

Neural Network 力場の実用化

(アドバンスソフト株式会社¹) ○西原 慧径¹

Implementation of Neural Network Potential (¹AdvanceSoft Corp.) ○Satomichi Nishihara¹

We introduce our software product and some examples of Neural Network Potential, which interests researchers as an alternative method of first principles calculation or classical molecular force field. Also, we explain the advantage of this method and the limit of its performance.

Keywords : Neural Network Potential, Molecular Dynamics, First Principles, Density Functional Theory

第一原理計算や既存の古典分子力場法に代わる新しいシミュレーション手法として注目されている Neural Network 力場について、当社での取り組みや適用事例について紹介します。具体的には、古典力場との併用により効率的な力場生成を可能とする Δ -NNP 法¹、自己学習ハイブリッドモンテカルロ法²を利用した Neural Network 力場の自動生成方法などの当社ソフトウェア製品に実装されたアルゴリズムを紹介しつつ、これらをリチウムイオン伝導体やイオン液体などの材料に適用した事例を示します。その他に、M3GNet³などの汎用 Graph Neural Network 力場を活用した簡単な事例についても紹介します。また、現在 Neural Network 力場のアルゴリズムは発展途上にあり、様々な手法が考案されています。各々の手法の特徴や優位性および適用限界についても、既存の第一原理計算や分子力場法などと比較しつつ解説します。

[1] <http://case.advancesoft.jp/NeuralMD/LGPS-conductivity/index.html>

[2] Y.Nagai et al., Phys. Rev. B, 2020, 102, 041124

[3] <https://github.com/materialsvirtuallab/m3gnet>