

* a tool for NanoLabo *

Advance / NeuralIMD

Developed by AdvanceSoft Corp. (2020-2021)

<http://www.advancesoft.jp>

Advance / NeuralMD

Neural Network Potential に基づいた分子動力学計算のソフトウェアです。Quantum ESPRESSO^{※1}にて出力された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。この力場を利用して、LAMMPS^{※2}にて分子動力学計算を実行します。

特徴

- 第一原理計算よりも高速、かつ、既存の分子動力学計算よりも高精度
- 未知の材料、未知の添加元素 など、既存の力場が無い系も取り扱い可能
- 研究者の勘や経験に依存しない、システムティックなシミュレーションを実現

Theory

Neural Network Potential では、系の全エネルギー E_{tot} を各原子のエネルギーの和として表現します：

$$E_{tot} = \sum_{i \in \{\text{all atoms}\}} E_i$$

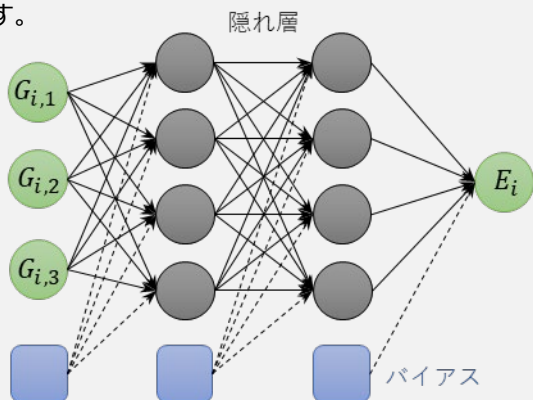
各原子のエネルギー E_i は、ニューラルネットワークで計算されます：

$$E_i = E_{NN}(G_{i,1}, G_{i,2}, G_{i,3}, \dots)$$

ニューラルネットワークへの入力データは対称関数 G_i と呼ばれるもので、本製品では重み付き Behler 関数および Chebyshev 多項式が利用可能です^{※3,4}。

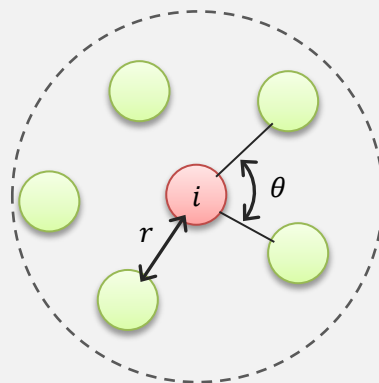
ニューラルネットワーク

最終層におけるバイアスおよびパーセプトロンにて、それぞれ、標準原子エネルギーと化学シフトを表現します。



対称関数

注目している原子(i)の近傍にある、他の原子の幾何構造を表現したものの。結合距離(r)や結合角(θ)などの情報を含みます。



Single Atom Neural Network Potential

密度汎関数理論の計算において、各原子のエネルギーを直接的に算出するアルゴリズム(SANNP)^{※5}が利用可能です。同時に、各原子の Hirshfeld 電荷が出力できるため、長距離クーロン相互作用の取り扱いも可能となっています。

Δ - Neural Network Potential

全エネルギーを 2 体古典力場と Neural Network Potential の和で表現します。少ない教師データでも口バスタな力場が作成可能で、ニューラルネットワーク学習時の収束性も向上します。

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

※2 LAMMPS は、GPL ライセンスにて配布されている分子動力学計算のオープンソースソフトウェア。(https://lammps.sandia.gov)

※3 “wACSF—Weighted atom-centered symmetry functions as descriptors in machine learning potential”, M.Gastegger, et al., JCP 148 (2018) 241709

※4 “Efficient and accurate machine-learning interpolation of atomic energies in compositions with many species”, N.Artrith, et al., Phys. Rev. B 96 (2017) 014112

※5 “Density functional theory based neural network force fields from energy decompositions”, Y. Huang, et al., Phys. Rev. B 99 (2019) 064103

How-to-use

1. サンプル構造の作成

力場作成のためのサンプル構造を、Advance/NanoLabo などを利用して ユーザーが作成します。
複数個のサンプル構造を同時に使用して、一つの力場を作成することが可能です。

2. ランダム構造の生成

サンプル構造を基にして、原子座標をランダムに変位させた多数の構造を自動的に生成します。
また、生成された全構造について、第一原理計算を一括して実行するスクリプトも同時に出力します。

3. Quantum ESPRESSO による第一原理計算

生成されたスクリプトを実行して、第一原理計算を実施します。
計算には当社にて改修を施した Quantum ESPRESSO を使用して、原子毎のエネルギーを出力します。

4. ニューラルネットワークの学習（最適化）

Quantum ESPRESSO にて計算された原子毎のエネルギーを教師データとして、
ニューラルネットワークを最適化します。最適化計算には、当社の提供するツールを使用します。
計算完了後、LAMMPS にて利用可能な力場ファイルとして ニューラルネットワークの情報を出力します。

5. LAMMPS による分子動力学計算

作成した力場ファイルを用いて、分子動力学計算を実施します。
計算には、当社にて Neural Network Potential の機能を追加した LAMMPS を使用します。

メトロポリス法による強化学習

作成した Neural Network Potential を使用して、メトロポリス法によるモンテカルロ計算が実施できます。
生成された構造のうち、未知の構造のみを抽出して教師データに追加することができます。これにより、効率的に強化学習を適用して、より精度の高い力場を作成します。詳細はオンラインマニュアルをご参照下さい：

