

CPUとGPUを同時利用する自己学習モンテカルロ法の開発

YN, M. Okumura, K. Kobayashi, and M. Shiga, "Self-learning Hybrid Monte Carlo: A First-principles Approach", Phys. Rev. B 102, 041124(R) (2020)
K. Kobayashi, YN, M. Itakura, and M. Shiga, J. Chem. Phys. 155, 034106 (2021)

東京大学 情報基盤センター 学際情報科学研究部門

永井佑紀



SLHMCを使おう

自己学習ハイブリッドモンテカルロ法(SLHMC)は機械学習ポテンシャルをシミュレーションの最中に自動的に最適化します。シミュレーションの結果の精度は元のシミュレーション精度(第一原理計算精度)と同じになります



自己学習ハイブリッドモンテカルロ法 (SLHMC)

YN, M. Okumura, K. Kobayashi, and M. Shiga, "Self-learning Hybrid Monte Carlo: A First-principles Approach", Phys. Rev. B 102, 041124(R) (2020)

- 厳密:** 第一原理計算の精度を保ちつつ機械学習により大幅に高速
- オンザフライ:** 機械学習ポテンシャルはシミュレーションの間に自動的に最適化

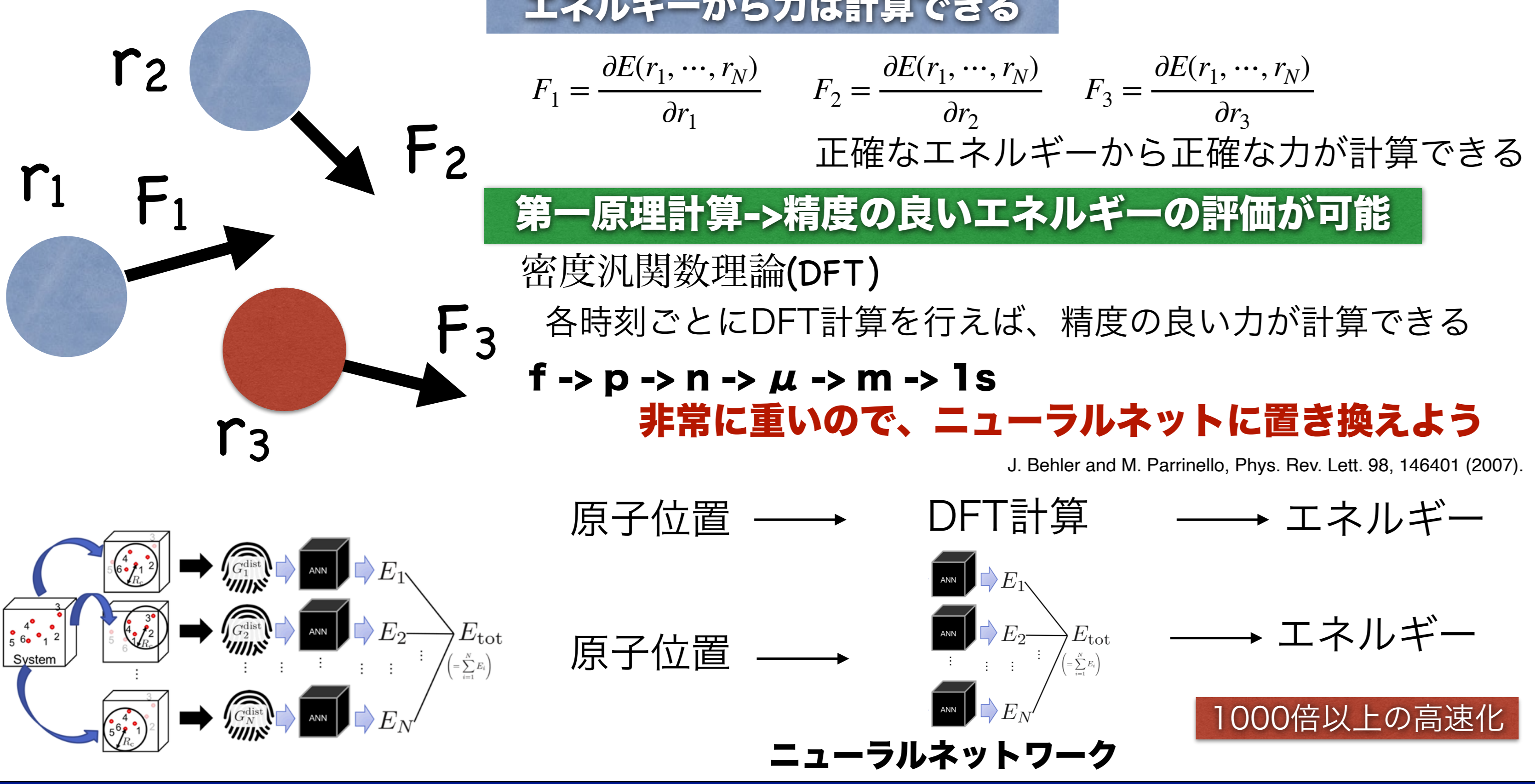
SLHMCを使うと嬉しい時

- 第一原理計算レベルの精度の計算をしたいが第一原理MDの計算コストが大きすぎて断念してしまっている時
- 機械学習MDのための高精度なニューラルネットワークを構築したい時

Train by Run

Train and Run

機械学習分子動力学法 (MLMD)



機械学習MDの問題点について

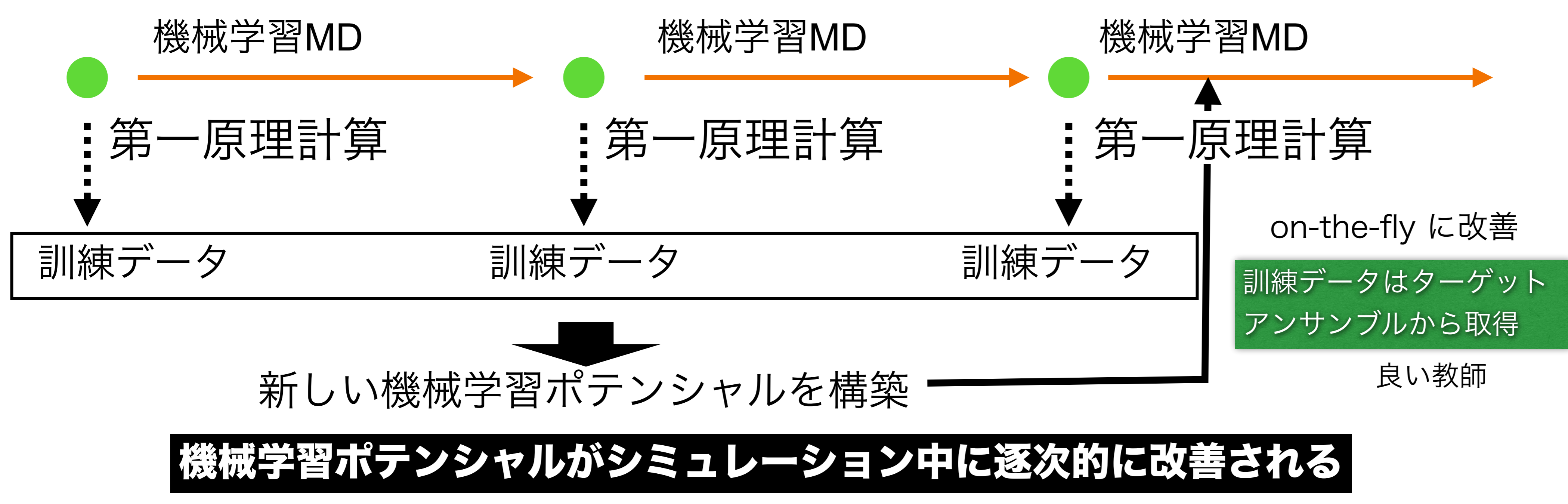
訓練データはどうやって集めるのか?
様々な構造で第一原理計算を行う->訓練データが集まる

問題点1: どんな構造を入れるべき(構造候補は無数にある)

問題点2: どのくらいの数の訓練データを集めれば、やりたいシミュレーションを再現するに足る十分な数だと結論づけられるのか?
1000? 10000? 100000?

