

令和 4 年 5 月 29 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2020～2021

課題番号：20K20970

研究課題名（和文）多体性を考慮した粗視化分子シミュレーションへの量子コンピューティングの活用

研究課題名（英文）Application of quantum computing to many-body coarse-grained molecular simulations

研究代表者

杵淵 郁也（Kinefuchi, Ikuya）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・准教授

研究者番号：30456165

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：分子動力学シミュレーションから統計量を抽出し、粗視化分子シミュレーションモデルを構築する方法について研究した。粗視化粒子の間に作用する力は、着目している2つの粒子の距離のみではなく、周囲の他の粒子の影響により変化する。このような多体性を表現する粗視化モデルを効率的に構築する手法を確立することを目的として、量子アニーリングによりモデルパラメータを最適化する方法を検討した。また、粗視化粒子の周囲環境を表現する方法についても検討した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では分子動力学シミュレーションから抽出した統計量に基づいて、粗視化分子シミュレーションモデルを構築する方法について検討を行った。多体性を再現する粗視化モデルの構築が容易になることで、メソスケールの流体の特性を正確に再現した大規模シミュレーションが可能になる。本研究の成果を活用することで、マイクロスケールとマクロスケールをシームレスに接続し、スケールが階層的になっている生体系やソフトマターの現象解明に大きく寄与することが期待できる。

研究成果の概要（英文）：We investigated a method to construct coarse-grained molecular simulation models by extracting statistical quantities from molecular dynamics simulations. The force on coarse-grained particles depends not only on the distance between two particles but also on the effect of other neighbor particles. In order to efficiently construct a model that reproduces such many-body effect, we investigated the parameter optimization method using the quantum annealing and the representation of the environment around a coarse-grained particle.

研究分野：分子流体力学

キーワード：粗視化分子シミュレーション メソスケール 多体効果 散逸粒子動力学法

1. 研究開始当初の背景

これまでに研究代表者および分担者のグループでは、物質を構成する原子を一定の個数ごとにグループ分けしてクラスタを定義し、クラスタの重心運動を粗視化粒子の運動とみなすことにして、粗視化粒子の間にはたらく相互作用を分子動力学 (Molecular dynamics: MD) シミュレーションの統計量からモデリングする手法を開発した[1,2]. この方法により得られる相互作用モデルは、従来のモデルと比較して、物質の静的・動的特性をより正確に再現できることが Lennard-Jones 流体に対して確認されている. しかしながら、粗視化粒子の間にはたらく相互作用を二体間相互作用の和で近似していることに起因して、多体性の影響が強く現れる系ではモデルの精度が悪化してしまうという課題がある[3].

二体間相互作用に多体効果を実効的に組み込む代表的な手法として、Iterative Boltzmann inversion (IBI)法[4]が挙げられる. IBI 法は、目標とする動径分布関数を再現するように、ポテンシャル関数を反復計算により修正していく手法であり、広く用いられている. しかし、ポテンシャル関数の変化に対する動径分布関数の変化量が小さく、ポテンシャル関数を一意に定めることが困難な場合があるなどの問題点がある.

2. 研究の目的

本研究では具体的な対象として、メソスケール現象の解析に用いられている粗視化分子動力学法および散逸粒子動力学法に着目し、粗視化粒子の間にはたらく相互作用の多体効果を正確かつ効率的にモデリングする手法の構築と、多体効果を考慮した粒子間相互作用を高速に計算するアルゴリズムの開発を目指した.

また、近年、研究開発が急速に進展している量子コンピュータの普及期を見据えて、熱流体分野における数値シミュレーションの大規模化・高精度化に資する量子コンピューティングに基づく新規アルゴリズム開発を試みた.

3. 研究の方法

Lennard-Jones 流体の MD シミュレーションから統計量を抽出し、多体性を考慮した粗視化シミュレーションモデルを構築する方法について検討した. 図 1 に示すように、系内の Lennard-Jones 粒子を一定の個数ごとにグループ分けしたクラスタを定義し、クラスタの重心運動を粗視化粒子の運動と考えた. クラスタ間に作用する力は、それぞれのクラスタに属する Lennard-Jones 粒子間の相互作用の合力として評価した. クラスタ間にはたらく力は、着目している 2 つのクラスタの相対位置のみではなく、周囲の他のクラスタの影響により変化する. このような多体性を表現するために、着目するクラスタの周囲に存在する複数のクラスタの影響を表現する分布を導入した.

MD シミュレーションからクラスタに作用する力とクラスタの周囲環境を表現する分布を取得し、これらの関係を表現するモデルについて検討を行った. さらにモデルに現れる多数のパラメータを効率的に最適化するために、量子アニーリングの適用を検討した.

