

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04175

研究課題名（和文）機械学習を用いた高精度原子間ポテンシャルに基づくMg合金の欠陥挙動の解明

研究課題名（英文）Defect Behavior in Mg Alloys with High-accuracy Machine-learning Interatomic Potentials

研究代表者

松中 大介（Matsunaka, Daisuke）

信州大学・学術研究院工学系・教授

研究者番号：60403151

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,500,000円

研究成果の概要（和文）：実用金属中最も軽量なマグネシウム（Mg）材料は次世代の軽量構造材料の有望な候補として注目を集めている。MgではHCP構造に由来して複数の変形モードが塑性変形に関係し、それぞれの変形モードに対する合金元素の効果が機械的性質に顕著に反映される。そこで本研究では、機械学習を採用して人工ニューラルネットワーク（ANN）の枠組みに基づく高精度な原子間ポテンシャルを開発し、多様な欠陥構造やMgと合金元素との異種原子間相互作用にも適用可能なANN原子間ポテンシャルを用いてそれぞれの変形モードを担う種々の欠陥の挙動とその合金元素の効果を定量的に明らかにすることを目的とする。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体材料の力学的挙動の解析に原子系のシミュレーションが用いられるようになってから現在に至るまで、精度の良い原子間ポテンシャルの開発は重要な課題であり続けている。ANN原子間ポテンシャルに関しては、近年注目を集めているが、結晶性固体において弾性場と欠陥構造を精度よく表現することを志向した開発例は未だ少ない。本研究はこのような研究動向に先駆けて、ANN原子間ポテンシャルの構築技術を確立するものであり、Mg合金の研究を格段に進めるだけでなく、計算力学・計算科学の分野におけるインパクトは非常に高い。

研究成果の概要（英文）：Magnesium has been of increasingly interest as a promising light structural material because of its low density. Plastic deformation in Mg is contributed by non-basal slips and twinning as well as basal slip. Effects of alloying elements on these deformation modes are reflected to mechanical properties in Mg alloys. In this study, high-accuracy interatomic potentials of Mg alloys based on artificial neural network (ANN) have been developed by using machine learning techniques. The ANN interatomic potentials can describe various defects corresponding to the deformation modes in a hcp structure and interactions between Mg and alloying element atoms. By using the developed ANN interatomic potentials, behaviors of the defects and effects of alloying elements have been analyzed.

研究分野：計算材料科学

キーワード：機械学習ポテンシャル 人工ニューラルネットワーク マグネシウム合金 底面転位 合金元素

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

### 1. 研究開始当初の背景

対称性の低い HCP 構造を持つ Mg 材料においては、等価なすべり系の数が少なく、主すべり系である底面すべりのみでは多結晶材料の十分な塑性変形に求められるフォン・ミーゼスの条件を満たすことができない。他の変形モードの活動が重要となるが、柱面すべりや錐面すべりなどの非底面すべりは室温域では臨界分解せん断応力 (CRSS) が非常に大きいためほとんど駆動しない。しかし、Y などの希少金属元素を添加したいくつかの Mg 合金では著しく延性が向上し、そこでは非底面すべりの活動が観察されている。また Mg 材料では駆動するすべり系が限定されることから双晶変形も重要な役割を担っており、双晶変形の形成メカニズムやその成長挙動を解明することも機械的性質の理解には不可欠である。Mg 合金における合金元素の効果の解明には、底面すべりや非底面すべり、双晶変形などの各変形モードに対する定量的な評価が必要である。

### 2. 研究の目的

固体中の欠陥の振る舞いを解析するアプローチとして、MD シミュレーションは原子系の運動を力学法則に基づいて追跡することで材料中の欠陥のダイナミクスを明確な物理現象として記述することができ、強力な研究手法の一つである。しかしながら、古典的な MD シミュレーションで用いられる多くの原子間ポテンシャルは欠陥構造に対する精度が一般的には保証されておらず、加えて、合金系に対しても異種原子間の相互作用を首尾良く与える原子間ポテンシャルが限られている。一方、量子力学に基づき電子状態を求める第一原理計算は任意の原子構造や元素の組み合わせに対してエネルギーと各原子に働く力を高精度に計算可能であるが、膨大な計算コストのため、例えば転位周囲などの長距離の応力場を表現するサイズの解析モデルを扱うことが容易ではない。そこで本研究では、第一原理計算と同等の精度を持ちつつ欠陥構造や異種原子間相互作用に対しても適用性を有するような原子間ポテンシャルを人工ニューラルネットワーク (ANN) の枠組みに基づいて開発し、Mg 合金における種々の欠陥の挙動と合金元素による効果を高精度に評価することを目的とする。