<https://neuralmd-doc.readthedocs.io/ja/latest/theory.html>

Licensing

ライセンス形態

OS	ライセンス形態
Windows	ノードロック (リモートデスクトップ利用可)
Linux	フローティング

ライセンス価格

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 ^{※1}	25 万円 ^{※1}	150 万円 ^{※1}	75 万円 ^{※1}

※1 Advance/NanoLabo と同時にご購入いただくと、定価から 2 割引きとなります。

トライアルライセンス

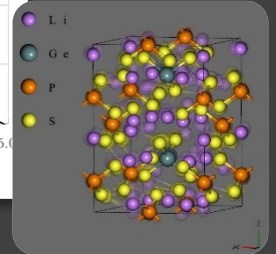
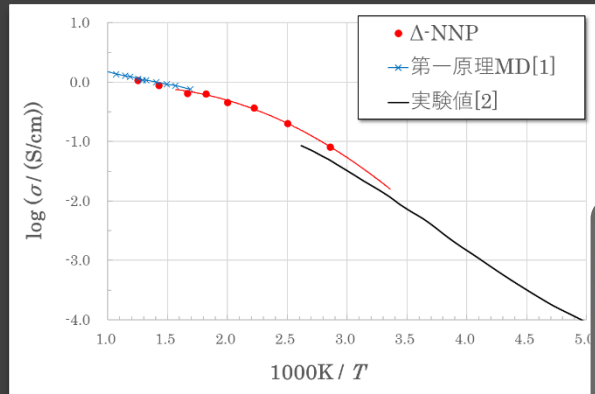
お一人様につき 1 ヶ月間、トライアルライセンスを無償でご利用になれます。

Cases

Δ-NNP による Li イオン伝導率計算

Li イオン伝導体である $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ に Δ-NNP を適用して、イオン伝導率(σ)を計算しています。第一原理 MD ではモデルサイズを大きくできず、イオンが激しく運動する高温領域でしかシミュレーションできません。一方、Neural Network Potential を使用すると、常温でもシミュレーション可能で、イオン伝導率の実験値をよく再現しています。

$\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ のイオン伝導率



※1 A.Marcolongo, et al., <https://arxiv.org/abs/1910.10090>

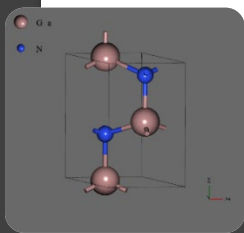
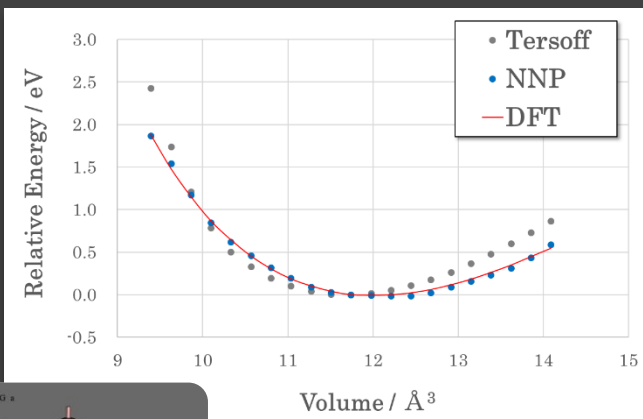
※2 菅野了次, Electrochemistry, 85(9), 591-596 (2017)

既存の分子力場よりも高精度

Neural Network Potential を GaN 結晶に適用し、計算結果を Tersoff 力場^{※3}と比較しています。教師データには、300K~6000K の古典分子動力学計算にて生成した 500 個の構造を使用しています。ポテンシャルエネルギーおよび原子に働く力について、DFT 計算の結果をよく再現しており、Tersoff などの既存の力場よりも高精度であることが確認できます。

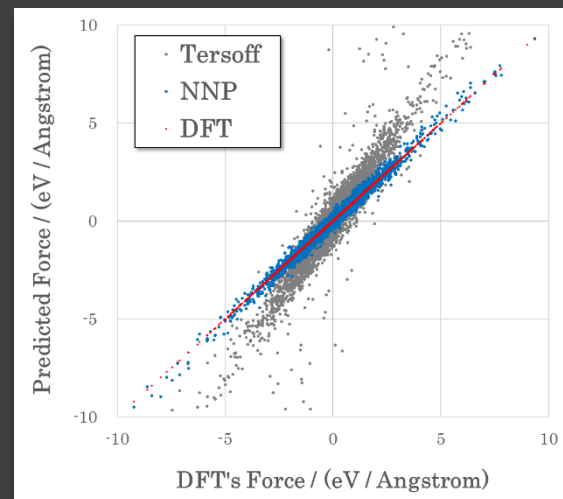
※3 多体系分子力場 https://lammps.sandia.gov/doc/pair_tersoff.html

ポテンシャルエネルギー vs 体積 ^{※4}



※4 NNP の教師データには、種々の格子定数を有する GaN 結晶を用いています。

原子に働く力の検証



RMSE(Tersoff): 1.05 eV/Å, RSME(NNP): 0.19 eV/Å

アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。デモンストレーションも可能です。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地

新お茶の水ビルディング 17 階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580

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

E-mail: office@advancesoft.jp

