

機械学習による分子動力学 シミュレーションの高速化

慶應義塾大学 理工学部

泰岡 顕治

yasuoka@mech.keio.ac.jp

分子動力学シミュレーション

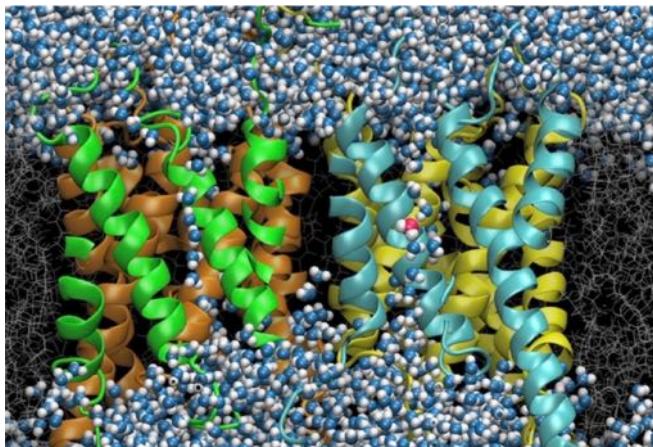
・計算科学における大規模シミュレーション

流体計算, 構造解析, 電子状態計算, 分子動力学シミュレーション

・分子動力学(MD)シミュレーション

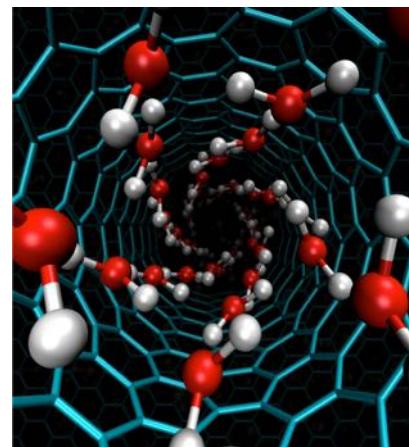
系内の各原子・分子に対してニュートンの運動方程式を解き, それらのふるまいを求める
ことで, 現象の分子メカニズムを解明する.

生体物質



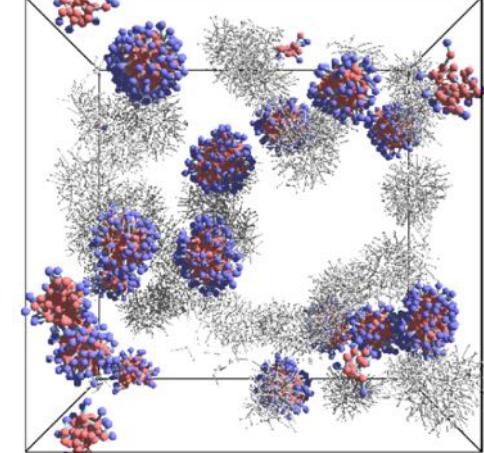
Hirano *et al.*, *BioPhys J.* (2010)
Yamamoto *et al.*, *Phys. Rev. E* (2014).

カーボンナノチューブ



Winarto *et al.*, *Nanoscale* 7, 12659 (2015)

界面活性剤



Arai *et al.*, *J. Chem. Phys.* (2007)

・応用範囲

創薬, 病理解明, 新規材料設計など多岐にわたる.

分子動力学シミュレーションの高速化

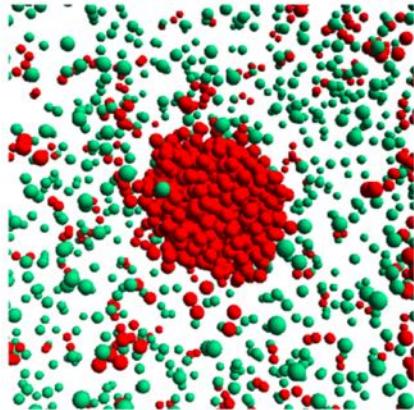
- ・分子動力学シミュレーションにおける課題

計算系の大規模化・長時間化に伴う莫大な計算コスト

空間・時間の2つの方向からシミュレーションの効率化を行う必要がある.

