多成分系における機械学習分子動力学法

Machine learning molecular dynamics for multi-component system

*小林 恵太[1], 中村 博樹[1], 山口 瑛子[1,2], 板倉 充洋[1], 町田 昌彦[1], 奥村 雅彦[1]

[1]日本原子力研究開発機構, [2]東京大学

機械学習分子動力学法は高精度手法であるが、多成分系へ適用した場合に記述子次元の増大し、計算負荷が増大する。そのため、セメントや粘土などの複雑な多元素系への適用には大きな問題となる。本発表では多成分系において機械学習分子動力学を効率よく実行するための適切な記述子の組み合わせに関して調査した。

キーワード：機械学習、分子動力学法、セメント

1. 緒言

機械学習分子動力学法とは、第一原理計算から得られたデータをもとに、機械学習により生成した力場を用いた分子動力学法である。この手法は従来の古典力場を用いた方法に比べ高精度であるが、対象とする系の元素数が多い場合に、記述子次元が増大し計算負荷が増大する問題が存在する。そのため 4 成分以上の系を扱う事が困難となる。発表では記述子を適切に設定することにより、計算負荷の軽減を試みた。具体的な物質としてはセメント物質などを対象とした。

2. 手法

セメント水和物のモデル物質としてトバモライトを対象とした。9Å, 11Å, 14Å トバモライト、水、界面構造に対し、第一原理分子動力学計算を実行し、第一原理データセットを生成し、機械学習力場の構築に使用した。機械学習手法としては Behler-Parrinello のニューラルネットワークを使用した。ニューラルネットワークの記述子としては対称関数(SF)、重み付き対称関数(wSF)を用いる。ここで、wSF は多成分を扱うために開発された記述子であるが、通常の SF に比べ表現力が低くなるという問題がある。本発表では SF と wSF を適切に組み合わせることにより機械学習力場の構築を行った。

3. 結論

機械学習力場の性能評価を行った結果、wSF のみでは分子動力学の実行過程において構造崩壊を引き起こすため不十分であった。一方、wSF と SF と組み合わせることにより、少ない記述子次元でも安定した計算が可能であることが解った(表 1)。

表 1:記述子の組み合わせと安定性の調査結果

記述子	総記述子次元	水+イオン	界面構造 1	界面構造 2
SF	848	○	○	○
wSF	224	構造崩壊	構造崩壊	構造崩壊
wSF+SF	266	○	○	○

*Keita Kobayashi[1], Hiroki Nakamura[1], Akiko Yamaguchi[1,2], Mitsuhiro Itakura[1], Masahiko Machida[1] , Masahiko Okumura[1]

[1]JAEA, [2]Tokyo-Uni