

二酸化トリウムの機械学習分子動力学シミュレーション

Machine Learning Molecular Dynamics Simulations of ThO₂

*奥村 雅彦¹, 小林 恵太², 中村 博樹¹, 板倉 充洋¹, 町田 昌彦¹

¹原子力機構, ²RIST

最近、密度汎関数法並みの高精度計算を古典分子動力学法並みの低計算コストで実現可能な機械学習分子動力学が提案された。本講演では、いくつか提案されている機械学習分子動力学法を二酸化トリウム系に適用し、最も適した方法を探り、ブレディック転移の評価を目指す。

キーワード: 機械学習, 分子動力学法, 二酸化トリウム

1. 背景と目的

近年、ハードウェアとソフトウェアの急速な発展により、密度汎関数をはじめとする量子力学計算を用いて数百原子からなる系であれば様々な物性値の評価が可能になっている。一方で、熱力学的極限の議論や2相界面などは、数百原子のシミュレーションで論ずることは難しい。そのような目的のためには、通常古典分子動力学法が用いられるが、計算結果は力場に強く依存し、通常量子力学計算に比べて精度が劣る。最近、量子力学計算の結果を教師データとして機械学習によってポテンシャルエネルギー面を構築し、それを利用して分子動力学法を実行する「機械学習分子動力学法」が提案され[1]、パッケージ[2]も利用可能になっている。一方で、原子に働く力を直接学習する方法[3]も提案されており、どの方法が適しているのか、明らかではない。本講演では、二酸化トリウム系に最適な方法を選び、物性評価の結果を報告する。

2. シミュレーション

2-1. 対象系

機械学習分子動力学法は多くの原子種を扱うのが難しいため、2種類の原子で構成される二酸化トリウムを対象系に選ぶ。この系では、第一原理分子動力学法を用いて数百個の系でブレディック転移の存在が確認されており[4]、機械学習分子動力学法を用いることにより比熱などによる相転移の評価を目指す。

2-2. 方法

エネルギーの学習に基づく機械学習分子動力学法[1]については、公開パッケージである AENet[2]を利用する。一方、比較対象として力の学習に基づく機械学習分子動力学法[3]については自作コードを用いる。

2-3. 最適な方法の探索

AENet[2]を利用した計算ではエネルギーの誤差は小さいが、力の誤差が大きいことがわかった。そこで、エネルギーではなく直接力を学習する方法[3]を用いた結果と AENet の結果を比較し、より精度の高い方法を選ぶ。また、両方の方法で分子動力学法を実行し、物性評価に及ぼす両者の差を報告する。

参考文献

[1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007). [2] N. Artrith and A. Urban, Comp. Mat. Sci. **114**, 135 (2016). [3] Z. Li *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114**, 096405 (2015). [4] H. Nakamura and M. Machida, J. Nuc. Mat. **478**, 56 (2016).

*Masahiko Okumura¹, Keita Kobayashi², Hiroki Nakamura¹, Mitsuhiro Itakura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency, ²Risearch Organization for Information Science and Technology