなど)

$$K(\mathbf{g}) = \frac{27 + 18x + 12x^2 + 8x^3}{27 + 18x + 12x^2 + 8x^3 + 16x^4}, x = \frac{g^2}{g_0^2}$$

4. Damping Preconditioner (TD-DFT/ESM-RISMなど)

$$K(\mathbf{g}) = 1 - 3\left(\frac{g}{g_{\max}}\right)^2 + 2\left(\frac{g}{g_{\max}}\right)^3$$



ベンチマーク計算の結果、Damping Precond.が最も安定性が高いことを確認。

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

30

ASEインターフェース

- ASE (Atomic Simulation Environment) : <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
- PythonでDFTやMDを行う時の標準的なインターフェース
- DFTやMD計算を行う時に使うモジュール“Calculator”を
DFTpy + AdvanceSoft25 用の実装 ⇒ AOFDFTCalculator
- ユーザーは、AOFDFTCalculatorを呼び出してOF-DFT計算を行う。
- AOFDFTCalculatorの使い方は、ASEに準拠。
⇒ ASE および 周辺ツールがそのまま利用できる。

テストデータでのベンチマーク

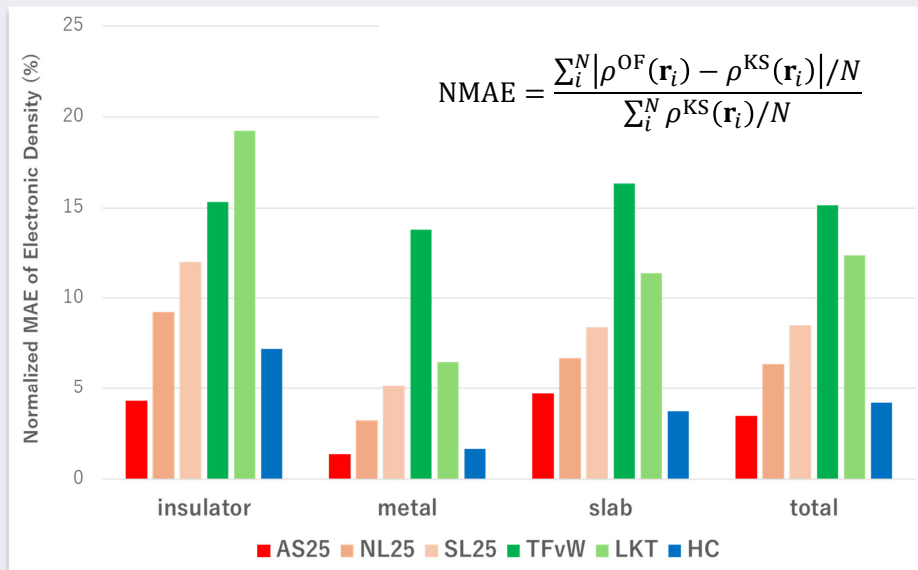
- 絶縁体結晶、金属結晶およびスラブ系を含むテストデータ(400構造)に対してベンチマーク計算を実施した。
- OEPP局所擬ポテンシャルが適用可能な27元素種を含む系に限る。
- KS-DFTおよびOF-DFTのSCF計算を実行して、電子密度およびエネルギーの誤差を評価した。
- 交換相関汎関数は、すべてLDAを使用
- OF-DFTにおける運動エネルギー汎関数：

#	運動エネルギー汎関数	概要
1	AdvanceSoft25	汎グラフによる深層学習モデル
2	NonLocal25	非局所特徴ベクトルによる機械学習モデル
3	SemiLocal25	準局所特徴ベクトルによる機械学習モデル
4	TFvW	TFモデルとvWモデルの足し合わせ (vWの係数 $\lambda=1/5$)
5	LKT	準局所近似(GGA)に基づく汎関数 (機械学習ではない)
6	HC	非局所近似に基づく汎関数 (機械学習ではない; 現行最も高精度とされる)