### 3. 研究の方法

ANN はパターン認識等で用いられる脳神経系の情報処理機構を模した数理モデルであり (図 1)、普遍性定理と呼ばれる性質によって任意の関数を任意の精度で近似可能とされている。ANN 原子間ポテンシャルは固体電解質や表面反応などの分野で近年適用が行われているが、金属材料の塑性変形を対象とするポテンシャル開発は非常に少なく、その構築スキームも未だほとんど確立していない。そのため、本研究で得られる知見は機械学習による ANN 原子間ポテンシャルの開発技術の発展に貢献し、他の金属材料の研究に対しても有用な方法論の確立につながることを期待される。また、第一原理計算の電子状態の情報を欠陥の生成・成長や欠陥間相互作用などの上位スケールの MD 解析に伝達するという点ではマルチスケールモデリングの進展にも寄与すると考えられる。

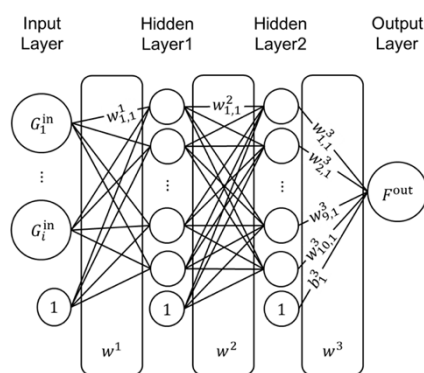


図 1 人工ニューラルネットワークの概略

### 4. 研究成果

#### 【純 Mg を対象とした学習データおよび記述子の検討】

物理的描像を持たない数理モデルである ANN において原子構造をいかに表現するかという点に関して重要な基底関数を検討した。Behler-Parrinello によって提案された対称関数と近年提案されているチェビシェフ多項式をそれぞれ適用し、純 Mg の ANN ポテンシャルを開発した。ANN ポテンシャルの機械学習に適切なりファレンスデータを検証するために、弾性変形や積層欠陥などの機械的特性に関連する最重要な構造モデルに対する第一原理計算の結果を約 12000 個用意し、`aenet` によって ANN のパラメータの最適化を行なうことで学習させたポテンシャルの精度を比較した。図 2 は ANN の学習課程における平均絶対誤差 (MAE) の推移を表しており、訓練データだけでなくテストデータに対しても誤差が収束しており、本研究での ANN の学習においては明確な過学習は見られなかった。純

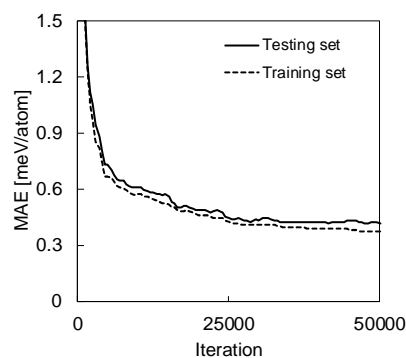


図 2 ANN 訓練における MAE の収束 (引用文献)

表 1 純 Mg の ANN に対する凝集エネルギー，格子定数，弾性定数の精度評価（引用文献）

	$\epsilon_c$ [eV]	$a$ [Å]	$c$ [Å]	$C_{11}$ [GPa]	$C_{12}$ [GPa]	$C_{13}$ [GPa]	$C_{33}$ [GPa]	$C_{44}$ [GPa]
DFT	-1.52	3.19	5.18	67.4	21.1	19.5	64.7	20.7
ANN	-1.52	3.19	5.20	68.8	24.3	19.2	66.9	19.2

