

2023 年度年次報告書
力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究代表者

南谷 英美

大阪大学 産業科学研究所
教授

構造トポロジー情報を応用した靱やかな機械学習力場の構築

研究成果の概要

パーシステントホモロジー群の計算から得られるパーシステンス図を入力として、アモルファスカーボンにおけるポテンシャルエネルギーを予測する機械学習モデルを開発した。

パーシステンス図は、原子の入れ替え、系の回転・並進操作に対して不変であり、ポテンシャルエネルギーに要請される対称性を満たしている。このような対称性を満たし、ポテンシャルエネルギーの予測に応用できる構造の記述子としては、他に、対称性関数や smooth overlap of atomic position などが存在する。また、近年では、グラフニューラルネットワークを応用することで、記述子を機械学習モデル内でチューニングする方法も提案されている。しかし、前者については記述子を計算する際に定める多数のパラメータ(ハイパーパラメータ)をチューニングする必要があること、後者についてはモデルの構造が複雑になるという問題が存在する。パーシステンス図の計算にはハイパーパラメータは存在せず、また、リッジ回帰などのシンプルな学習モデルでも十分な予測性能が達成できることが確認でき、これらの問題を解決できることが示せた。

力学特性に対するパーシステントホモロジーの応用としては、アモルファス Si におけるシア弾性定数とパーシステンス図の相関解析を進めている。相関解析に用いるデータセットの精度を高めるために、まず、シア弾性率を解析的に求めるコードを実装した。さらに、展開先を広げるために各種の多体ポテンシャルについて、自動微分を可能にする計算パッケージを作成した。

実装したコードを用いて、アモルファス Si でのシア弾性定数を様々な冷却速度で作成した構造について求め、冷却レートによる構造の違いをパーシステンス図で捉え、その結果からシア弾性定数を予測できる機械学習モデルが実現できることが示せた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) E. Minamitani, I. Obayashi, K. Shimizu, S. Watanabe, ‘Persistent homology-based descriptor for machine-learning potential of amorphous structures’, J. Chem. Phys., 159, 084101, (2023)