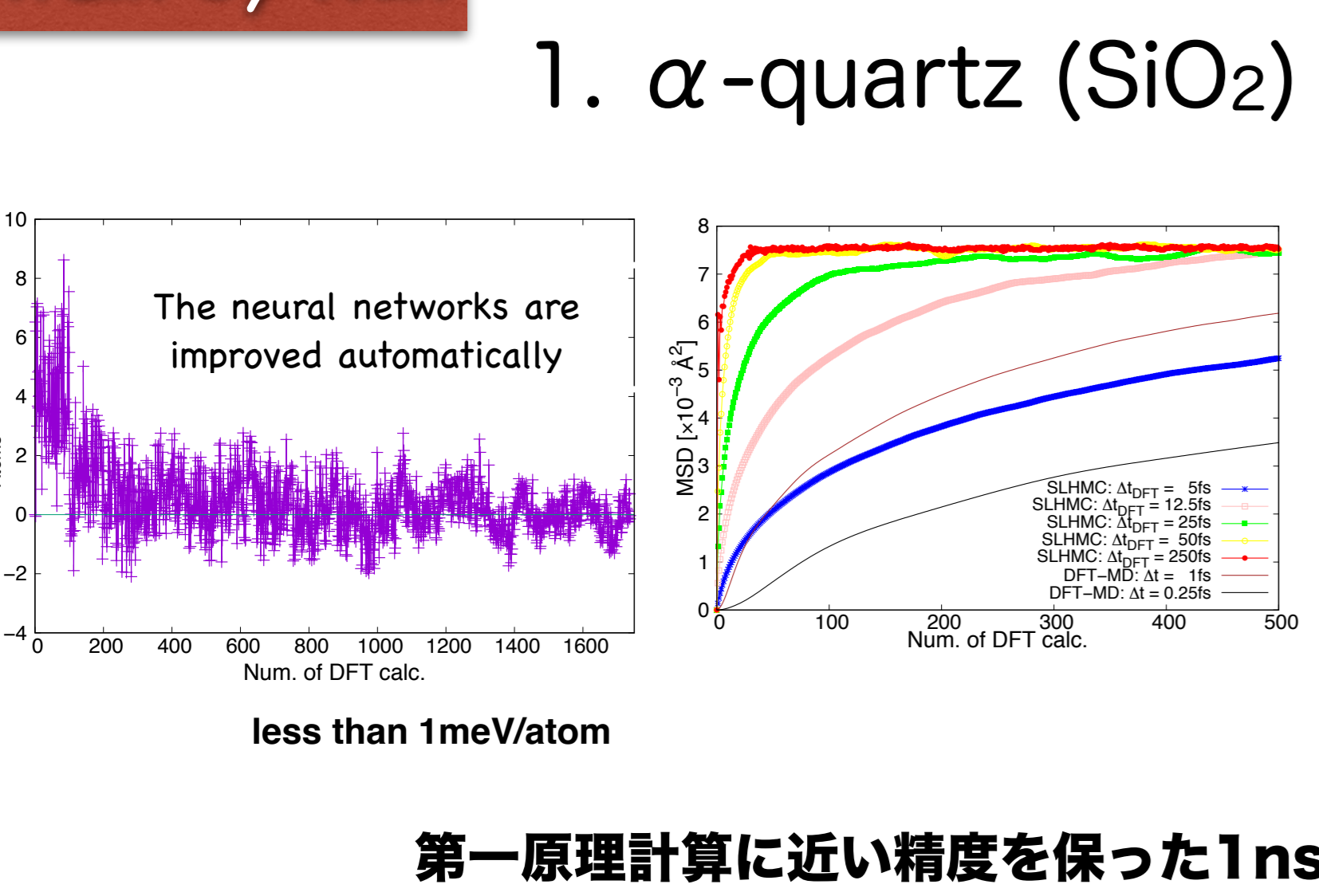
問題点3: 出来上がったニューラルネットワークは本当に使っても大丈夫なのか?

