

平成 30 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2017

課題番号：16K14110

研究課題名(和文)パーセプトロン型原子間相互作用モデルを用いたマルチフィジックスシミュレータの開発

研究課題名(英文)Development of multiphysics simulator using perceptron type interatomic model

研究代表者

梅野 宜崇 (Umeno, Yoshitaka)

東京大学・生産技術研究所・准教授

研究者番号：40314231

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：機能性デバイスの設計を高精度化するために必要とされながらこれまで不可能であった、大規模原子モデルによるマルチフィジックスシミュレーション法を確立することが本研究の目的である。ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network; ANN)の一種であるパーセプトロン型エネルギー関数表現による原子構造(入力値)から原子間結合エネルギーや電子構造の情報(電子状態密度など)を出力するアルゴリズムを構築した。電子状態密度に着目し、エネルギー準位を変数として累積電子状態密度を得るANNモデルの構築に成功した。

研究成果の概要(英文)：This study aimed to establish a scheme of multiphysics simulation for large-scale atomistic models, which had been long-awaited to realize highly accurate design method for functional devices. We constructed an algorithm to output interatomic energy and information of electron structures (e.g. electron density of states) from atomistic structures, based on perceptron-type energy functions, which is one of artificial neural network (ANN) models. We focused on electron density of states and succeeded in the establishment of an ANN model to obtain integrated electron density of states as a function of electron energy level.

研究分野：計算材料科学、材料力学

キーワード：ナノマイクロ材料力学 原子モデル解析

## 1. 研究開始当初の背景

パワー半導体をはじめとする電子デバイス、電池やエネルギー回収に用いられるエネルギー変換デバイス等、機能性デバイスは広い分野で応用されている。いかに高性能の機能性デバイスを開発できるかがイノベーションのキーである。デバイスの小型化・高集積化が急速に進んでおり、そのデザインのために分子動力学法などの原子モデルを適用すべきスケールレベルまで来ているが、実現していない。

最も大きな問題は、一般的な原子モデルでは電子状態の情報を持たないため、材料の機能性の評価ができないことである。量子力学計算を用いれば可能であるが極めて高コストでありデバイス設計に応用することは非現実的である。機能性材料は、ひずみによって物理的諸物性（電導性、磁性等）が変化するが、これを正しくモデリングする、すなわち電子状態の情報を含み電導性や磁性などの物性を表現可能な全く新しいポテンシャル関数が必要である。

## 2. 研究の目的

機能性デバイスの設計を高精度化するために必要とされながらこれまで不可能であった、大規模原子モデルによるマルチフィジックスシミュレーション法を確立することが本研究の目的である。波動関数を陽に扱ってその状態を求める量子力学計算を伴わず、原子構造から直接電子状態の情報を予測できるマルチフィジックスポテンシャル関数の構築を主眼とする。

ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network; ANN)の一種であるパーセプトロン型エネルギー関数表現は文字や形状を認識してエネルギー値を出力するものであり、原子構造を入力情報として構造エネルギーや物性値を出力するという原子間ポテンシャルと類似性がある。これを応用し、原子構造(入力値)から原子間結合エネルギーや電子状態の情報(電子状態密度など)を出力するアルゴリズムを構築する。すなわち、ここで言うマルチフィジックスポテンシャル関数とは、原子構造から電子状態を予測する ANN モデルを指す。

## 3. 研究の方法

(1) 密度汎関数理論に基づいた第一原理計算によって、モデル構築のターゲットとなるリファレンスデータを集積する。最安定構造を中心として、変形や変位を与えた構造を多数作成し、構造と諸物理量(構造エネルギー、原子間力、電子状態密度等)の関係をリファレンスデータとして求める。この際、非現実的な構造についても一定量のリファレンスデータを作成する。2 元系以上の材料(例えば SiC)の場合には単体の構造(Si, C)の構造もリファレンスデータに含める。

(2) リファレンスデータを再現できるように機械学習によってパーセプトロン型 ANN モデルの重みづけパラメータを最適化する。電子状態を表現する物理量として重要な電子状態密度、すなわちエネルギー準位を変数とする電子状態の密度の関数表現を主なターゲットとし、様々な原子構造から電子状態密度関数への写像を再現する ANN モデルを構築する。リファレンスデータのうち一定量を無作為抽出してテストデータセットとして用い、ポテンシャル関数の環境非依存性を確保する。

(3) 構築されたポテンシャル関数の妥当性・安定性について詳細な検討を行う。様々なリファレンス構造(ひずみを受ける理想結晶、欠陥を含む構造、相変態による多様な結晶構造)に対してポテンシャル関数が発散などせず安定して機能し、かつ目的とする物性を精度よく出力することを確認する。また、上記のマルチフィジックスポテンシャル構築の枠組みが多様な材料にも適用できることを確認する。

## 4. 研究成果

4.1 電子状態密度モデリングの基本方針 本研究では、電子状態密度を直接再現するのではなく、電子状態密度の累積分布関数(原始関数)である累積電子状態密度(Integrated DoS あるいは IDoS)を再現する ANN を構築する。これは、積分値である I 電子状態密度のほうが、電子状態密度の計算精度およびフィッティング誤差の影響を受けにくいものである。電子状態密度自体は、得られた I 電子状態密度を数値的に微分することで求めることができる。

