

深層強化学習による二次元モデルポテンシャル上での 反応経路探索

(阪大院理¹) ○橘川武知, 山中秀介¹, 川上貴資¹, 奥村光隆¹

Reaction pathway search on two-dimensional model potential by deep reinforcement learning
(¹ Graduate School of Science, Osaka University) ○Takechika Kikkawa¹, Shusuke Yamanaka¹, Takashi Kawakami¹, Mitsutaka Okumura¹

Finding transition state and reaction pathway which is determined straightforwardly from transition state are important to reveal the activation energy and the structural and electronic structural change. Many reaction pathway search methods that find transition states have been suggested which utilize the local information of potential energy surface so far. In addition, machine learning has been lively employed in the area of computational chemistry including reaction pathway search methods. Some supervised learning models for finding transition state are suggested. However, considering the amount of dataset of transition state is not enough, reinforcement learning that does not require dataset is also promising.

In this study, we suggest the new reaction pathway search method by deep reinforcement learning. The reinforcement learning model utilizes the local information of potential energy surface as with conventional methods. It predicts the direction of reaction pathway by neural networks and obtains the strategy to reach the transition states. As a first step toward applying to the real molecule, we trained the reinforcement learning model on two-dimensional model potential surfaces. In addition, the effect of lacking the local information on the performance and the transferability of the reinforcement learning model were also investigated.

Keyword : Reaction pathway search, Machine learning, Deep reinforcement learning

計算化学において遷移状態とその反応経路を特定することは、活性化障壁を明らかにするために重要である。これまで平衡構造から出発しポテンシャル平面の局所的情報(勾配やヘシアン)を利用して遷移状態までたどり着く様々な手法が提案されてきた。また近年、計算化学において機械学習が成果を挙げており、反応経路探索でも教師あり学習法が複数提案されている。しかし反応経路の教師データは不足しており、教師あり学習はその性能が教師データに依存することから、教師データが不要な強化学習による手法が有望であると言える。

そこで本研究では深層強化学習による反応経路探索法を提案する。本手法では、学習モデルは従来の計算化学的方法と同じくポテンシャル平面の局所的情報を利用して、深層学習器から反応経路の方向を推定し、遷移状態にたどり着くような戦略を獲得する。今回はその第一歩として二次元モデルポテンシャル平面を扱い、遷移状態探索に対する強化学習モデルの基本設計を検証・確立した。まずモデルに与える局所的情報を制限することにより各情報の重要性を検証した。さらにある平面で獲得した戦略を別の平面に転用することで学習効率を高める転移学習効果についても調査した。結果の詳細は当日発表する。