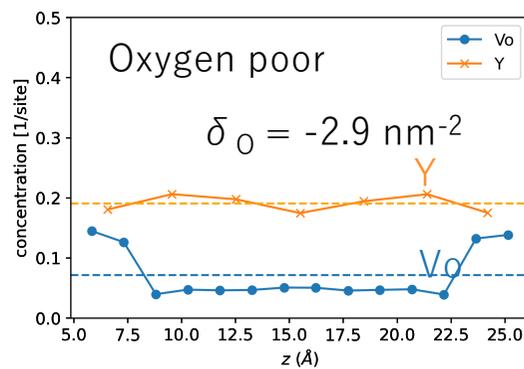
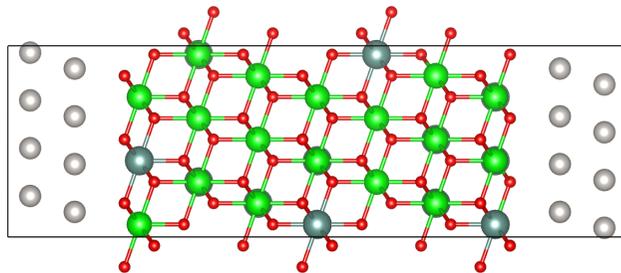


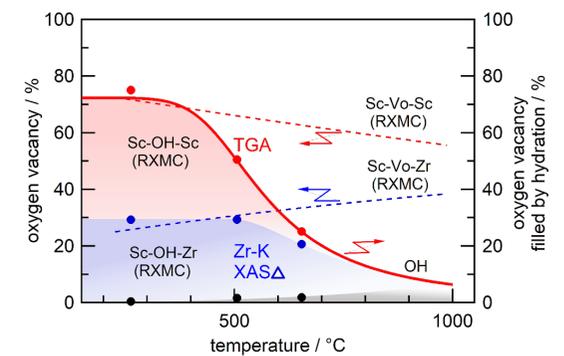
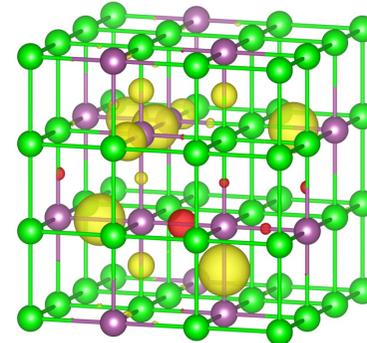
おわりに
—abICSの今後—

相平衡や組成の予測

- ✓ 熱力学的条件（**温度**、各化学種の**化学ポテンシャル**）によって組成や配置が影響を受け、物性が決まる



(b) 25% hydration (620 °C)



自由エネルギー・化学ポテンシャル

方法1：多数のカノニカルサンプリング計算から導出

✓ エネルギー期待値の温度依存性から**熱力学積分**で**自由エネルギー**を計算し、着目する**化学種の数**で**偏微分**をすれば化学ポテンシャルが求まる

$$\beta[F - E(T = 0)] = \int_{\infty}^{\beta} \langle E - E(T = 0) \rangle_{\beta} d\beta \quad \mu_i = \frac{\partial F}{\partial n_i}$$

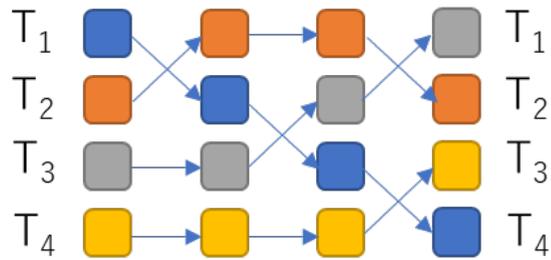
方法2：指定した化学ポテンシャルで**グランドカノニカルサンプリング**

✓ 計算したい化学ポテンシャル域が決まっていれば方法1より高効率

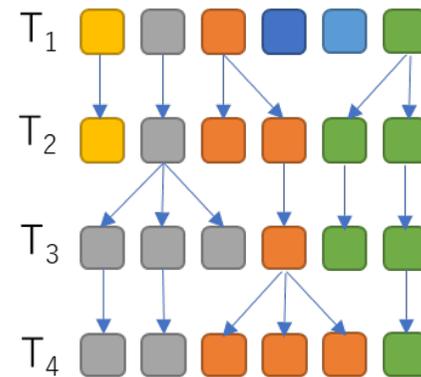
✓ 化学ポテンシャルを制御したい化学種が複数ある場合は、方法1は計算量が増大

Population annealing

- レプリカ交換モンテカルロ法は並列度があまり上げられず、RXMC計算のステップが律速になっている



レプリカ交換法
(10~20並列)



ポピュレーションアニーリング
(> **10000**並列)

We want your feedback!

- **abICS**のバグ関連の報告や使い方の質問、機能追加の提案はGitHubの[Issues](#)で受け付けています。

<https://github.com/issp-center-dev/abICS/issues>

- 研究に関連するトピックなどGitHubのIssuesで相談しづらいことを問い合わせる際には、以下の連絡先にコンタクトをしてください。

abICS-dev@issp.u-tokyo.ac.jp