

統合機械学習分子動力学システムの開発とその応用

Development of Integrated Machine-Learning Molecular Dynamics System and its Applications

*奥村 雅彦¹

¹JAEA

近年、原子スケールシミュレーションの手法として、低計算コスト高精度を実現する機械学習分子動力学法が提案されたが、まだ誰もが使える手法ではない。本公演では、講演者らが開発中の「統合機械学習分子動力学システム」を紹介し、その応用例についても述べる。

キーワード：機械学習、分子動力学法

1. 緒言

現在、原子スケールのシミュレーションには主に(1)低計算コスト低精度である古典分子動力学法と(2)高計算コスト高精度である第一原理分子動力学法が用いられており、それらの特性に合った系についてシミュレーションが実施されている。近年、(2)の結果を人工ニューラルネットワーク等で学習し、高精度かつ低計算コストを実現する「機械学習分子動力学法」が提案された[1]。しかし、まだ手法自体が発展途上であることもあり、誰もが使える手法ではない。

2. 統合機械学習分子動力学システム

上記の背景を踏まえ、講演者らは誰もが容易に機械学習分子動力学法を実施可能であることを目標とした「統合機械学習分子動力学システム」を開発している。このシステムは、スクリプト言語 Python の Atomic Simulation Environment (ASE)パッケージを基礎としている。このパッケージは、様々な第一原理計算コードや分子動力学法コードを Python スクリプトで制御するものである。開発中のシステムでは、これらのコードの加えて、機械学習分子動力学法コードを連携させて、第一原理計算の実施、学習データの収集、人工ニューラルネットワークの学習、機械学習ポテンシャルの作成、機械学習分子動力学法の実施、という一連の作業を制御する。また、将来的には、データ活用社会創成プラットフォーム mdx を学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点のスーパーコンピューターと連携させ、上記の一連の作業を実施できる統合システムの完成を目指す。講演では、システムの概要と特徴、開発の進捗、システムを用いた応用例について述べる。

謝辞

本研究は学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 2023 年度公募型共同研究「統合機械学習分子動力学システムの構築」(jh230069) の助成を受けて研究を実施しました。

参考文献

[1] J. Behler and M. Parrinello, "Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces", Phys. Rev. Lett. **98**, 146401 (2007).

*Masahiko Okumura¹

¹JAEA