

795th ASRC Seminar

Date: 11月24日 (火) 13:30 ~

Location: Zoomによるオンライン会議

Speaker: 永井佑紀 氏

(日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター)

Title: 学習精度に計算精度が依存しない機械学習原子分子シミュレーション: 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

Abstract:

本講演では、最近盛んに利用されている機械学習分子動力学法について解説するとともに、学習精度に計算精度が依存しない機械学習シミュレーションである自己学習ハイブリッドモンテカルロ法について紹介する。

より正確な原子分子シミュレーションを行うためには、より正確な原子間相互作用の評価が必要であり、密度汎関数理論に基づく第一原理計算で得られたポテンシャルを微分することで得られる力を使った第一原理分子動力学が現時点で最も正確なシミュレーションであると考えられている。しかしながら、第一原理分子動力学法は計算の各ステップで第一原理計算を行うために計算コストが莫大であり、長時間あるいは大きな系の計算が困難であった。これを解決する手法として、第一原理計算で得られたポテンシャルを再現するような人工ニューラルネットワーク(ANN)を構築して分子動力学を実行する機械学習分子動力学法が脚光を浴びており、盛んに利用されている。ANNを構築する際の最適なトレーニングデータは、元々の第一原理分子動力学法で生成される原子配置とそのポテンシャルである。しかしながら、第一原理分子動力学法の計算負荷が高いために機械学習分子動力学法を用いるのであるから、元々の第一原理分子動力学法でデータを集めるのは本末転倒である。

本講演では、自己学習モンテカルロ法のアイデア[1]を用いることで、得られた結果が統計的に厳密にオリジナルの第一原理計算分子動力学法の計算結果と等しい手法を開発したことを報告する[2]。そして、その手法を用いて、4元素系でも精度よく計算ができることを示すため、フォノン誘起超伝導体YNi₂B₂Cのフォノン計算の結果を報告する。

[1] J. Liu, Y. Qi, Z. Y. Meng, and L. Fu, Phys. Rev. B 95, 041101(R) (2017).;

J. Liu, H. Shen, Y. Qi, Z. Y. Meng, and L. Fu, Phys. Rev. B 95, 241104(R) (2017).;

YN, H. Shen, Y. Qi, J. Liu, and L. Fu, Phys. Rev. B 96, 161102(R) (2017)

[2] YN, M. Okumura, K. Kobayashi and M. Shiga, Phys. Rev. B 102, 041124(R)(2020)

<Contact>

山口康宏(81-5450)

Advanced Science Research Center