

有機溶媒の第一原理MDと機械学習力場MDの検証

大阪大学工学研究科日本触媒協働研究所

石塚 良介

目的 近年急速に発展している機械学習力場MDを有機溶媒の液体構造解析に応用し、高精度な第一原理MDの結果をどれだけ再現できるのかを検証する。

内容 機械学習力場と第一原理MDを有機溶媒に応用し、動径分布関数を計算した。

結果 機械学習力場MDは第一原理MDから得られた液体構造を正確に再現した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	100,000 時間
使用メモリ	250 GB
並列化	20ノード 並列

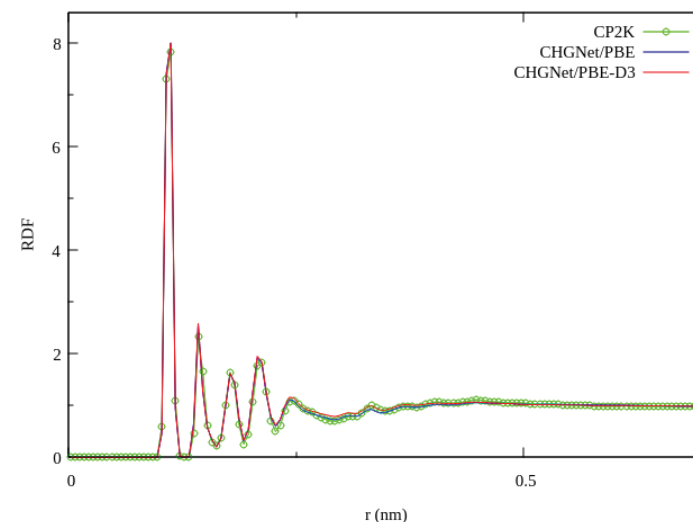


図 有機溶媒の動径分布関数