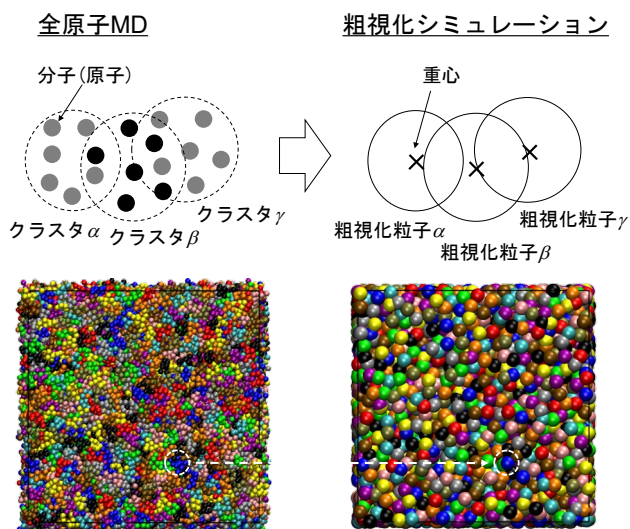
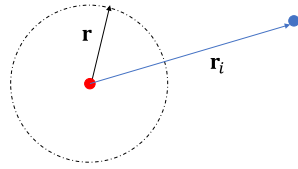


図1 粗視化シミュレーションモデルの構築

4. 研究成果

(1) 量子アニーリングによる粗視化モデルパラメータ最適化手法の検討

上で述べた粗視化粒子間相互作用の多体性を表現するために、着目するクラスタの周囲に存在するクラスタの影響を立体角上に射影した分布を導入した. 具体的には、図 2 に示すように、周囲のクラスタの方位に適切な強度と広がりを持たせたガウス分布を配置することで分布を作成する. その分布を球面調和関数により展開し、各次数、位数の分布に対応してクラスタに作用する力の平均値を求める方針を採った. クラスタに作用する力を各次数、位数の寄与に分離するために、相互作用モデルを QUBO (Quadratic unconstrained binary optimization)形式で定式化し、量



Red particle : center cluster
Blue particle : neighbor cluster (i cluster)

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \exp(-\alpha|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2)$$

\mathbf{r} : the vector from the center cluster
 \mathbf{r}_i : the vector to i cluster from center cluster

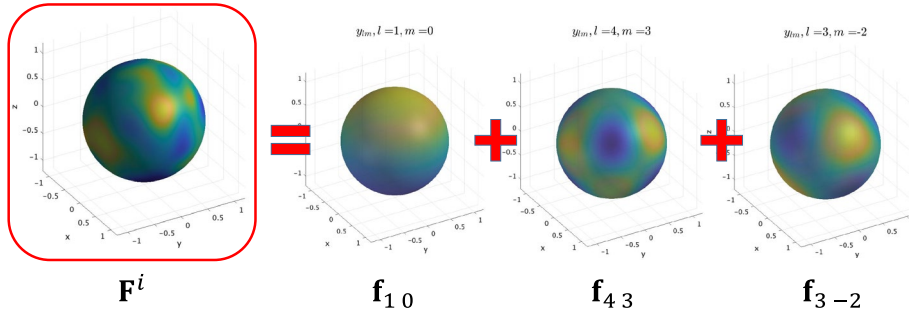


図2 クラスタ周囲環境の表現と相互作用モデルの構築

子アニーリングシミュレータを用いて各次数，位数の寄与を分離することを試みた．クラスタに作用する力の向きと大きさは，複数のバイナリ変数によって表現される（例えば，5ビットを用いるのであれば，相互作用の強さが $2^5 = 32$ 段階で表される）．本研究の目的は，将来の量子コンピュータ普及期を見据えたアルゴリズム開発であることから，パラメータ最適化には通常のワークステーションで動作する量子アニーリングシミュレータを用いた．ただし，手法の検証のために，一部の計算は D-Wave Systems 社が提供しているクラウドサービスを利用して評価を行った．現状では十分に収束した結果を得ることが困難であるという問題があるが，相互作用モデルの構築方法について見通しを得ることができた．

(2) 粗視化粒子の周囲環境を表現する方法の検討

前項で採用した粗視化粒子の周囲環境の表現方法では，球面調和関数の次数 $l = 1$ のモードのみに対して粗視化粒子間に力が作用し，高次のモードからの寄与が生じないため，複数のモードに分解することによる利点が活かされていないという問題がある．そこで，粗視化粒子の周囲環境を表現する方法について，SOAP (Smooth overlap of atomic positions) カーネル[5]を用いたモデリング方法について検討を行った．

<引用文献>

- [1] Y. Yoshimoto, I. Kinefuchi, T. Mima, A. Fukushima, T. Tokumasu, S. Takagi, *Phys. Rev. E* **88**, 043305 (2013).
- [2] Y. Yoshimoto, Z. Li, I. Kinefuchi, G. Karniadakis, *J. Chem. Phys.* **147**, 244110 (2017).
- [3] 木原 玄悟, 吉本 勇太, 堀 琢磨, 高木 周, 杵淵 郁也, *日本機械学会論文集* **84**, 18-00193 (2018).
- [4] D. Reith, M. Pütz, F. Müller-Plathe, *J. Comput. Chem.* **24**, 1624 (2003).
- [5] A. P. Bartók, R. Kondor, G. Csányi, *Phys. Rev. B* **87**, 184115 (2013).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 中村 友翼, 吉本 勇太, 高木 周, 杵淵 郁也
2. 発表標題 非マルコフ散逸粒子動力学における多体効果の表現方法の検討
3. 学会等名 日本機械学会 2022年度年次大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	吉本 勇太 (Yoshimoto Yuta) (90772137)	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・助教 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------