

課題名 (タイトル) :

人工知能による機能性有機分子の設計

利用者氏名 :

○隅田 真人^{1,2}楊 秀鋒²

理研での所属研究室名 : 1.革新知能統合研究センター 富士通連携センター

2.革新知能統合研究センター 目的指向基盤技術研究グループ 分子情報科学チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

有機分子は、多様な機能とコストの低さから様々な材料としての応用が期待されている。これまで設計された機能性分子の多くは人間の直感と、試行錯誤によるものが多く、労力と時間のかかるものであった。しかし、人工知能による分子設計は、データのみ依存し、人間の偏見をできる限り排除した分子設計が可能になると期待できる。

機能性分子設計において重要になるのは、分子の量子力学的性質であり、人工知能に量子力学的性質を最適化される必要がある。そこで、本研究の目的は、近似的に分子のシュレディンガー波動方程式を解くソフト (GAUSSIAN) を人工知能に使用させ、量子力学的性質を最適化した分子の設計を行うことにある。

2. 具体的な利用内容、計算方法

HOKUSAI にイントールされている GAUSSIAN (<http://gaussian.com>) を人工知能に使用させ、物理量を算出し、最適な分子を探索させた。人工知能には 10 万程度の分子情報を前もって学習させた。分子設計の人工知能には ChemTS (<https://github.com/tsudalab/ChemTS>) を利用した。

3. 結果

予備計算の段階で HOKUSAI における計算速度が異常に遅いことが判明し、利用を断念した。例えば、SGI 社(現 HP 社)のスーパーコンピューター (CPU: Intel Xeon E5-3680v3 12 core 2.5 GHz*2/node, Memory: DDR4 128 GB 2133 MHz) では二日間 (48 時間) で 30 原子程度で構成された分子の探索が 800 回以上終了する。これに対して、HOKUSAI ではわずか 48 回しか探索が進まなかつ

た。無作為に出てくる分子の量子力学的性質を大量に算出するには計算速度が明らかに不足していた。

4. まとめ

人工知能はシングルプロセッサでありながら十分な速度を発揮したが、分子のシュレディンガー波動方程式を近似的に解くソフト (GAUSSIAN) の速度が上がらず、思った以上に成果が出なかった。

5. 今後の計画・展望

ChemTS の並列化を進め、同時に複数の分子の計算が行えるようにする。また、様々な物理量を最適化できるように AI に GAUSSIAN の使い方を学ばせたい。利用するスーパーコンピューターは再検討する。