電子密度のNMAE

AdvanceSoft

SCF計算収束後の電子密度のNormalized Mean Absolute Error (NMAE) を計算



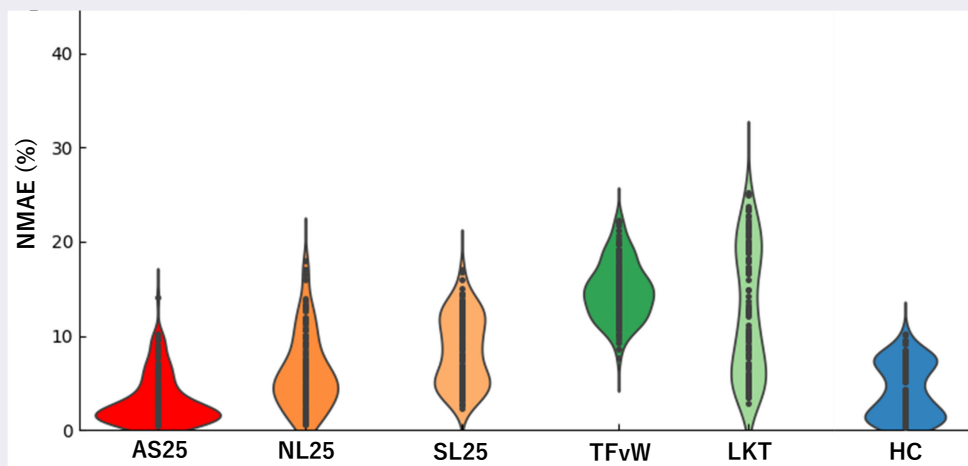
- 電子密度の誤差は平均して3-4%
- HCモデルよりも高精度

33

電子密度のNMAE

AdvanceSoft

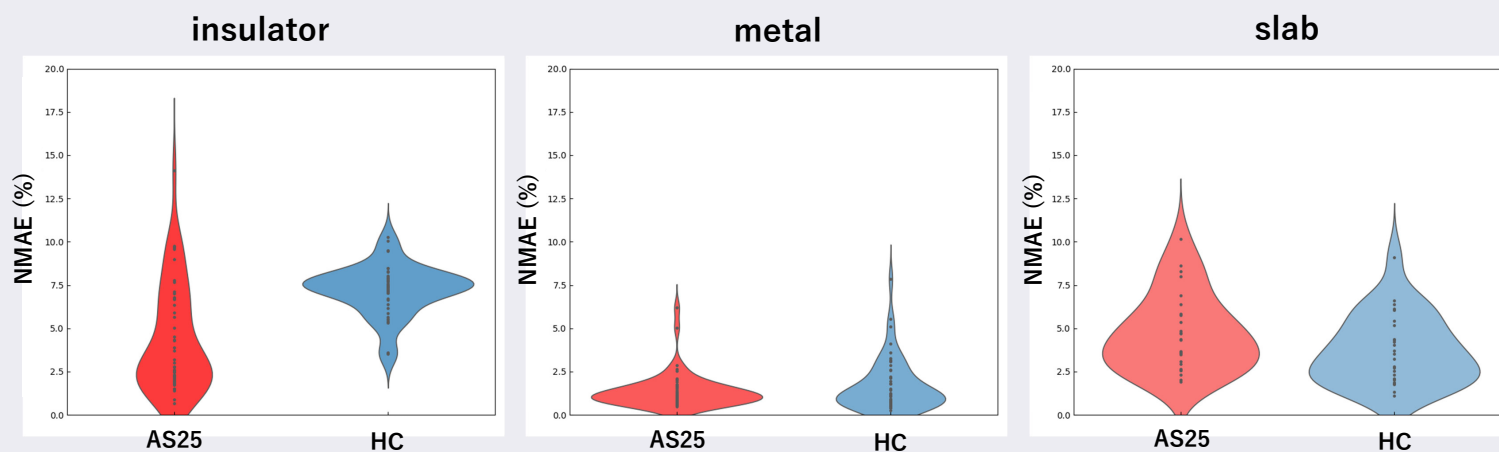
Violinプロットによる比較



34