ニューラルネットワークの精度の良し悪しに振り回されたくないですね!!!

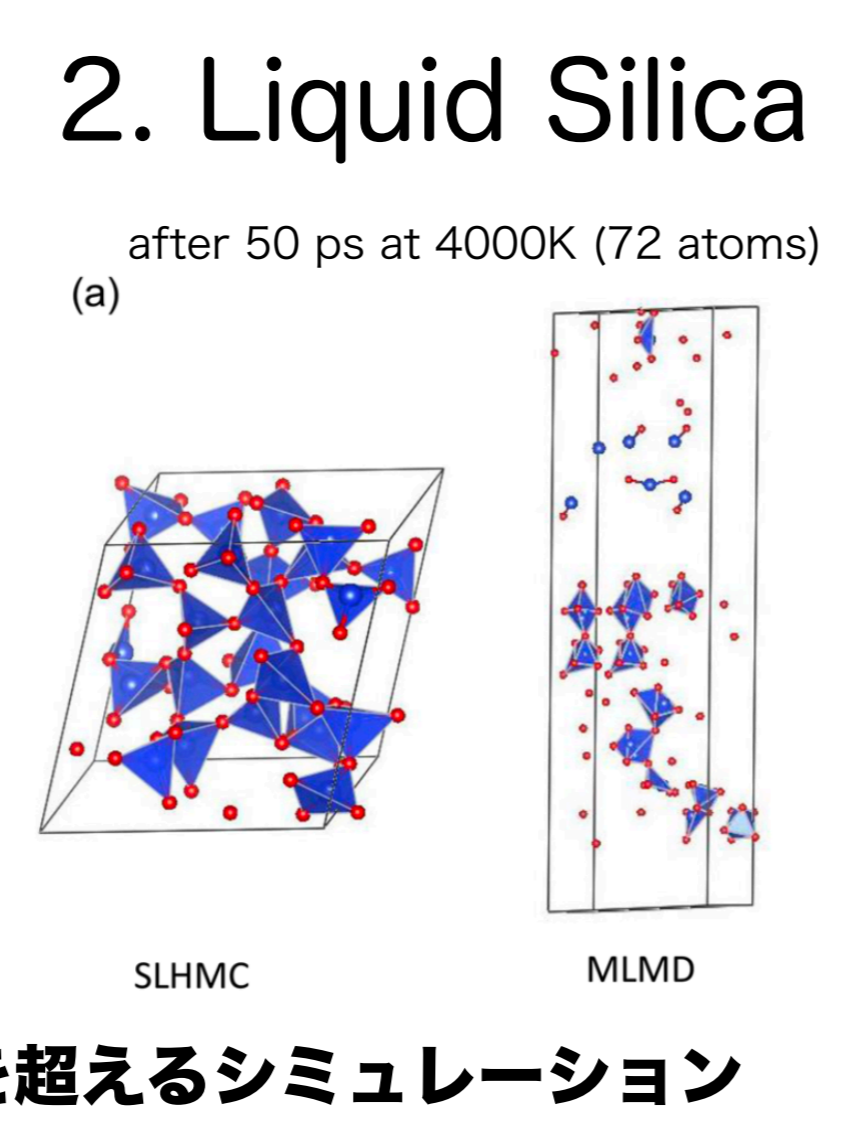


研究目的
シミュレーションパートと機械学習はそれぞれ異なるアーキテクチャで計算ができるはず
シミュレーションをCPU、機械学習をGPUで同時に動かす: Wisteria: Odyssey+ Aquariusのコードを作成する
PIMD-aenet-Pytorch
PIMD-NequIP を開発する