本研究での主たる興味の対象は、原子構造  $s \in S$  ( $S$  は原子構造全体の集合) に I 電子状態密度関数  $D = D(\mathcal{E}) \in \mathbf{R}^R$  を対応づける写像  $\psi$  を、ANN によって模擬することである。写像  $\psi$  の模式図を Fig. 1(a) に示す。素朴には、この ANN の出力は実関数であるが、関数を出力する ANN を構成することは技術的困難を伴う。そこで本研究では、以下の方法で近似的な I 電子状態密度の構成を試みる。いま、エネルギー  $\mathcal{E}$  に対する  $N$  個のサンプリング点  $\mathcal{E}_n$  ( $n = 1, \dots, N$ ) をとり、各  $\mathcal{E}_n$  での  $D(\mathcal{E}_n)$  を用いて  $D(\mathcal{E})$  全体を再現できると仮定する。すると  $\psi$  は、原子構造  $s$  から  $D(\mathcal{E}_1), \dots, D(\mathcal{E}_N)$  への写像  $\psi_1, \dots, \psi_N$  という形に分解でき (Fig. 1(b)), 各  $\psi_n$  を模擬する  $N$  個の ANN を構築すれば IDoS および DoS を再現できる。ここで、各  $\psi_n$  は、ポテンシャル関数と同様に、原子構造  $S$  から実数  $\mathbf{R}$  への写像である。原理的には ANN を用いれば任意の関数を再現できる<sup>エラ</sup>  
ー! 参照元が見つかりません。ことから、 $\psi_n$  も原子間ポ

テンソル関数と同一の枠組みで構築することが可能であると考えられる。本研究では  $\mathcal{E} = -10 \sim 30$  eV の区間で 1 eV ごとにサンプリング点を与えた。すなわち、構築すべき ANN の個数は 41 個である。

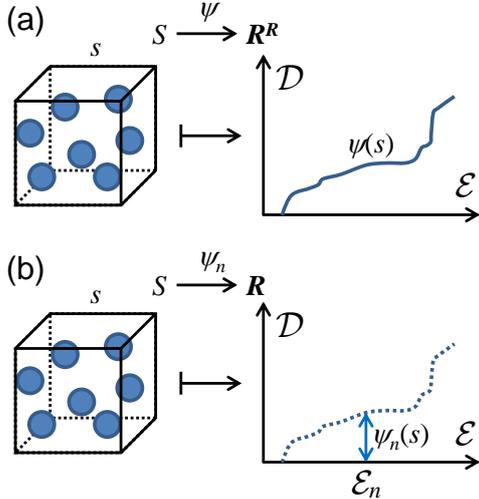


Fig. 1: Schematic illustrations of (a) mapping  $\psi$  from atomistic structure  $s$  to IDoS function  $\mathcal{D}$ , and (b)  $\psi_n$  from  $s$  to  $\mathcal{D}(\mathcal{E}_n)$  at energy state  $\mathcal{E}_n$ .

4.2 ANN モデルの構造 本研究では、原子間ポテンシャル関数作成のための ANN フレームワークである Atomic Energy Network (aenet)<sup>エラー! 参照元が見つかりません。</sup>を用いて、IDoS 推定のための ANN を作成する。ANN のネットワーク構造および活性化関数は、通常の原子間ポテンシャルに対する ANN モデルと同様である。Si 原子および C 原子に対して個別に、入力層 (第 0 層), 2 層の中間層 (第 1, 2 層), 出力層 (第 3 層) からなるネットワーク構造を与えた。各層は実数値の状態を持つノードの集合で構成されており、層ごとのノード数は順に 70, 10, 10, 1 である。原子構造から入力層の状態を決める基底関数は Behler (J.Chem.Phys. 134, 074106, 2011) による二体関数  $G^2$  および三体関数  $G^3$  を用いた。第  $l$  層 ( $l = 1, 2, 3$ ) におけるノード  $\alpha$  の状態  $x_\alpha^l$  は、活性化関数  $f_a^l$  を用いて次式で与えられる。

$$x_\alpha^l = f_a^l \left( w_{\alpha\beta}^l x_\beta^{l-1} \right) \quad (1)$$

ここで  $w_{\alpha\beta}^l$  は重みであり、機械学習によって最適化される変数である。中間層の活性化関数は Artrith・Urban (Comput. Mater. Sci. 114, 135, 2016) による  $f^4$  で与え、出力層の活性化関

数は恒等写像とした。

4.3 SiC への適用結果 機械学習のリファレンスデータとして用いるため、一般的な結晶構造 (SiC: 2H, 3C, NaCl 構造など。Si および C: bcc, fcc, ダイヤモンド構造など) の IDoS を第一原理計算により算出した。各結晶構造に対して平衡状態およびひずみを加えた構造をリファレンス構造とした。変形様式は引張、圧縮 (およびそれらの組合せ)、せん断とし、20% 程度までのひずみを与えた。リファレンス構造の個数は最大で 2235 個であり、そのうち 10% をテストセット、残りの 90% をトレーニングセットとして重み変数  $w_{\alpha\beta}^l$  の最適化に用いた。