電子密度のNMAE

AdvanceSoft

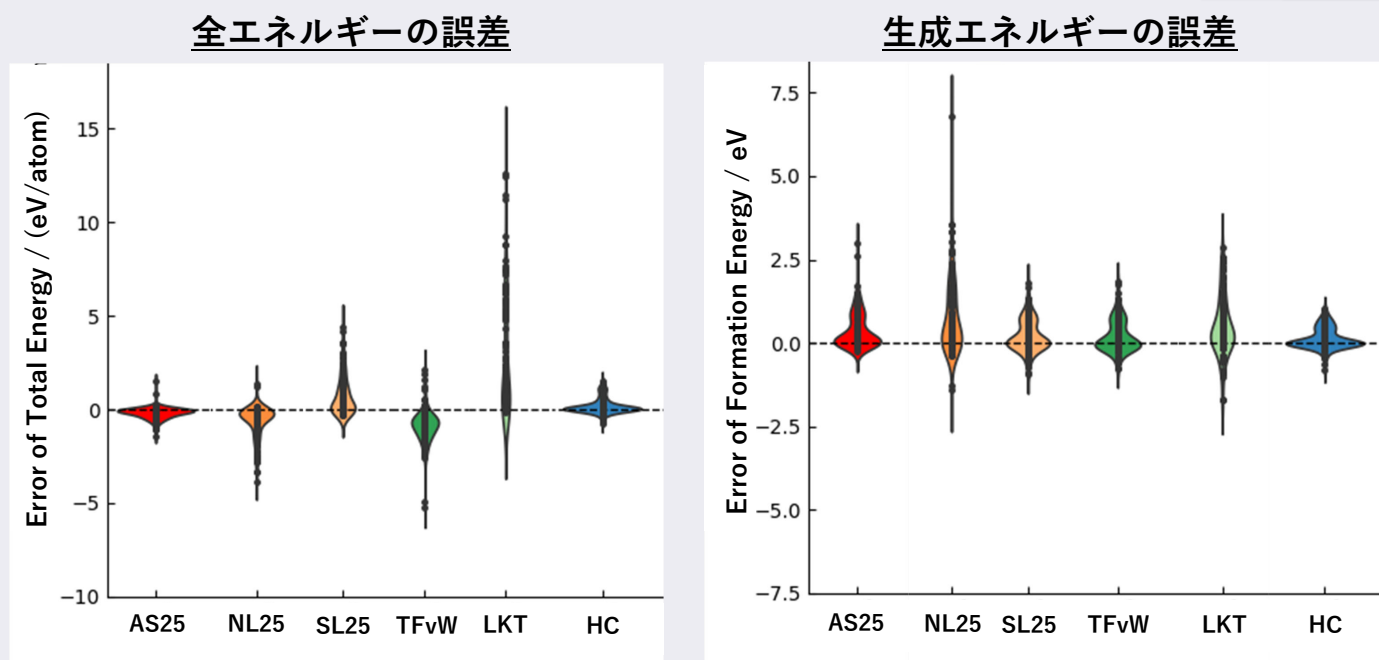


Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

35

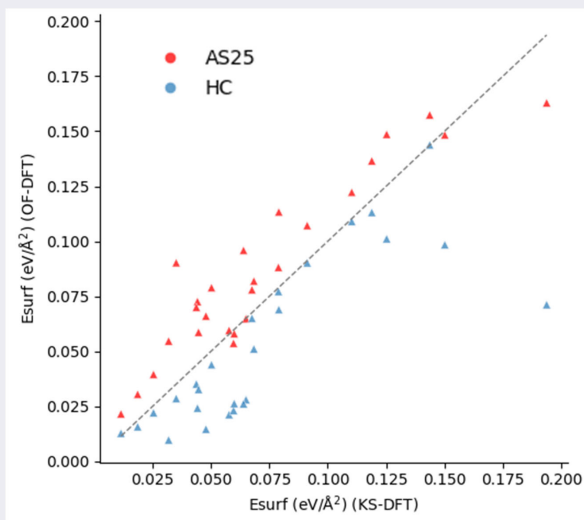
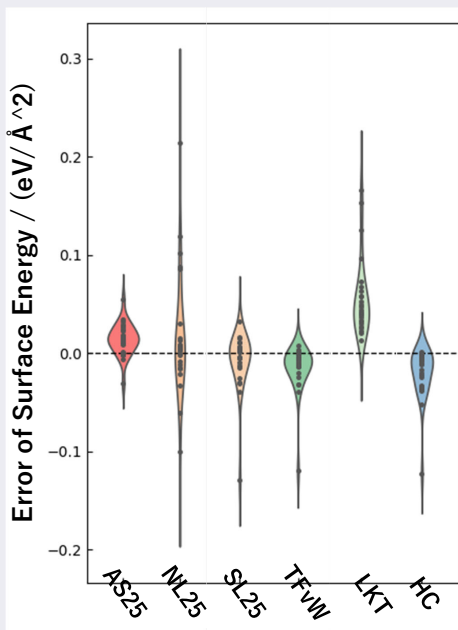
エネルギーの誤差 (KS-DFTからの差異)

AdvanceSoft



36

