粘土鉱物の機械学習力場の開発

Development of machine learning force fields of clay minerals

*奥村 雅彦[1]，小林 恵太[2]，山口 瑛子[1]
[1]原子力機構，[2]RIST

粘土鉱物は最も身近な環境物質の一つであり、福島第一原子力発電所事故では、セシウムを強く吸着することで注目を集めたが、その物性はまだ未知の部分が多い。粘土鉱物の物性解明には数値シミュレーションが有効であるが、現在良く用いられている古典分子動力学法は微細な構造を再現できないなどの問題がある。本講演では、第一原理計算を基にした機械学習力場について報告する。

キーワード：粘土鉱物，分子動力学，機械学習

1. 緒言

粘土鉱物は地表に豊富に存在し、最も身近な環境物質の一つである。最近では、福島第一原子力発電所事故によって環境中に放出された放射性セシウムを強く吸着することで注目を集めた。また、その性質から放射性廃棄物の地層処分におけるバリアとしての役割も期待されている。しかし、この粘土鉱物のセシウム吸着メカニズムの全容は明らかになっていない。メカニズム解明には数値シミュレーションが有効であるが、現在良く用いられている古典分子動力学の力場は粘土鉱物のミクロな構造を再現できないなどの問題があることが知られている。そこで、本研究では第一原理計算を基として、古典力場が持つ欠点を解消する機械学習力場を開発することを目的とした。

2. 機械学習力場

2-1. 対象

本研究では、最も単純な珪酸塩鉱物の一つであるカオリナイトを対象として、力場開発を行った。

2-2. 方法

学習セットは第一原理計算コード Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)を用いて、カオリナイトの supercell について第一原理分子動力学シミュレーションを実行し、学習セットを取得した。用いた汎関数は SCAN (meta generalized gradient approximation)、supercell は 2×2×2、3×1×2、3×2×1 を採用し、それぞれの系において温度 100K から 1000K まで 100K 刻みで温度を変えた系を用意し、それぞれ NVT で 10,000 ステップ計算し、学習データセットを取得した。作成した学習セットについて、機械学習分子動力学法の公開パッケージ n2p2[2]を用いて学習し、分子動力学法コード LAMMPS[3]を用いて物理量を評価した。

2-2. 結果

講演では、カオリナイトの構造について、開発した機械学習力場による計算結果と第一原理計算による結果及び実験結果と比較し、その性能について報告する。

参考文献

[1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).

[2] A. Singraber, J. Behler, and C. Dellago, J. Chem. Theo. Comp. **15**, 1827 (2019).

コード URL　https://github.com/CompPhysVienna/n2p2

[3] S. Plimpton, J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).

*Masahiko Okumura[1], Keita Kobayashi[2] and Akiko Yamaguchi[1,2]

[1]Japan Atomic Energy Agency, [2]Research Organization for Information Science and Technology