

2021 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

| | |
|--------|--------------------------------|
| 研究担当者 | 笠松 秀輔 |
| 研究機関名 | 山形大学 |
| 所属部署名 | 学術研究院 |
| 役職名 | 助教 |
| 研究課題名 | 不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開 |
| 研究実施期間 | 2021 年 4 月 1 日～2022 年 3 月 31 日 |

研究成果の概要

不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開を阻んでいるのは、原子配置の組み合わせ爆発である。これに対応するためには多種多様な原子配置に対してエネルギーを高速かつ高精度に計算できる必要がある。第一原理計算は高精度であるが計算コストも高いため、この目的には適さない。そこで、第一原理計算を再現するように訓練した機械学習ポテンシャルを用いるというアプローチが有望視されている。しかしながら、多元素かつ不規則な構造を有する材料系では、学習の基となる第一原理計算データの十分な集積が困難であり、適用例も限られている。これを克服し、不規則材料系における原子の並び方の規則性・不規則性を高速に予測するためのシミュレーションフレームワークを開発するのが本課題のフェーズ 1 における主要な目的である。

不規則材料系的一种であるアモルファス系については、Behler, Parinello らが提案したニューラルネットワーク力場 (NNP) の訓練方法について検討を進めた。低コスト計算で学習すべき構造をあらかじめバランス良く生成し、スーパーコンピュータを用いた高スループット計算と組み合わせることで、第一原理計算の中でも高計算コストな手法 (ハイブリッド汎関数) を再現するポテンシャルの構築に成功した。また、NNP を使って行った分子動力学計算の軌跡の一部を第一原理で再計算し、学習データに追加して NNP を更新する能動学習サイクルのプログラム実装も行い、混合ガラス系への対応を進めている。

多元結晶系については、理想格子上の原子配置から、歪みを考慮した後のエネルギーを予測する on-lattice NNP スキームを開発した。この on-lattice NNP モデルと、第一原理計算データの高速・自動生成、および統計熱力学計算 (レプリカ交換モンテカルロ法) を組み合わせた能動学習サイクルをオープンソースフレームワーク abICS に実装し、第一原理計算に対する 10000 倍以上の加速を実証した。