- ・大規模系(数百万～数億粒子)におけるシミュレーションの高速化

空間を分割して超並列で計算を行う(スーパーコンピュータの利用)



- ・大規模系における液滴生成

液滴の生成はレアイベントであるが、大規模系でシミュレーションを行うことで、多くの液滴を観測。

生成過程について、理論とシミュレーション結果の整合性を確認することに成功。

Ayuba *et al.*, *J. Chem. Phys.*, **149**, 044504 (2018)

- ・長時間シミュレーションの高速化

時間に対して、空間のように分割・並列化することは原理上不可能。

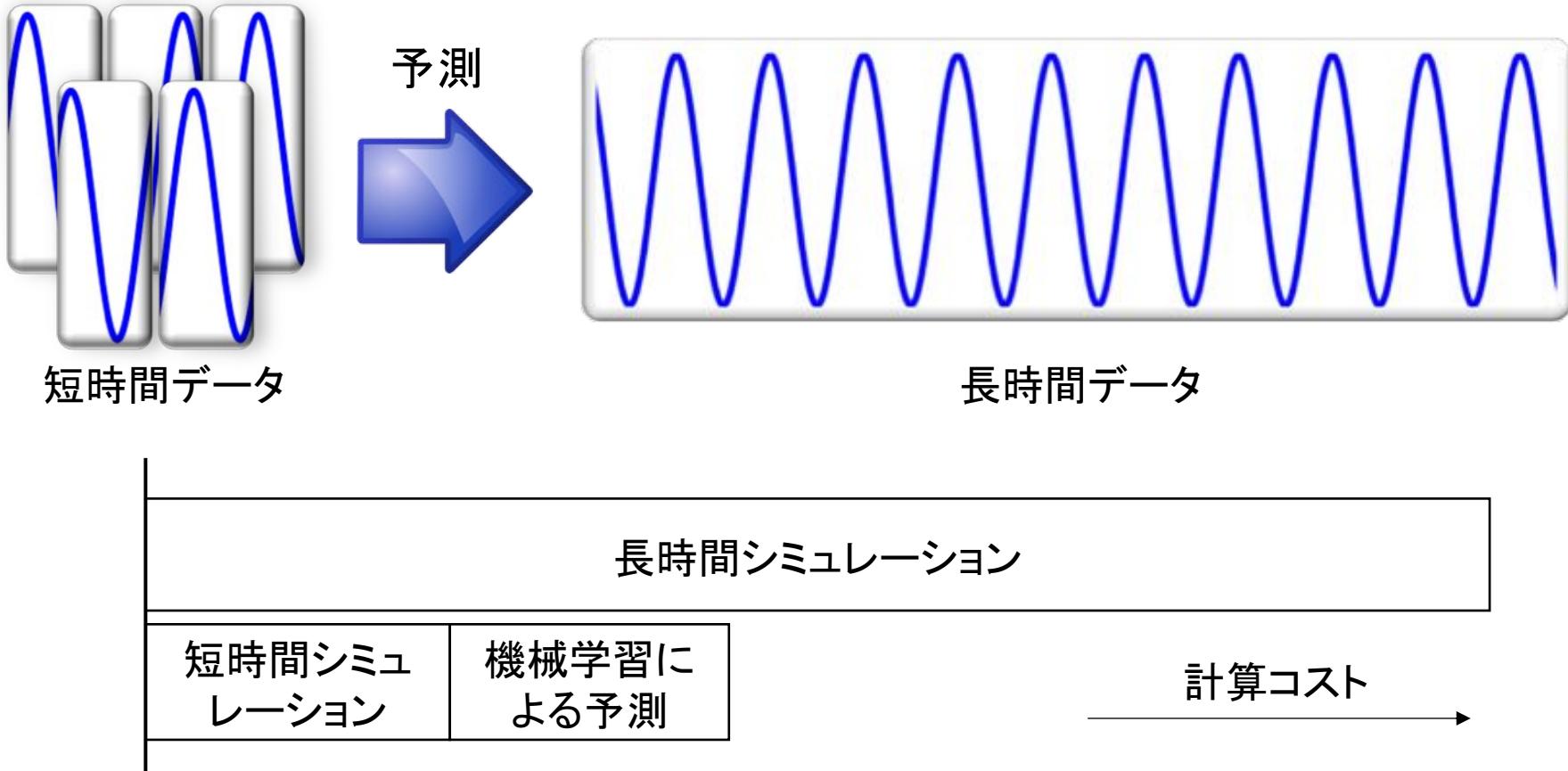
多時間刻み幅法など、計算上の工夫が提案されているが、未だ多くの計算時間を要する。