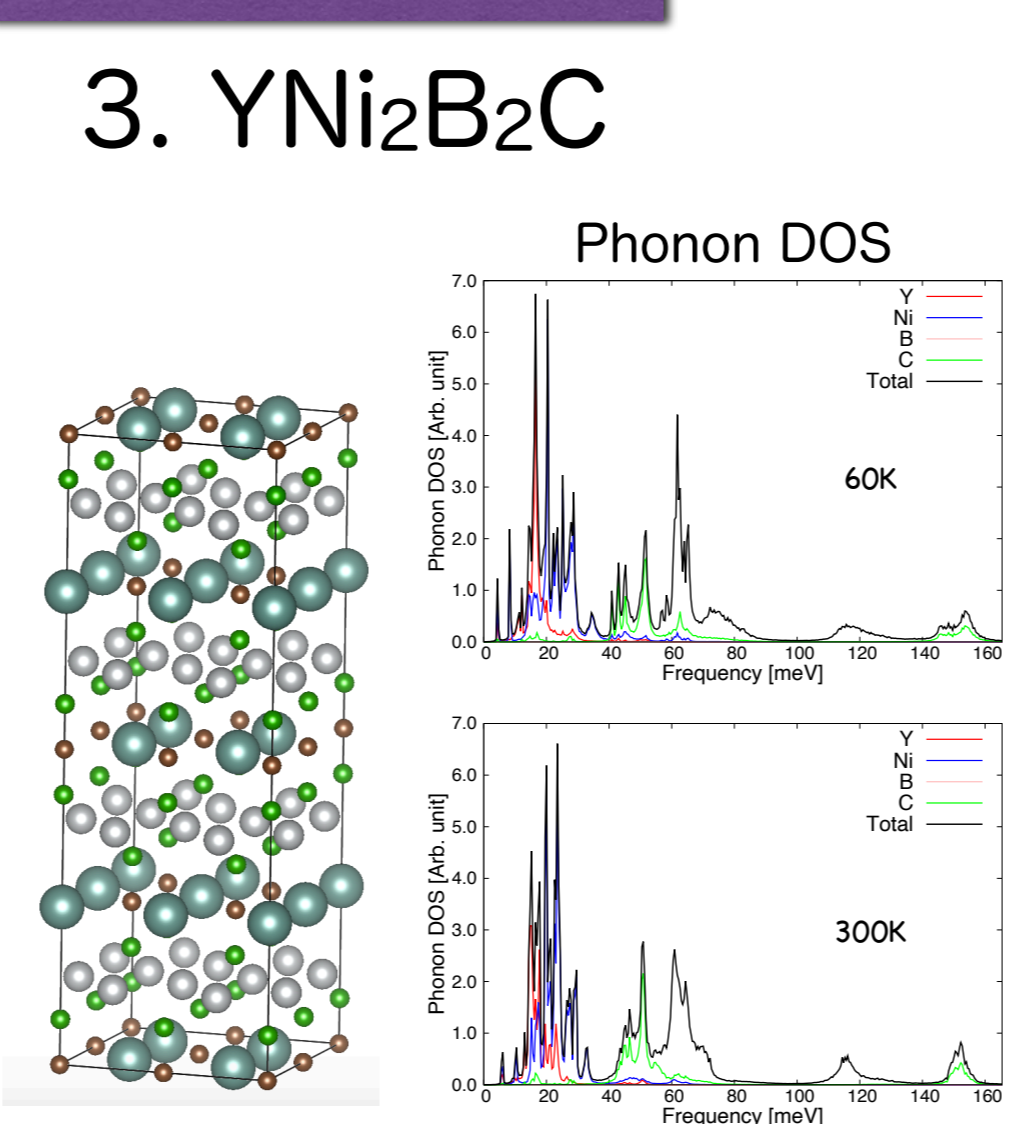
Train by Run



Train and Run



Train and Run



Train and Run

