

# 物理科学ゼミナール

タイトル: 「深層学習を使った分子動力学シミュレーションの発展と応用」

講師: 南カリフォルニア大学 野村健一 准教授

日時: 8/9 (金) 4 限

場所: 理学部 3 号館 2 階 D201

## アブストラクト

本セミナーでは深層機械学習を用いた分子動力学シミュレーションの発展と応用について紹介する。現在、深層機械学習モデルを使い量子化学に基づいた原子間相互作用を学習させる事により、既存の方法による精度や計算量からくる制約を乗り越える試みが精力的に行われている。このような機械学習力場は対象の系を精度良く効率的に計算出来るので、様々な分野での応用が期待されている。本セミナーでは、始めに深層機械学習力場を用いた大規模分子シミュレーションの最近の応用例を紹介する。その中で大規模系に特有な fidelity scaling 問題とその問題に対するアプローチについて述べる。次に、深層強化学習を用いた長時間シミュレーション手法の開発について紹介する。強化学習はマルコフ決定過程に基づいて逐次決定問題を解く機械学習の一種であり、ロボット工学や自律走行技術の開発に使われている。深層強化学習を用いて分子の拡散経路を探索する自律的エージェントを開発し、得られた経路から拡散時間を評価する最近の試みを述べる。最後に STEM 分野の学生を対象にした機械学習の教育活動について紹介する。

学内担当: 島村 孝平 (shimamura at kumamoto-u.ac.jp)