

新製品 Advance/OF-DFT に関するお知らせ

深層学習 Orbital Free-DFT を開発

密度汎関数理論(DFT)における標準的な解法として、長年にわたりKohn Sham-DFT(KS-DFT)が使われてきました。KS-DFTは高精度に多くの物理現象を再現することに成功したものの、計算コストが高く大規模系のシミュレーションが困難であるという問題を含んでいます。軌道(波動関数)を使った表現がKS-DFTの計算コストの原因であり、軌道を使わずに電子密度を直接最適化するOrbital Free-DFT(OF-DFT)はより低い計算コストで極めて高速なシミュレーションを実現します。しかしながら、OF-DFTにおいては実用に耐え得る精度の運動エネルギー汎関数が未知であるという問題があります。アドバンスソフト株式会社では、独自に開発した場の深層化アルゴリズムを適用することで、この問題を解決しました。深層学習された運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25 を搭載した新製品 Advance/OF-DFT を用いたサービスを提供いたします。

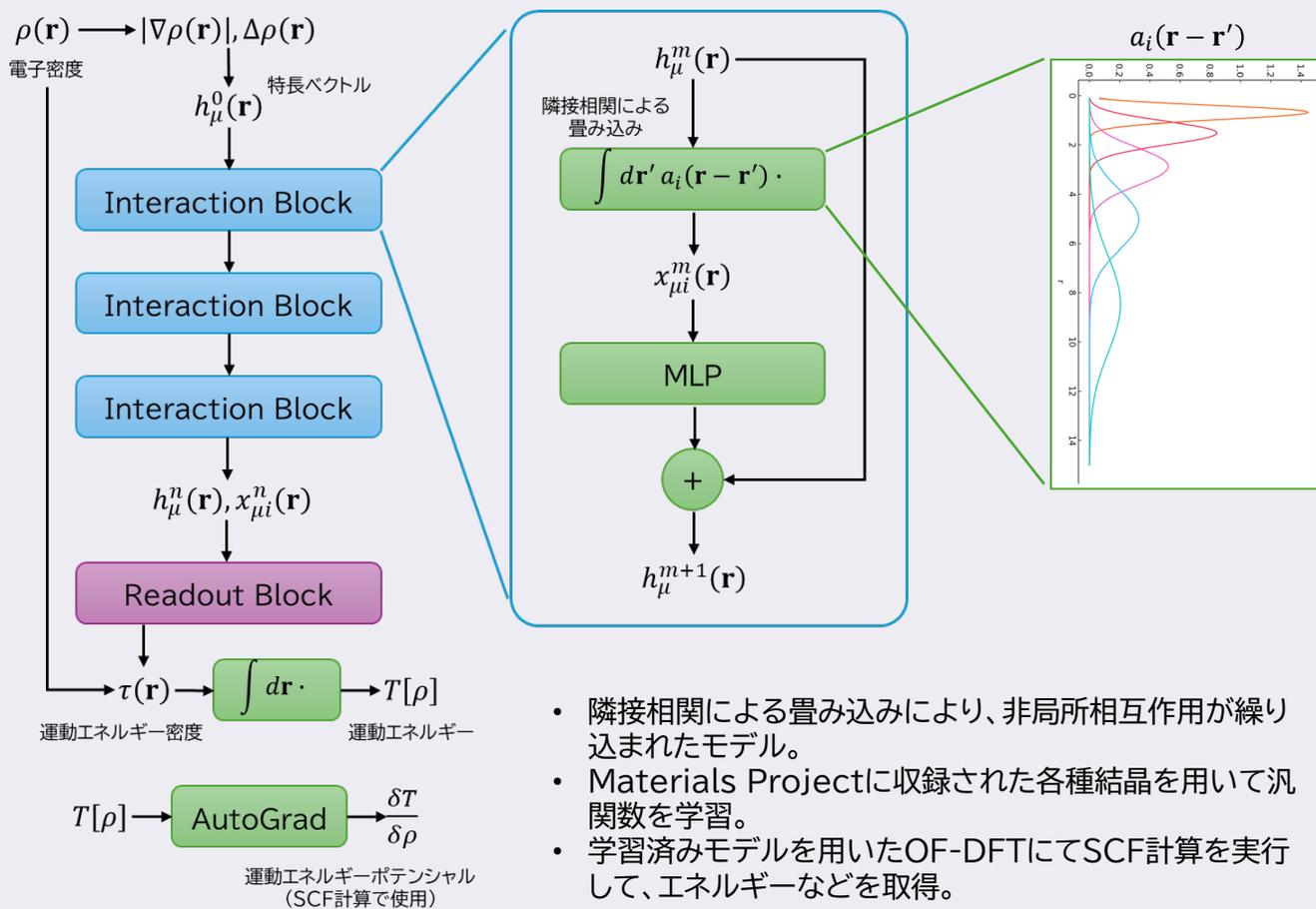
Kohn Sham-DFT vs Orbital Free-DFT

	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 (次バージョンで解決予定)	GNN力場などで汎用性を担保

GNN力場と同水準の計算コストで、電子状態も解析可

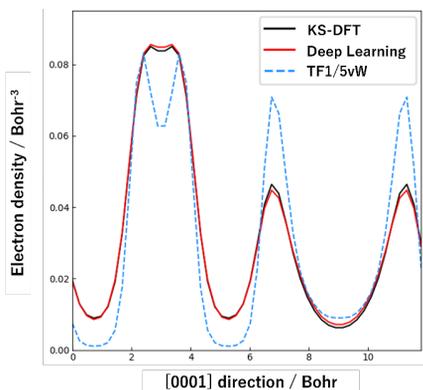
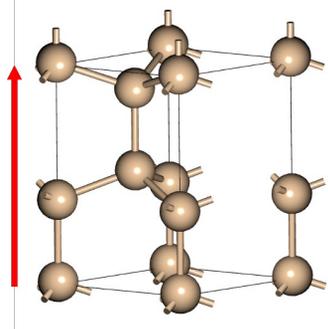
- OF-DFTの計算コストは原子数 N に比例する程度($O(N)$)であるため、Graph Neural Network(GNN)などを使った機械学習力場と同水準の計算速度でシミュレーションが実行できる。
- 電子密度の情報を保持しているため、SCF計算収束後にBader電荷なども解析できる。
- 電子やホールドーピングも可能であり、Effective Screening Medium(ESM)との併用で電極電位を制御した大規模系のMDシミュレーションも実現し得る(現行バージョンではESMは未実装)。外部電場の印加も容易である。
- 交換相関汎関数の種類はSCF計算実行時に選択可能であるため、系に応じてvdW-DFやrVV10などの分散力に対応した非局所相関も利用できる。DFT-D3などの経験関数は不要である。
- 波動関数の情報は含まないので、バンド構造や状態密度の計算には別途KS-DFTによる計算が必須である。

深層学習運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25のアーキテクチャ



- 隣接相関による畳み込みにより、非局所相互作用が繰り込まれたモデル。
- Materials Projectに収録された各種結晶を用いて汎関数を学習。
- 学習済みモデルを用いたOF-DFTにてSCF計算を実行して、エネルギーなどを取得。

六方晶Siの電子密度



ご興味を持たれた方は、
ぜひご連絡下さい。
ベンチマーク計算なども
可能です。

office@advancesoft.jp

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。

〒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 E-mail: office@advancesoft.jp

製品ページ: <https://www.nanolabo.advancesoft.jp>

会社ページ: <https://www.advancesoft.jp>