表面エネルギーの誤差



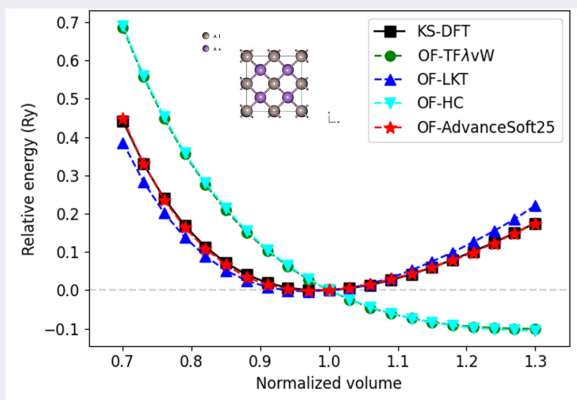
表面エネルギーについても比較的に良好な再現度

37

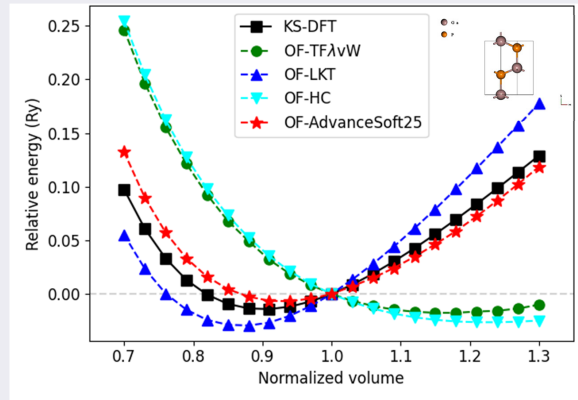
ポテンシャル曲線

- 半導体材料のポテンシャル曲線(エネルギー vs 体積)を計算。
- 電子密度などでは良好な結果を示したHCは、ポテンシャル地形の精度は非常に悪い。
- AdvanceSoft25は、ポテンシャル地形においても良好な再現度。