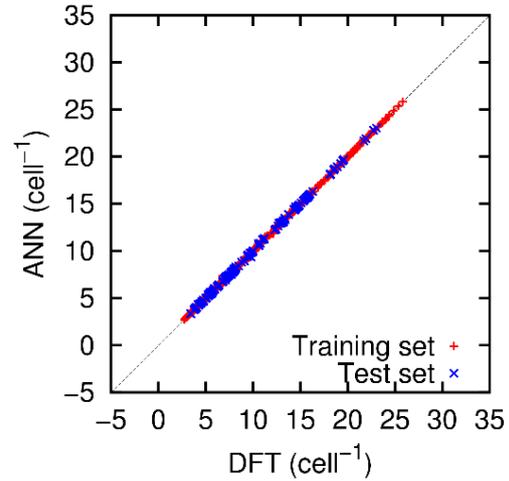


Fig. 2: Comparison of IDoS at  $\mathcal{E} = 20$  eV obtained by DFT and ANN.

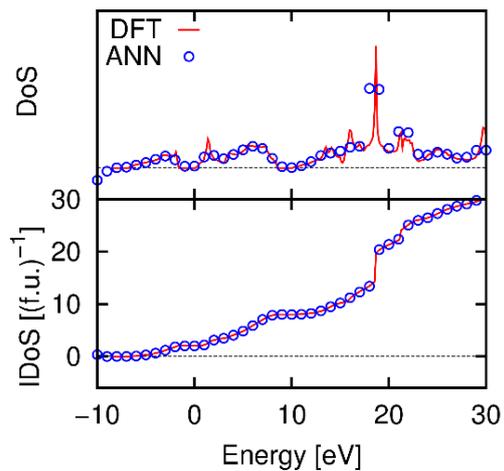


Fig. 3: DoS and IDoS profiles of 3C-SiC obtained by DFT and ANN.

Fig. 2 に、 $\mathcal{E} = 20$  eV での  $\mathcal{D}(\mathcal{E})$  のトレーニングセットおよびテストセットに対して ANN

と DFT の出力を比較した結果を示す. 各データ点が一つの原子構造 (リファレンス構造) に相当し, 横軸が DFT 計算により求めた  $D(\mathcal{E})$ , 縦軸が ANN により推定した  $D(\mathcal{E})$  である. すべてのデータ点に対角線  $y = x$  付近に位置しており, 作成した ANN が DFT 計算と同等の結果を与えていることがわかる. また,  $\mathcal{E} = 20$  eV 以外の点に関しても, DFT 計算の結果が ANN によって概ね良く再現できており, IDoS および DoS 全体が良く再現されることが示唆される.

ANN の出力結果をもとに再構成した 3C-SiC (zinc-blende 構造) の DoS および IDoS を Fig. 3 に示す. 各データ点が一つの ANN モデルに対応する. IDoS はほぼ完全に再現されており, また, DoS のプロファイルもかなり精度良く再現されていることがわかる. 問題点としては, エネルギーのサンプリング間隔 (1 eV) よりも狭い範囲での DoS の変化 (例えば  $\mathcal{E} = 20$  eV 付近のピーク) が不完全にしか再現できていないという点が挙げられる. これは ANN の精度の問題ではなく, エネルギーのサンプリング間隔の問題であるため, サンプリング点数 (すなわち作成する ANN の個数) を増やすことで解決できると考えられる. また, ポテンシャル関数のフィッティングにおける Force-Matching 法<sup>エラー!</sup> 照元が見つかりません. のように, 微分値と積分値を併用した最適化手法を採用することで, よりロバスト性の高いモデルが構築可能であると考えられる. 本結果から, 原子系解析において, 非常に多岐にわたる物理量が ANN モデリングの対象になりうることが示された.

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 1 件)

- ① Y. Umeno and A. Kubo, Building highly transferable interatomic models for atomistic simulation of device reliability, SGEM Conference Proceedings, Vol. III-6 (2017), pp.19-26 (doi:10.5593/sgem2016HB63)

[学会発表] (計 3 件)

- ① Y. Umeno and A. Kubo, Building highly transferable interatomic models for atomistic simulation of device reliability, SGEM Vienna GREEN 2016, 2016.11.2-5, Vienna, Austria
- ② 久保淳, 梅野宜崇, 機械学習を用いた原子構造体の電子状態密度の推定, 第 3 回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2018 年 5 月 25 日, 名古屋工業大学
- ③ Y. Umeno, M. Sato and A. Kubo, Atomistic modeling of multiphysics in nanostructures, ACEX2018 (12th International Conference on Advanced

Computational Engineering and Experimenting), 2018.7.1-5, Amsterdam, Netherland (Invited talk)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/>

## 6. 研究組織

(1) 研究代表者

梅野 宜崇 (UMENO, Yoshitaka)

東京大学・生産技術研究所・准教授

研究者番号: 40314231

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし