



特定の原子種のみを対象とした 機械学習力場を用いた分子動力学計算の 高速化

発表者 木下 雄功

指導教員 川口 博 教授

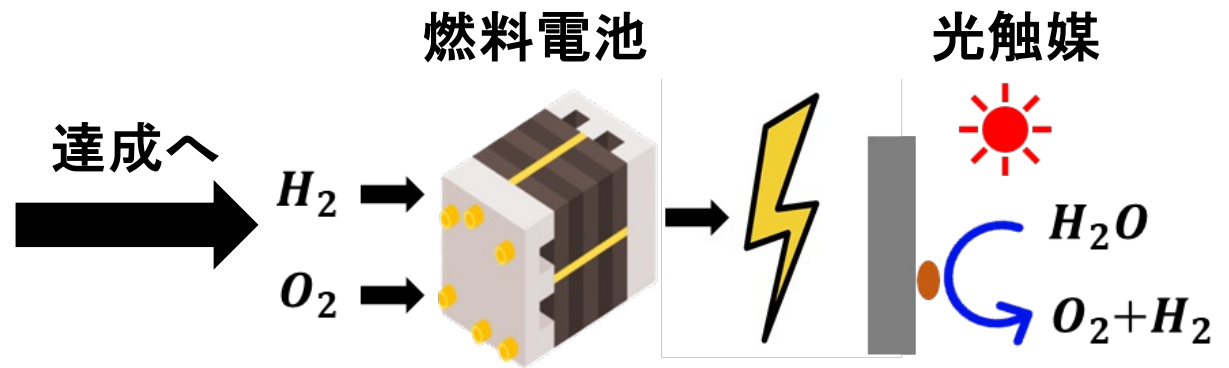
2026年4月23日 研究経過報告会

研究背景

SDGsへの関心の高まり



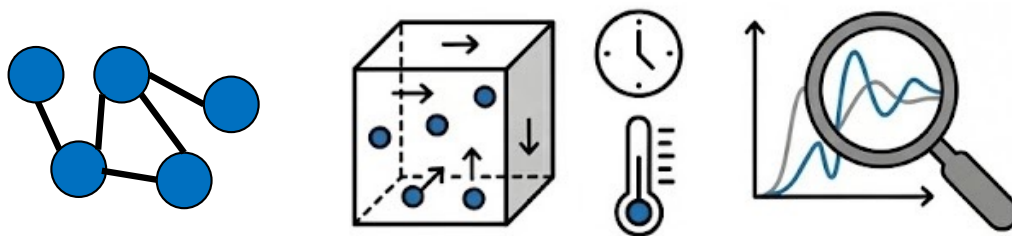
出典: 国際連合 (<https://sdgs.un.org/>)