AlAs結晶



GaP結晶

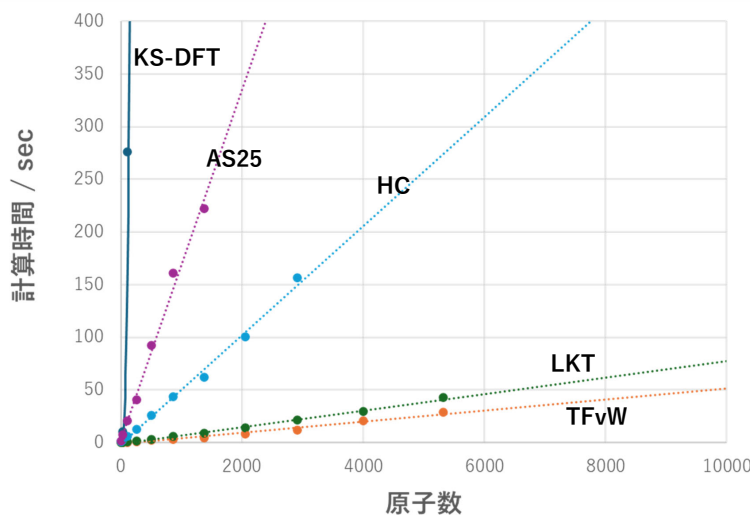


38

計算時間

AdvanceSoft

- アルミニウム結晶のスーパーセルのサイズを変化させつつ、SCF計算完了までの計算時間を計測
- CPUx1デバイスでの計算時間
- 標準的なワークステーションで1,000原子系のOF-DFT/AS25の計算が可能



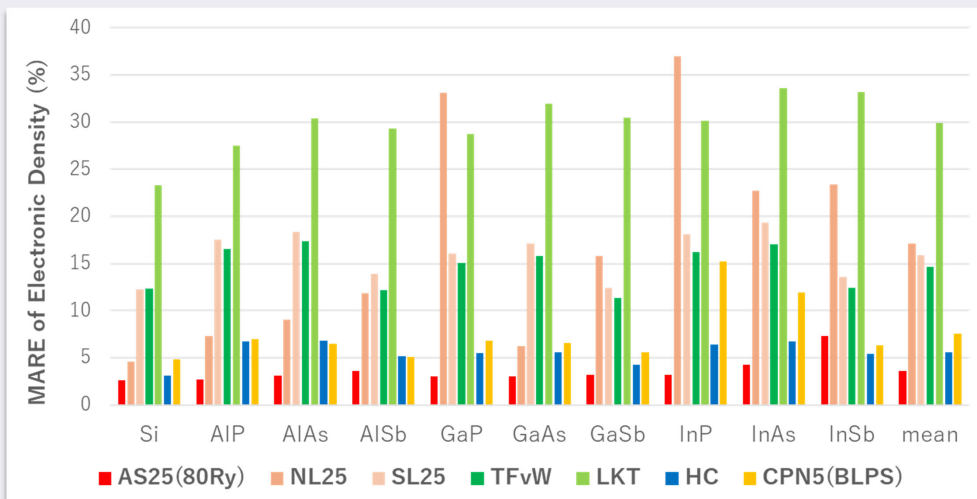
Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

39

Chen-2024 機械学習汎関数との比較

AdvanceSoft

- L.Sun and M.Chen, Electron. Struct. 6 045006 (2024) にて報告されている非局所特徴ベクトルを用いた機械学習運動エネルギー汎関数CPN5との比較を行った。
 - 10種類の半導体結晶のSCF計算を行い電子密度のMAREを評価。
 - CPN5は10種の半導体結晶に対して学習を行っているにも関わらず、幅広いデータ(3,612構造)で学習させたAS25の方が誤差が小さい。
- ⇒ 運動エネルギーに汎グラフを適用することの有用性が示唆