機械学習を用いた分子動力学シミュレーションの高速化

・MD-GANによる時間発展の高速化

Generative adversarial nets (GANs)*を応用した機械学習モデル MD-GANを開発。
短時間シミュレーションデータを学習し、長時間シミュレーションデータを予測するモデル。

* Arjovsky et al., arXiv preprint, 1701.07875 (2017).



Thirty-Second AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2192 (2018).

<https://www.aaai.org/ocs/index.php/AAAI/AAAI18/paper/view/16477>

MD-GANの概要

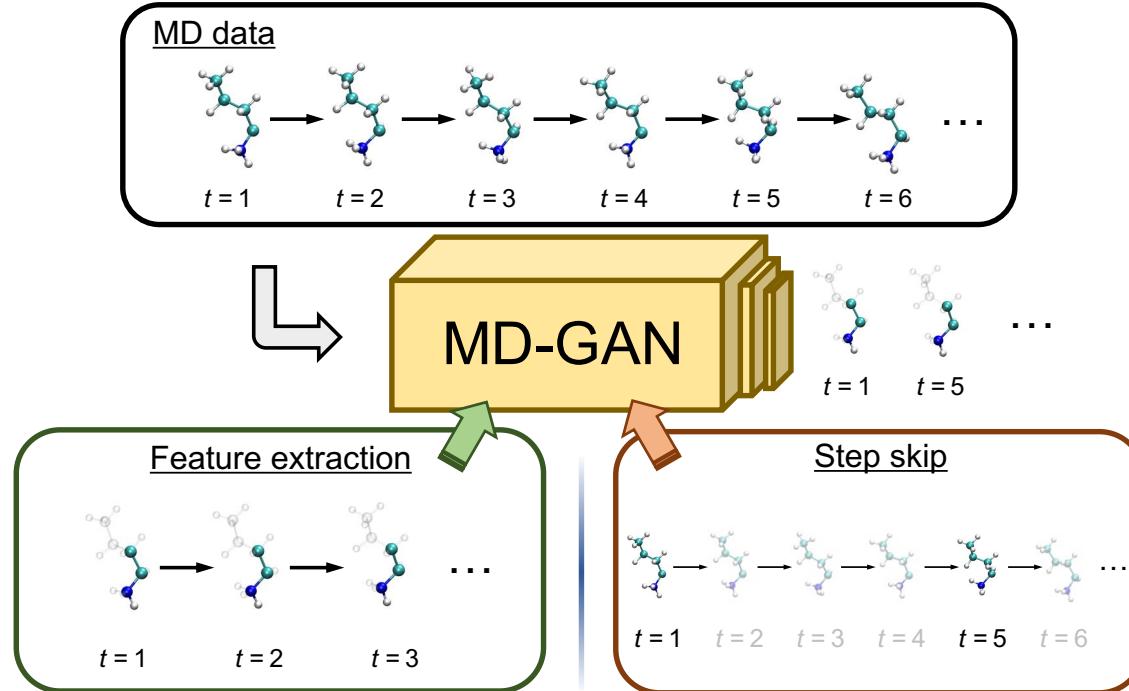
・短時間データから学習すべきこと

MDシミュレーションから、必要な性質だけをもつ新たな時間発展法を学習できれば高速化が可能。
系内の全分子に注目するのではなく、その一部(部分系)がどのようにふるまうかに注目。

