

機械学習と分子シミュレーションの融合による 水分子ダイナミクスの解析

(北陸先端大・マテリアル¹, 北陸先端大・知識科学², HPC システムズ³)
○水上 卓¹, グエン ヴィエット クーン³, ダム ヒョウ チ²

Simulation Machine-Learning Technique Applied for Water Dynamics (JAIST, School of Materials Science¹, JAIST, School of Knowledge Science², HPC Systems³) ○Taku Mizukami¹, Nguyen Viet Cuong³, Dam Hieu Chi²

Although water is a ubiquitous liquid in the earth, it shows a variety of anomalous features, for example, i) a molecular low diffusivity in a region of long-range distance (10Å) from solute surface, ii) spatially heterogeneous dynamics of water. Because hydration water is essential in many cases for the functional expression of biomolecules, the relationship between bio-molecular function and hydration has been notable¹⁾. We present the behavior of water molecules by means of the simulation machine-learning method.

The spatial heterogeneity of water dynamics and/or diffusion in the glass transition temperature is known. We built the descriptor of water-water coordination geometry and that of water molecules' transfer. These two kinds of descriptors of every atom were calculated from the trajectories of molecular dynamic simulations of liquid phase water from at 150K to 300K. The clusterization and Ridge/lasso regression technique were applied for the descriptor space. The relationship between molecular translation and coordination geometry of liquid water was detected in the descriptor space.

Keywords : Water; Molecular Dynamic Simulation; Machine Learning; Protein

水は地球上ではありふれた液体だが、様々な特徴ある性質を示す。例えば i) 水和状態で溶質からの広い距離範囲(10Å程度)にわたる拡散の低下, ii) 不均一な拡散のダイナミクス, など。生体高分子の機能発現に多くの場合必須で、その水和状態と機能との関係が重要視されている¹⁾。生体高分子の機能発現における溶質・溶媒の相互作用の解明を目的にして、今回、分子動力学計算と機械学習との融合的手法により水分子の振る舞いを調査した。

ガラス転移温度で速い拡散と遅い拡散を示す分子が空間的に不均一に存在していることが知られている。150K-300Kの温度領域において、水分子の配位構造を反映する記述子と、水分子の拡散に着目して移動に関係する記述子を作成し、機械学習によって記述子空間上で分子の移動と関係する構造の特徴を抽出した。同様にして記述子から界面と水分子の距離の予測も行った。講演では記述子から得られた振る舞いの分子的な解釈を示す。

1) Protein dynamics tightly connected to the dynamics of surrounding and internal water molecules. V. Helms, *ChemPhysChem*. **2007**, 8, 23.