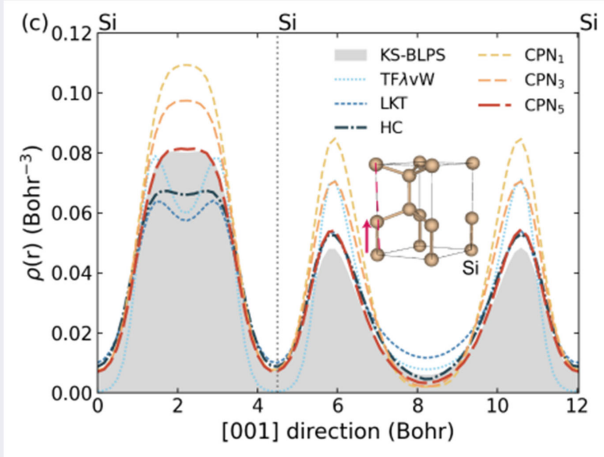
40

Chen-2024 機械学習汎関数との比較

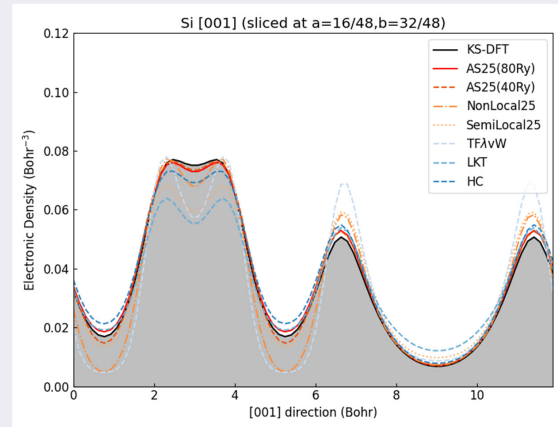
AdvanceSoft

• 電子密度の比較 (Si)

Chen-2024 (BLPS)



AdvanceSoft25 (OEPP)



Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

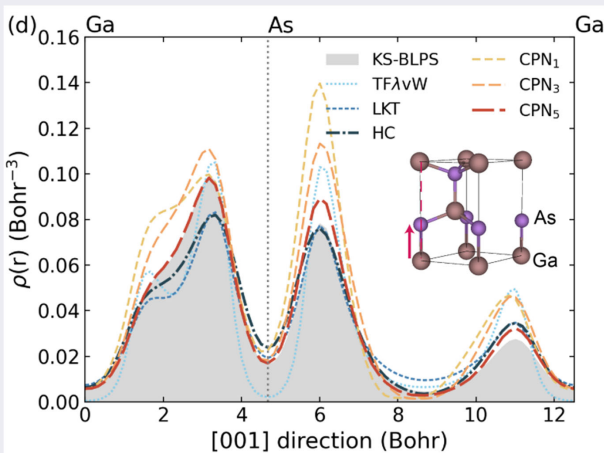
41

Chen-2024 機械学習汎関数との比較

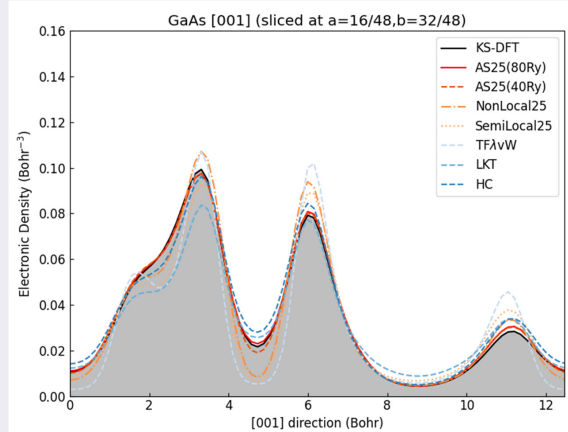
AdvanceSoft

• 電子密度の比較 (GaAs)

Chen-2024 (BLPS)



AdvanceSoft25 (OEPP)

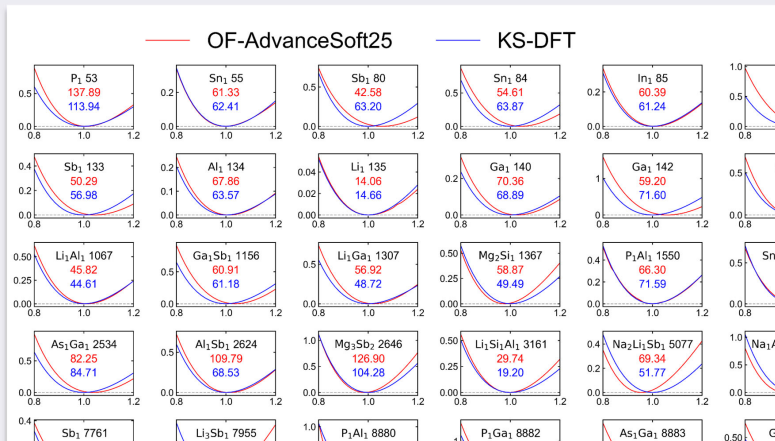


Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

42

Manzhos-2025-benchmark

- S.Manzhos, et al., arXiv:2502.05411v2 にて実施されているエネルギー vs 体積のポテンシャル曲線のベンチマークを追計算。
- 計算対象は軽金属の単体および化合物 (約400構造の結晶)。
- ポテンシャル曲線から体積弾性率を計算。