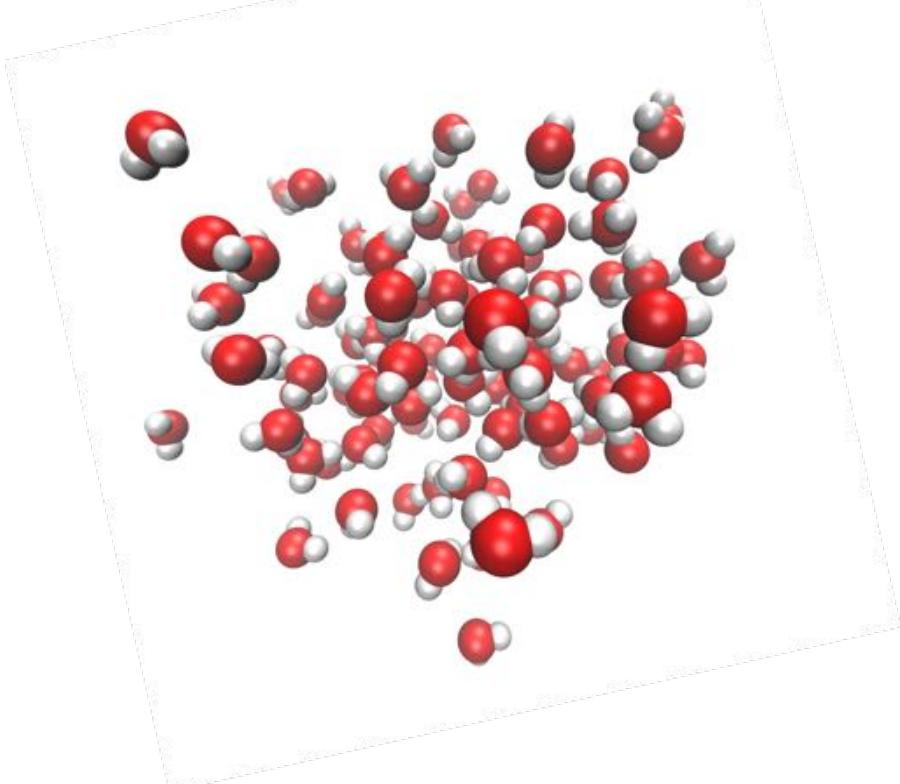
部分系

- Feature extraction: N 個の粒子のみで所望の物理量が求まるならば、それらを部分系とする。
- Step skip: M ステップ飛ばしの時系列のみで所望の物理量が求まるならば、それらを部分系とする。

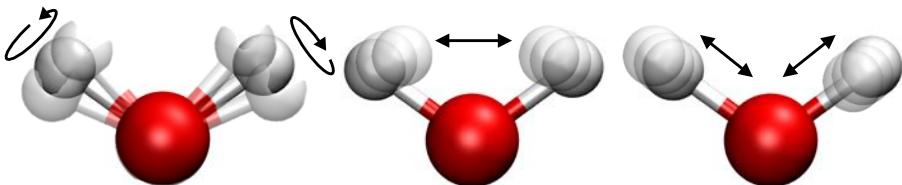
部分系の時間発展法を学習し、長時間の時系列を予測する。



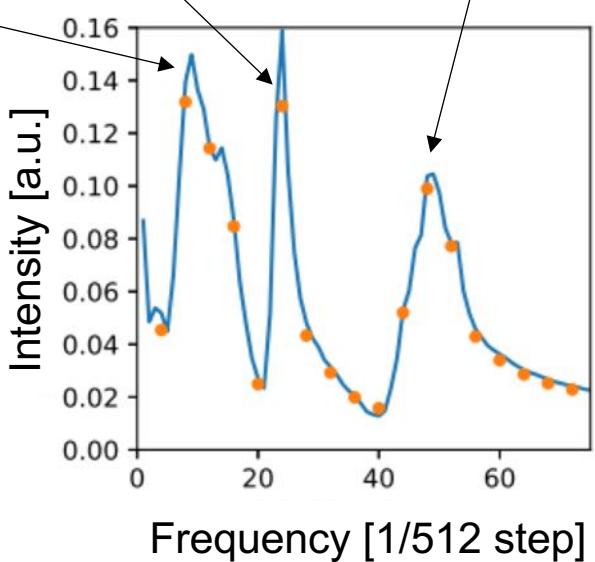
適用例: 水の振動スペクトル



水の第一原理MDシミュレーションを短時間行い、
振動スペクトル* の予測を行った。
(分子数:110, 温度:305 K, 温度・体積一定条件)