燃料電池の膜材料・光触媒の開発が**活発化**

近年の材料開発

分子モデル → 分子動力学Sim. → 物性値解析

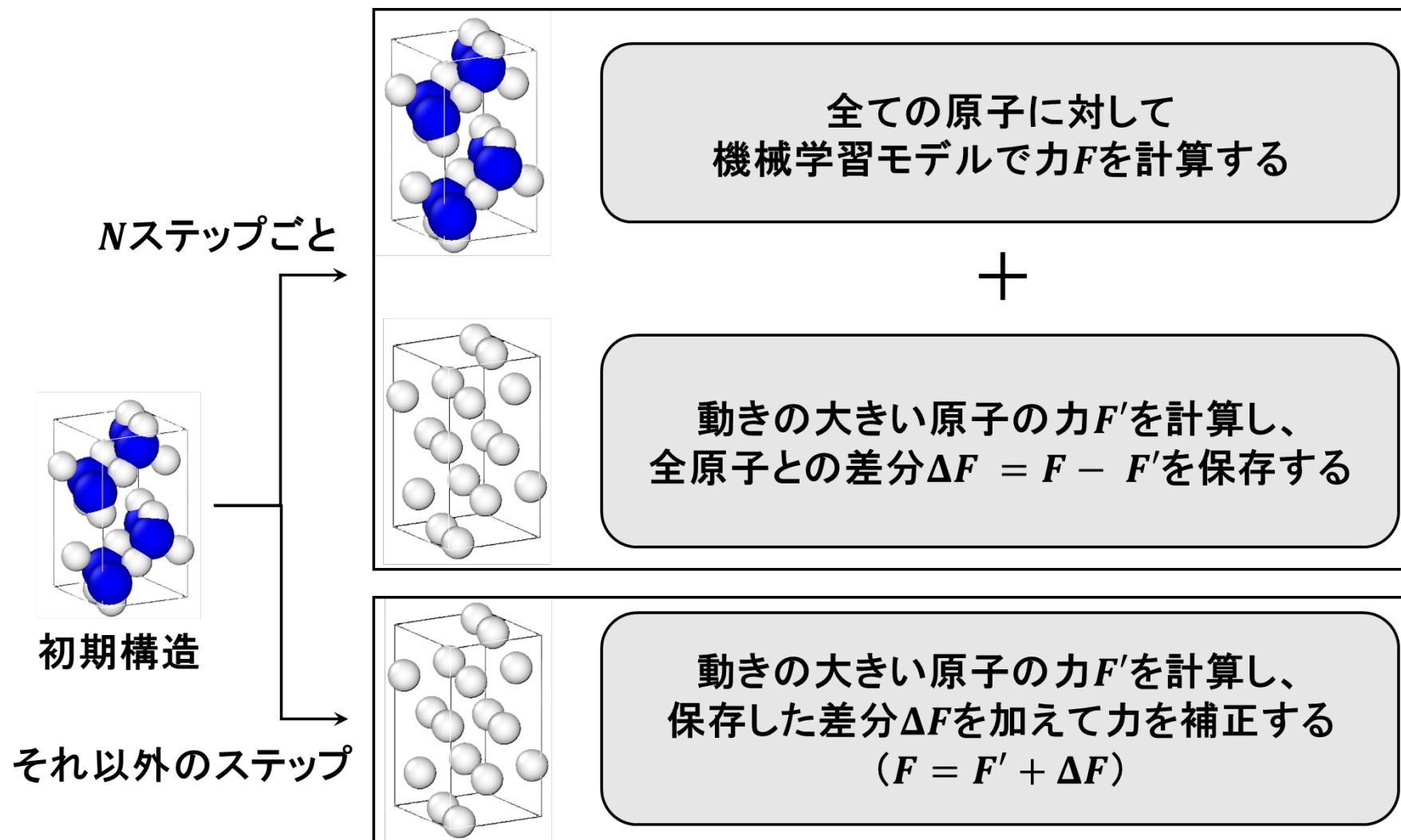


手法	精度	速度
従来の計算モデル	△	◎
機械学習モデル	◎	△

精度の高い機械学習モデルの高速化が課題

研究アプローチ

動きの少ない原子種の推論頻度を下げ、計算コストを削減する



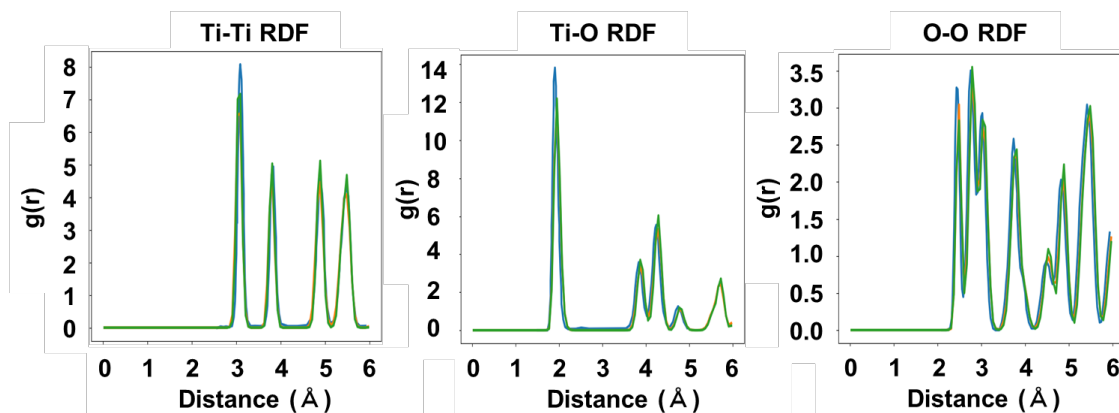
精度を保ちながら、推論コストを削減する

研究結果

精度(原子配置の一致度)

対象: TiO_2 アナターゼ(6144原子)

