

力学機能のナノエンジニアリング  
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

松中 大介

信州大学 学術研究院  
准教授

第一原理機械学習手法によるナノ異材界面の力学特性の解明

## § 1. 研究成果の概要

2021 度は、異材界面系の原子間ポテンシャルの開発スキームの確立に関して、人工ニューラルネットワーク(ANN)原子間ポテンシャルの基底関数の影響の検討と適切なリファレンスデータの検証を実施した。本研究では、複雑な異材界面の電子状態の情報を含む第一原理計算のデータを原子間ポテンシャルに集約するために、普遍性定理によって表現能力が保障されている ANN の枠組みを採用し、原子中心対称関数などの局所的な原子配列に関する記述子を用いる。まず、ANN 原子間ポテンシャルの適用対象の系の構造に対して適切な記述子を決定する方法論として CUR 分解による選定法を検討した。また、動径分布および角度分布の第 1 種チェビシエフ多項式展開を用いた記述子とポテンシャルの性能について検討した。ANN 原子間ポテンシャルの学習におけるリファレンスデータに関しては、種々の基本的な構造のデータを考え、Al 単元系の弾性定数、フォノン分散、転位構造を第一原理計算の結果と良く一致するポテンシャルを作成することができた。また、Wasserstein 計量を用いたデータ間距離の評価から、データ密度とポテンシャルの精度の関係を検討した。さらに、同条件で作成した ANN 原子間ポテンシャルでの原子エネルギーのばらつきに着目してデータ密度が不足している部分を判定し、必要な追加データを決定する方法を考案し、実際に Al/Cu 界面系に対する ANN 原子間ポテンシャル作成に適用して精度を改善することに成功した。