Libration Bend Stretch



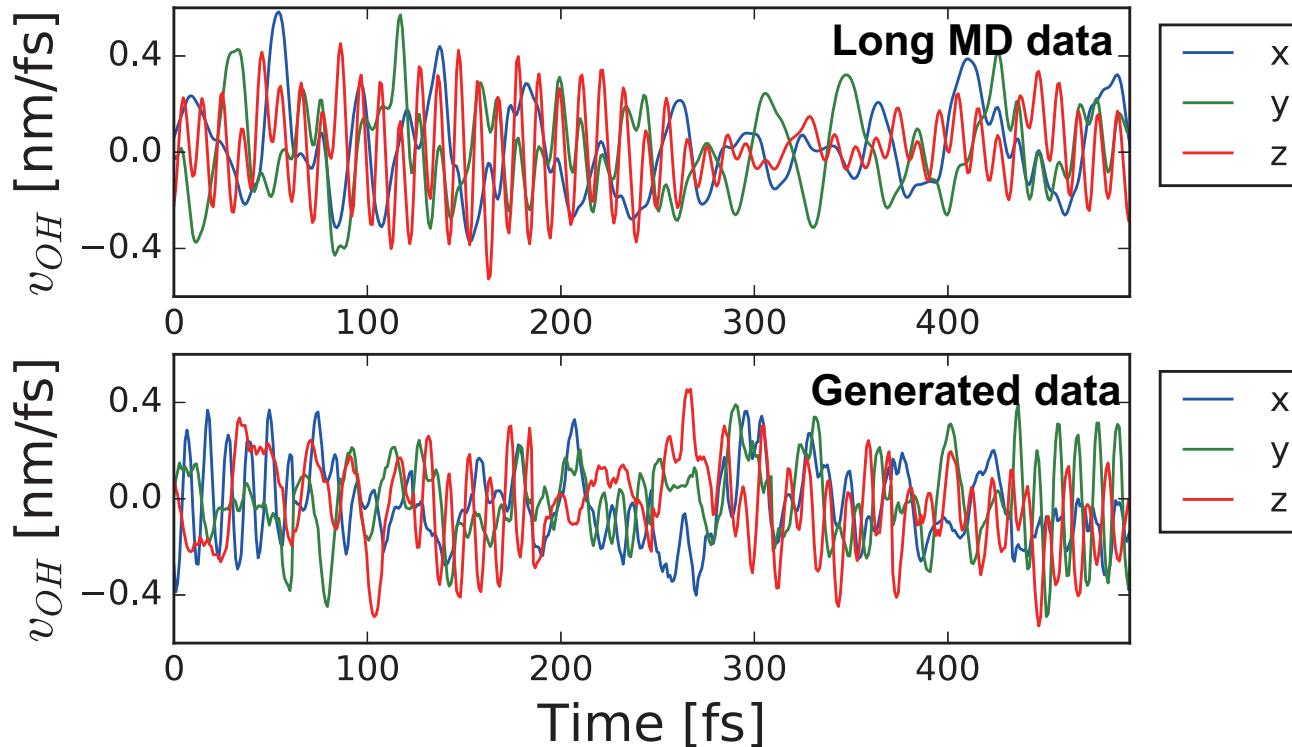
点: 短時間MDデータから求まるスペクトル
線: 長時間MDデータから求まるスペクトル

適用例: 水の振動スペクトル

部分系の選択

- Feature extraction: OH原子間の相対速度
- Step skip: 0.97 fsを1ステップとする

128ステップ($= 124.16$ fs)の時系列を入力データとして、学習・予測を行った。

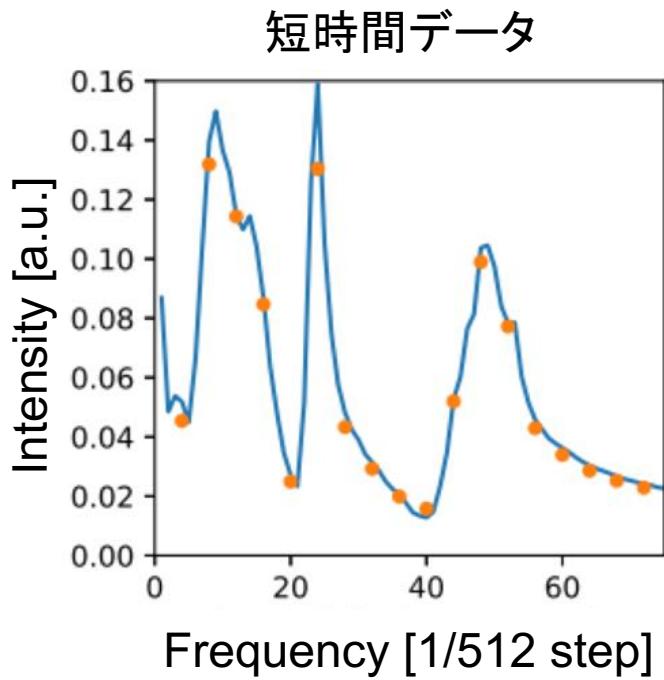


複雑な速度のふるまい(非線形調和振動)を再現することができた。

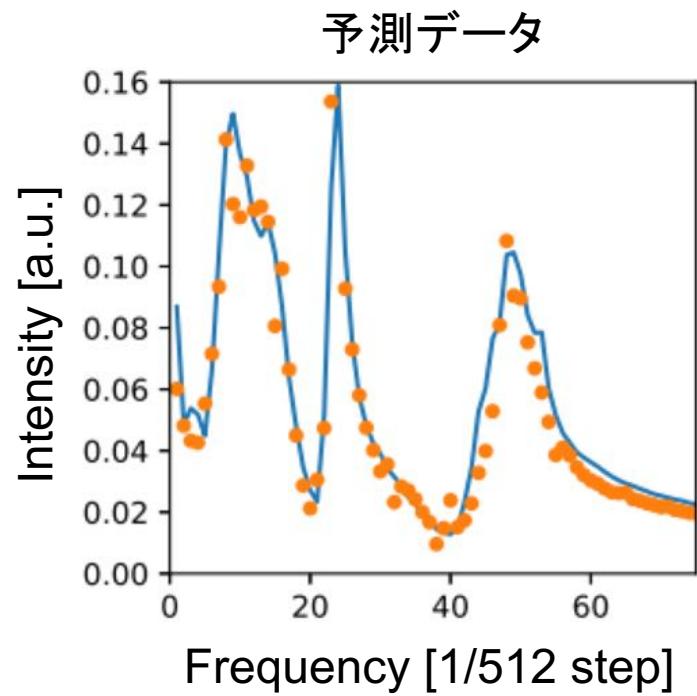
適用例: 水の振動スペクトル

振動スペクトル:

OH原子間相対速度の自己相関関数をフーリエ変換したもの



MD-GAN
→

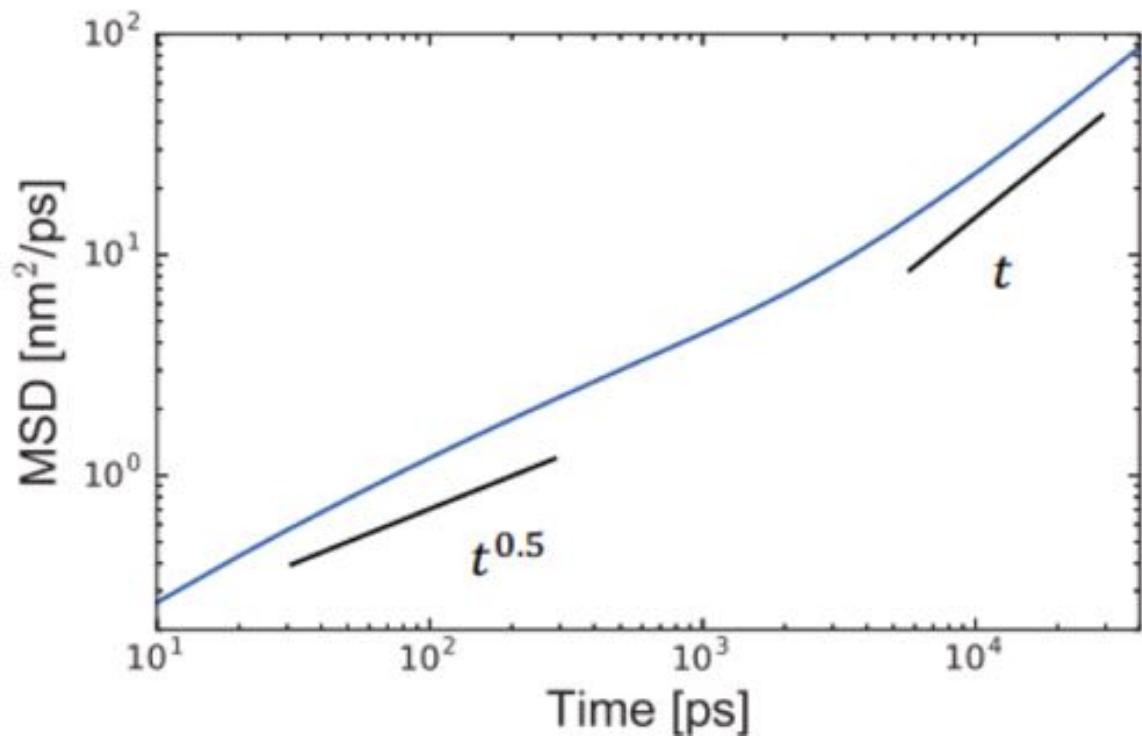
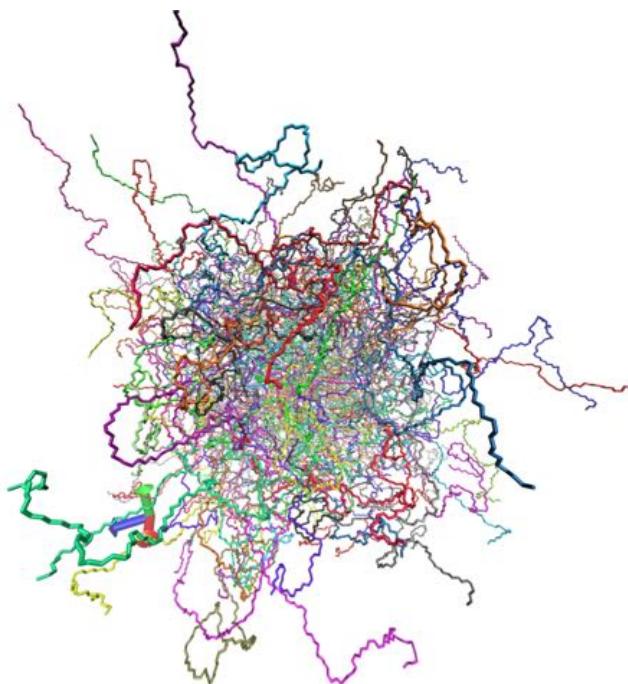


4倍の解像度を実現

適用例: ポリマーの拡散現象

ポリエチレン(1405 g/mol)300分子で構成される系においてMDシミュレーションを行い、平均自乗変位(MSD)の予測を行った。(温度:500 K, 温度・体積一定条件)