従来手法と提案手法の比較



	相関係数
Ti-Ti	0.994
Ti-O	0.998
O-O	0.997

提案手法で**同等の**
原子配置を再現

安定性

温度: 300Kで安定推移

密度: 3.8 g/cm^3 で安定推移

速度

1秒あたりのシミュレーション
のタイムステップ数を比較

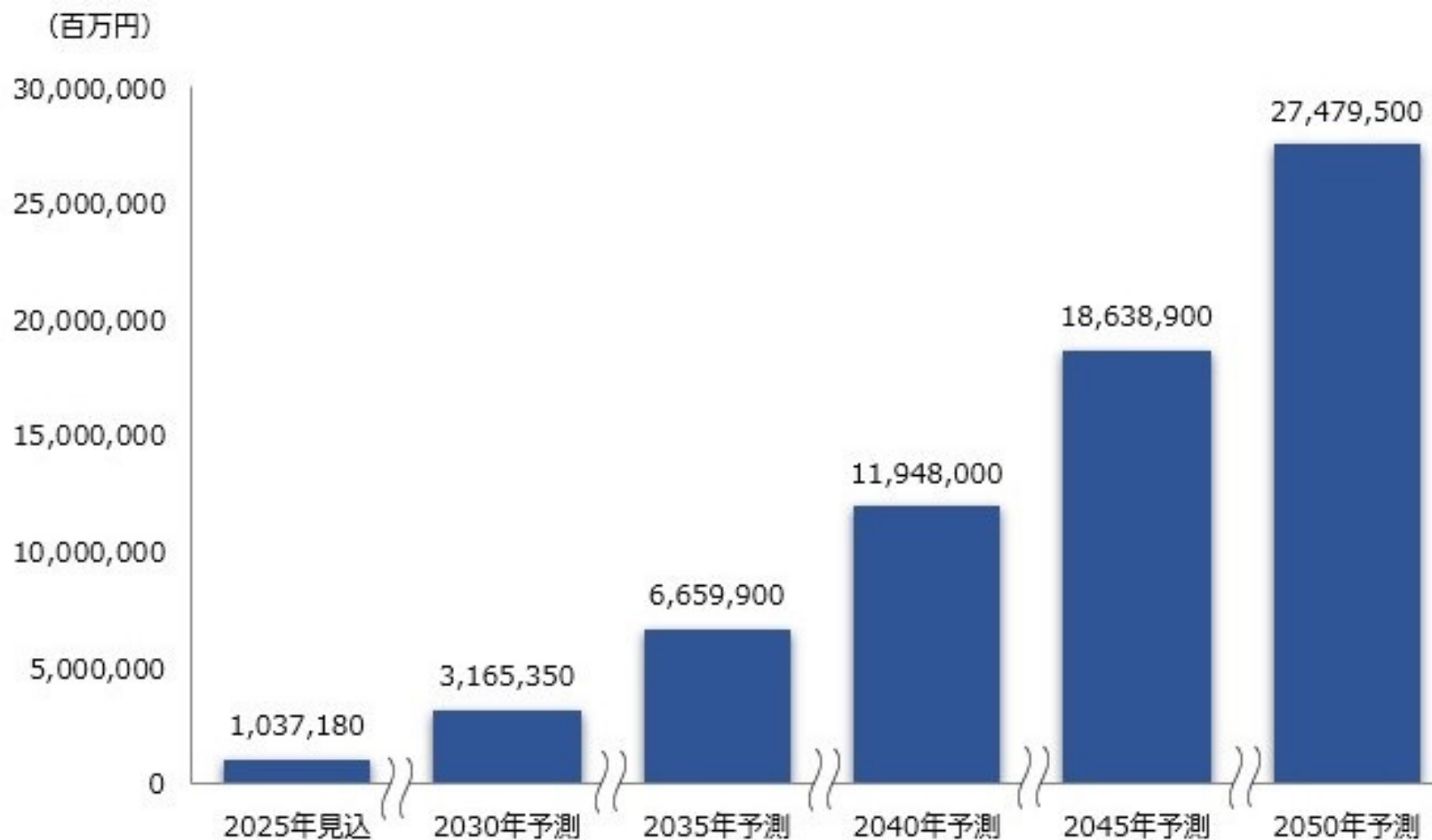
	timesteps/s
従来手法	31.3
提案手法	36.2

提案手法で
約15.7%の速度向上

精度を維持しながら計算速度の向上を確認

事業化の可能性に関する考察

計算科学を活用した材料開発市場は2050年に約27倍に拡大
シミュレーション高速化技術としての本手法の需要が見込まれる



マテリアルDXの世界市場規模予測

https://www.yano.co.jp/press-release/show/press_id/4047

市場規模の拡大は目覚ましく、**事業化の可能性は高い**