体積弾性率のMAE

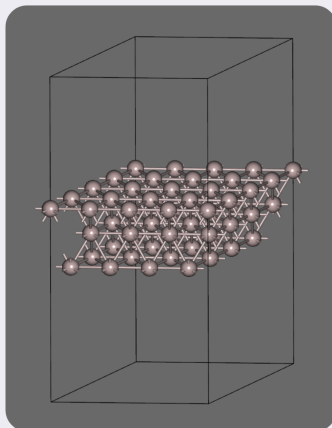
**3.05 GPa
(8.26 %)**

43

仕事関数

- アルミニウム結晶の(111)表面モデルを作成して仕事関数を計算

$$\text{Work Function} = E_{\text{vacuum}} - \frac{dE}{dN}$$



計算条件

Ecut = 40Ry

スラブ厚 = 3原子

真空層 = 20 Å

仕事関数 / eV

KS-DFT 4.00

AS25 4.24

TFvW 3.45

LKT 5.51

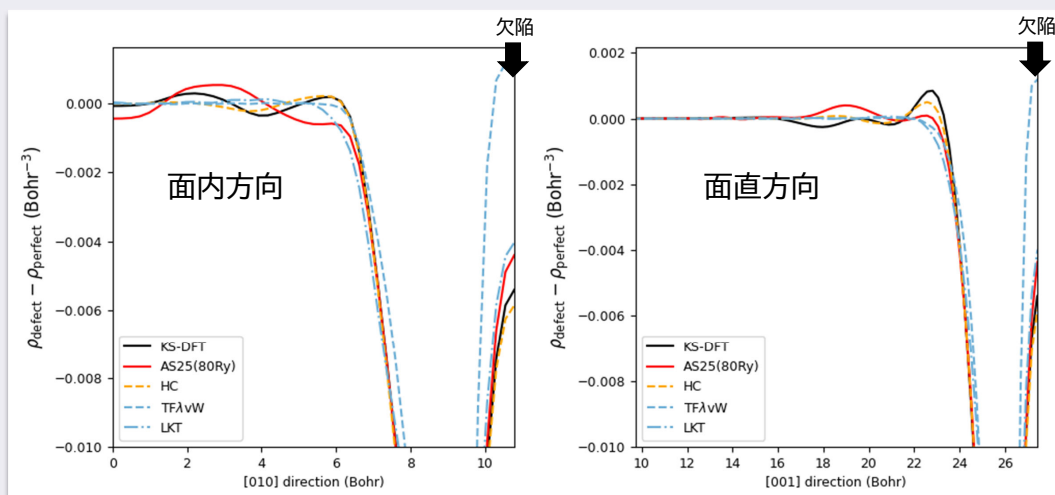
HC 3.84

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

44

フリーデル振動

- アルミニウム結晶の(111)表面モデルに、点欠陥を導入する。
- 点欠陥の有無で電子密度の差分を取り、周囲の電子密度の振動を確認



3. 今後の開発ロードマップ

開発ロードマップ

～2025年9月、**Advance/OF-DFT v1.0**をリリース予定

- ✓ AdvanceSoft25汎関数を用いたSCF計算、構造最適化計算
- ✓ 擬ポテンシャルは、局所擬ポテンシャルのみ対応

～2026年3月、**Advance/OF-DFT v1.1**をリリース予定

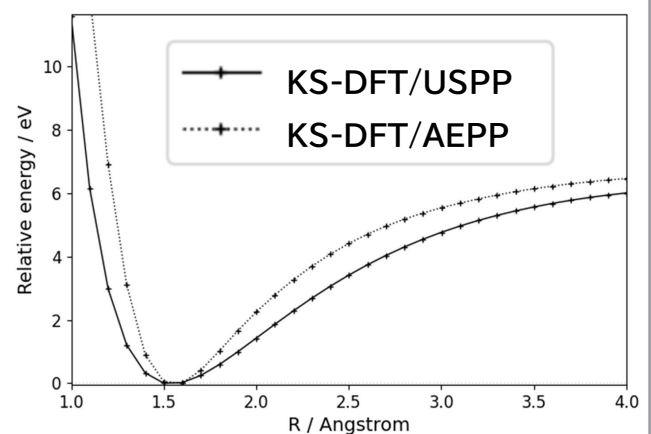
- ✓ 運動エネルギー汎関数を改良 → AdvanceSoft26
- ✓ KS-DFT用のUSPPを基にした、有効擬ポテンシャルの実装

