

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

2022年度  
年次報告書

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解析を応用した、アモルファス Si における熱伝導率と局所構造の相関解明についての成果が *The Journal of Chemical Physics* にて出版された<sup>1)</sup>。この内容についてのプレスリリースを行った。さらに、Allen-Feldman 理論を用いた熱伝導率計算や、アモルファス固体における振動特性を議論するために重要となる動的構造因子の計算の機能を組み込んだ python による計算コードを整備して、GitHub 上で公開した

([https://github.com/eminamitani/thermal\\_conductivity\\_code](https://github.com/eminamitani/thermal_conductivity_code))。

この成果から、パーシステントホモロジーが、物性を支配する局所構造と強い相関を持つことを示すことができたため、同様の解析手法を力学特性や、エネルギーの予測に展開することを進めている。

まず、アモルファス Si において、シア弾性率をパーシステントホモロジーから予測できるかどうかという問題に着手した。熱伝導率と同様に、アモルファス Si ではモデル作成時の冷却レートによって、シア弾性率が異なることが確認できた。パーシステントホモロジー解析から得られるパーシステント図の情報から、このシア弾性率を予測できる回帰モデルを作成することもできた。しかし、現在用いている計算方法で得られるシア弾性率は、数値的に厳密なものではないため、議論をより深めるために、解析的な表式を計算コードに実装し比較することが必要である。

エネルギーの予測については、アモルファス C に対して、パーシステントホモロジーの情報を元に、様々な密度のアモルファス構造において、1原子あたりの平均エネルギーを予測できる機械学習モデルを作成することができた。パーシステントホモロジーが炭素原子のネットワーク構造の特徴を効率的に抽出しているためだと考えられるが、他の構造記述子との差異や優位性についての議論を深める必要がある。

### 【代表的な原著論文情報】

1) E. Minamitani, T. Shigam M. Kashiwagi, I. Obayashi, “Topological descriptor of thermal conductivity in amorphous Si”, *J. Phys. Chem.* 156, 244502 (2022)