ポリマー系では、絡み合いによる効果で拡散係数(MSDの傾き)が遷移する*。



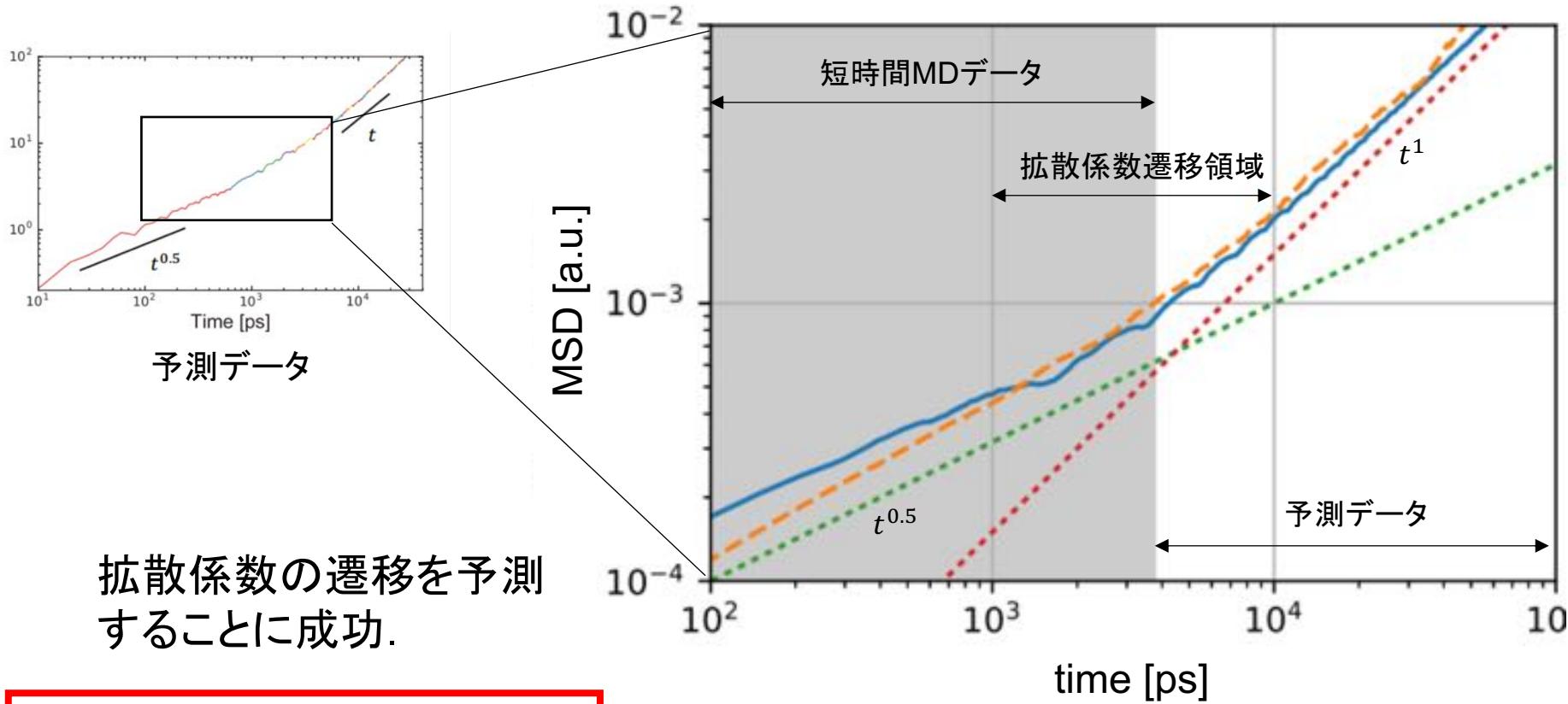
* Takahashi et al., *Polymers* **9**, 24(2017).

適用例: ポリマーの拡散現象

部分系の選択:

- Feature extraction: ポリエチレン分子の中心座標
- Step skip: 30 psを1ステップとする

128ステップ(= 3.84 ns)の時系列を入力データとして、学習・予測を行った。



20倍の高速化を実現

長時間MDから直接得られるMSD
MD-GANによるMSD予測結果

まとめと今後の展望

- ・ 分子動力学シミュレーションを時間方向に高速化するための機械学習モデル MD-GANを開発した。
- ・ MD-GANによる高速化は、長時間相関をもつ物性の計算において特に有用である。
- ・ 様々な分子種に対して短時間の大規模計算を行い、その長時間化をMD-GANで行うことで、分子動力学シミュレーションを用いた新規材料開発等の加速が期待できる。
- ・ MD-GANの適用事例を増やしつつ改良を行うことで、将来的に他の時系列データ予測への応用も検討する。