可変擬ポテンシャル

- 現在のOF-DFTでは局所擬ポテンシャルしか使えないため、主な応用先が半導体や金属の結晶および表面に限定される。
- KS-DFT用のウルトラソフト擬ポテンシャルなどを、局所擬ポテンシャルに焼き直した有効ポテンシャルを作成して、全元素への対応を試みる。
- 機械学習(MACE+Graph2Mat)を応用して、原子座標に応じて可変な擬ポテンシャルを開発中

Adaptive Effective Pseudo-Potential (AEPP)

エタン分子のC-C結合のポテンシャル曲線



不変汎グラフ → 等変汎グラフ

- AdvanceSoft25汎関数で使した汎グラフは、隣接相関(積分カーネル)が球対称(s対称)である。
- 場 and/or 積分カーネルをs対称だけでなく、p対称やd対称にも対応させる。 ⇒ 等変汎グラフ (Equivariant Graphical)

$$a_{i,lm}(\mathbf{g}) = \sqrt{4\pi} Y_{lm}(\mathbf{g}) j_l(gR_i) \exp\left[-\frac{g^2 \kappa_i^2}{2}\right]$$

- Equivariant GNN力場と同様に精度改善が期待できるかも...

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
新製品Advance/OF-DFT紹介セミナー
[16:15~16:30]

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

Advance/OF-DFTのサービス内容



- 2025年9月に**Advance/OF-DFT v1.0**をリリース予定
 - Pythonのソースコードおよび その使用権を提供します。
 - ユーザーのマシン環境に合わせて、実行環境を構築します。
 - ユーザー数およびジョブ数は無制限。クラウドでの利用も可能。
 - 利用料金は、ユーザーの利用環境に応じて要相談。
- **v1.0**の正式リリースまで
 - お客様の要望に応じた内容にて、弊社にてベンチマーク or 解析を実施。
 - 有償にて β 版をご提供 など。

Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

Advance/NanoLaboシリーズ



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ざいます。
- NanoLaboとNeuralMDの同時購入割引もございます。
- Quantum ESPRESSOとLAMMPSの年間サポートもございます。

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 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

パッケージソフトウェアの解析事例



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。
- 本日ご紹介した新機能のM3GNetを使用した解析事例もご用意しております。

産業分野別

自動車・運輸
材料・化学
産業機械
航空宇宙
エレクトロニクス
建設土木
原子力
エネルギー
環境・防災

解析分野別

流体
爆発・燃焼
構造
振動音響
ナノ・バイオ
ブリポスト
半導体デバイス
光・電磁波



Copyright 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

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。

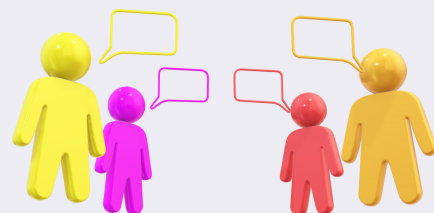


1. 流体・構造・ナノ関連など幅広い分野のソフトウェアを開発し、解析経験がある技術者がお客様のご要望をお伺いいたします。

2. 最適な解析方法をご提案いたします。

3. お客さま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 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5



アドバンスソフトは、高度な技術力、開発力、人材を武器に、最先端理論を応用した解析シミュレーションソフトウェアを開発・販売しています。受託解析、受託開発、パッケージソフトウェア、コンサルティング等多様なソリューションを通じて、お客様の問題解決に即戦力として貢献します。

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 2025 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6



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てる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。