

低コストの FMO 計算からの定量的相互作用エネルギー算定の試み-#2

Calculation of quantitative interaction energy from low-cost FMO calculations

by machine learning – part 2

立教大理¹, (株)JSOL², 東大生産研³

○芳根僚平¹, 土居英男¹, 松岡壮太¹, 奥脇弘次^{1,2}, 望月祐志^{1,3},

Rikkyo Univ.¹, JSOL Corp.², Univ. Tokyo.³

○Ryohei Yoshine¹, Hideo Doi¹, Sota Matsuoka¹, Koji Okuwaki^{1,2}, Yuji Mochizuki^{1,3}

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】 近年、相互作用ダイナミクスを理解するために、古典分子動力学(MM-MD)とフラグメント分子軌道法(FMO)[1]を連携し、多数の構造サンプルを計算して揺らぎを考慮した動的・統計的な相互作用解析が行われています。しかし、実際には MD 軌跡由来の 100 構造程度の液滴モデルの FMO 計算を実行するため、ルーチ的な処理には「富岳」等スパコンの大きな計算リソースが必要です。そこで、機械学習を用い、低コスト基底関数の FMO 計算結果から高コスト基底関数による相互作用エネルギーを予測し、要求計算リソース削減を目指すプロジェクトを進めています。今回は、6-31G*および cc-pVDZ の相互作用エネルギーを 3-21G から予測した結果を報告します。

【手法】 今回は 10 残基ペプチドの Chignolin を対象としました。GROMACS[2]で 100ns の MM-MD シミュレーションを行い、1~100 ns の構造を 1ns ごとに切り出した全 100 構造に対し ABINIT-MP[3]による FMO 計算を実施しました。使用した基底関数は 3-21G, 6-31G*, cc-pVDZ の 3 種類で、以下の手順で予測を行いました。(I) 3-21G で 100 構造分、6-31G*または cc-pVDZ で 70

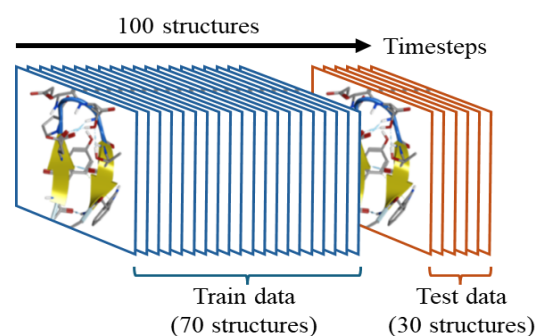


図 1. データセットのイメージと分割方法

構造分の FMO 計算を実施。(II) 両基底関数で計算した 70 構造を教師データとし、残り 30 構造の 6-31G*または cc-pVDZ を用いた FMO 計算結果を予測 (図 1)。機械学習には、3-21G による FMO 計算結果に加え、タイムステップごとに得られる構造情報を基に距離記述子を生成したデータセットを使用しました。アルゴリズムには Random Forest[4]を採用し、モデルの構築を行いました。

【結果】 3-21G から 6-31G*のエネルギー予測は非常に高精度で、IFIE(修正 MP2 レベル)の R^2 が全アミノ酸残基間で 0.9 以上、末端残基を除く MAE は 1 kcal/mol 程度でした。一方、3-21G から cc-pVDZ のエネルギー予測では一部成分に課題が残りました。詳細は当日発表します。

【謝辞】 今回のプロジェクトは JHPCN 課題 jh240001 の活動の一部として進め、FMO 計算は「富岳」の hp240030 課題で行いました。また、立教 SFR からの支援を得ました。

【文献】 [1] Y. Mochizuki, et al., *Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method - Enhanced Performance and Applicability*, Springer, (2021). [2] <<https://www.gromacs.org/>>. [3] S. Tanaka, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 10310 (2014). [4] L. Breiman, *Mach. Learn.* **45**, 5 (2001).