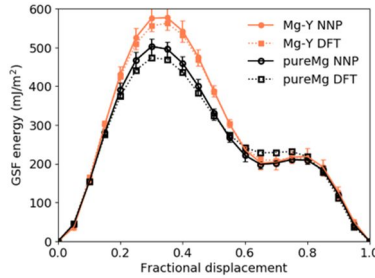


図 3 2 次錐面らせん転位の転位芯構造解析（引用文献）

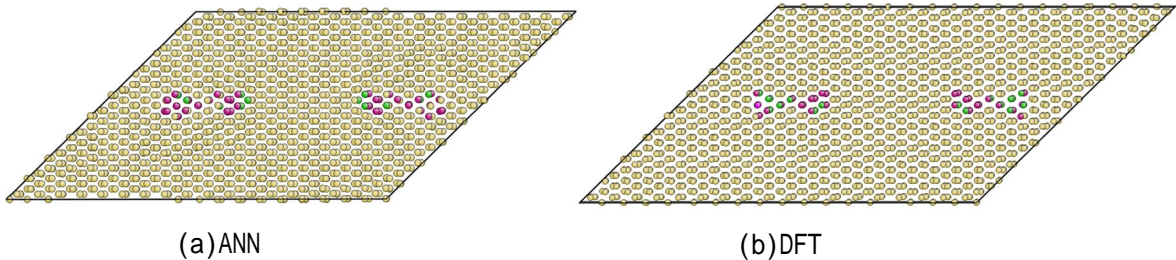


図 4 2 次錐面らせん転位の転位芯構造解析

Mg に対して開発した ANN ポテンシャルは，弾性定数（表 1），各すべり系の一般化積層欠陥エネルギー曲線，表面エネルギー，粒界エネルギーをよく再現することができた。

【2 元系 Mg 合金の ANN ポテンシャルの開発】

2 元系 Mg-X 合金として，Mg-Y，Mg-Ca，Mg-Al，Mg-Zn を対象とし，ANN ポテンシャルを作成した。合金系においては，すべり面内の剛体的変位だけでなく，Mg と合金元素との原子半径差による原子面間隔の変化を考慮したりファレンスデータを追加することにより，全ての合金系で各すべり系の一般化積層欠陥エネルギーをおおむね表現する ANN ポテンシャルの開発に成功した（図 4）。

【Mg における転位芯の構造解析と合金元素の相互作用の評価】

本研究で得られた ANN ポテンシャルを世界的な分子動力学のデファクトコードである LAMMPS 上で用いて実際に欠陥の MD シミュレーションを実施することに成功した。これにより，底面転位および 2 次錐面転位の転位芯構造を解析し，開発した ANN ポテンシャルが第一原理計算と一致した転位芯構造を再現を確認することができた（図 4）。また，底面転位と合金元素との相互作用を解析し，転位の拡張に対する合金元素の影響について先行研究の第一原理計算の結果を再現することができた。

< 引用文献 >

松中 大介，小細 浩輔，椎原 良典，森 英喜，“ニューラルネットワークに基づくマグネシウムの原子間ポテンシャルの開発”，日本機械学会第 34 回計算力学講演会講演論文集（2021）。

松中 大介，永田 隆，椎原 良典，森 英喜，“2 元系 Mg-X 合金に対するニューラルネットワーク型原子間ポテンシャルの開発”，日本材料学会第 2 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム講演論文集（2022）。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Y. Shiihara, R. Kanazawa, D. Matsunaka, I. Lobzenko, T. Tsuru, M. Kohyama, and H. Mori	4. 巻 207
2. 論文標題 Artificial neural network molecular mechanics of iron grain boundaries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114268-1-4
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.scriptamat.2021.114268	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 須藤海志, 松中 大介, 染川 英俊	4. 巻 85
2. 論文標題 ナノインデンテーションによるマグネシウムの粒界近傍での局所塑性特性	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 1-6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2320/jinstmet.JD202001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 3件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 松中 大介, 小細 浩輔, 椎原 良典, 森 英喜
2. 発表標題 ニューラルネットワークに基づくマグネシウムの原子間ポテンシャルの開発
3. 学会等名 日本機械学会第34回計算力学講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松中 大介
2. 発表標題 ミルフィーユ構造を持つマグネシウム合金のフォノン状態の第一原理解析
3. 学会等名 軽金属学会第138回春期大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Daisuke Matsunaka
2. 発表標題 First-principles Calculations of Phonon States in LPSO Magnesium Alloys
3. 学会等名 12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (Mg2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松中 大介, 永田 隆, 椎原 良典, 森 英喜
2. 発表標題 2元系Mg-X合金に対するニューラルネットワーク型原子間ポテンシャルの開発
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松中 大介
2. 発表標題 計算科学と微小力学試験によるマグネシウムの変形機構と合金元素効果
3. 学会等名 日本金属学会2022年度秋期第171回講演大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Daisuke Matsunaka, So Yoshikawa
2. 発表標題 Energetic Analysis of Homogeneous Nucleation of {10-12} Twin in Magnesium
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松中  大介
2. 発表標題 ニューラルネットワークに基づく異材界面の原子間ポテンシャルの開発
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 松中  大介
2. 発表標題 固体の欠陥挙動の微視的理解に向けた計算材料科学と一歩外へ
3. 学会等名 学術講演会「材料・設計・熱流体シミュレーションの最前線」(招待講演)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関