

# マテリアルズ・インフォマティクス オンライン講習会 Day3

## ～ニューラルネットワークカ場による材料シミュレーション講習会～

担当： 名古屋工業大学 中山研究室

### <講義内容>

近年登場したニューラルネットワークカ場(M3GNet)を用いた材料シミュレーション（分子動力学法など）を用いて、イオン伝導性材料研究への利用について、講師による講演と直接 PC を使ったハンズオン形式で学習します。実習は、あらかじめ指定のソフトウェアをインストールした個人 PC を使用します。見るだけの参加も歓迎します。材料シミュレーションの経験が少ない学生を対象にした初級的な内容です。また初めての試みのため、スムーズな進行は望めないかもしれませんが、ご容赦ください。

1. ニューラルネットワークカ場 M3GNet.py と汎用原子シミュレーション環境 ASE の体験
  - 1) LiFePO<sub>4</sub>の構造緩和計算、平均電位評価
  - 2) Garnet 型 LLZ に対するニューラルネットワークカ場分子動力学計算
2. 分子動力学法によるイオン伝導度評価の初歩的理論（ほぼ座学）  
分子動力学法とは？ / 超構造 / MSD / 拡散係数評価
3. ASE を用いた入出力ファイルの加工（若干の python の知識が必要）  
結合長解析（RDF 他） / 原子の置換 / 空孔サイトの導入 など

### <開催概要>

開催日時：2025年3月19日（水）13:00～17:00 を目途

申し込み：<https://forms.gle/eTHhL6obhXqyqxM17>

（3月7日12:00仮締切）

参加費：無料

### 仮プログラム

時間	内容
～12:50	Zoom 立ち上げ
13:00-14:15	・python 環境の確認（pip でインストールする方法） ・M3GNet.py の簡単なデモ（電位計算 & 分子動力学） ・ハンズオン（20-30 分間）
14:15-14:30	休憩
14:30-15:30	・分子動力学法に関する座学 （主にイオン伝導体を対象）
15:30-15:40	休憩
15:40-17:00	ASE を用いた入出力データの加工・解析のデモ

### <ハンズオンを希望する参加者>

事前に python jupyter notebook が動作する環境を構築してください。

機種、OS により依存性がありますが、anaconda3 または VS code などがあります。

- ・【オプション 1】Anaconda3 / jupyter-notebook

<https://www.anaconda.com/download>

- ・【オプション 2】VScode / python 3.9 以上 & jupyter-notebook

<https://code.visualstudio.com/download>

※ (python 利用中のユーザー向け) すでに python をインストールし活用している方へ。今回は、以下のライブラリー環境を使う予定です (anaconda3 / windows)。もし、自分の環境を変更することが難しい場合は、conda あるいは venv などでもバーチャル環境を整えることを推奨します。

【python ライブラリーの整備】 2 通りあります

- ① M3GNet.py を使う場合 (Python 3.9 で確認)

```
ase==3.22.1
numpy==1.23.5
m3gnet==0.2.4
matplotlib==3.7.5
nglview==3.0.3
scipy==1.10.1
tensorflow==2.9.1
```

- ② MatGL を使う場合 (MatGL 内部で M3GNet が使えます) (python 3.11 で確認)

```
dgl==2.0.0
torch==2.2.1
pytorch-lightning==2.0.9
pymatgen==2024.5.1
ase==3.23.0
pydantic==2.7.1
boto3==1.34.101
numpy==1.26.4
matgl==1.1.1
```

※ 上記のテキストを requirements.txt などのテキストファイルに書き込み、

```
$ pip install -r requirements.txt
```

とコマンド入力することで、一括インストールできます。(機種、OS によりバージョンを変更する必要がある場合がある) (Windows, Linux(Redhat 系)について動作検証済)

講師・アシスタント： 中山将伸 (名工大・教員)

<免責事項>

本セミナーで提供される情報を使用することにより生じるいかなる損害についても、主催者は一切の責任を負いません。